

Ableitungsfreie Verfahren für nichtlineare Optimierungsprobleme

JOCHEN W. SCHMIDT und KLAUS VETTERS

Herrn Prof. Dr. Dr. h. c. L. Collatz zum 60. Geburtstag am 6. 7. 1970 gewidmet

Eingegangen am 11. Juni 1969

Summary. In the paper the authors develop approximation methods for nonlinear programming problems using function-values only. The idea is to approximate the objective function by a quadratic interpolating polynomial. It is shown how to construct methods of an arbitrarily high convergence rate. By aid of the efficiency index methods are selected from the class in view which require a minimal number of function-values in order to guarantee a given exactness.

1. Einleitung

Es seien K eine konvexe, abgeschlossene Teilmenge des d -dimensionalen Vektorraumes $R = R_d$ und f eine reellwertige Funktion von K in R_1 . Betrachtet wird die Optimierungsaufgabe

$$f(x) = \text{Extremum!} \quad \text{für } x \in K,$$

wobei auch $K = R$ sein kann. Es werden iterative Näherungsverfahren entwickelt und untersucht, welche ausschließlich Funktionswerte verwenden und welche im wesentlichen dadurch entstehen, daß die Funktion f mit Hilfe bereits bekannter Näherungen durch ein geeignetes quadratisches Interpolationspolynom ersetzt wird. Es wird eine einfache Konstruktionsmöglichkeit für Verfahren mit beliebig hoher Konvergenzgeschwindigkeit aufgezeigt, von denen dann diejenigen mit Hilfe des Wirkungsgrades ausgewählt werden, welche bei gleichem Genauigkeitsgewinn mit der geringsten Zahl von Funktionswertberechnungen auskommen.

Nach der Bereitstellung von geeigneten Interpolationsformeln werden zunächst Aufgaben ohne Restriktionen ($K = R$) betrachtet. Einmal kommt diesen Aufgaben eigenes Interesse zu. Zum anderen beruhen verschiedene Verfahren für Aufgaben mit Restriktionen ($K \neq R$) darauf, daß man sie in passender Weise in eine Aufgabe ohne Restriktionen überführt. Hier sei z. B. an das Verfahren von Fiacco und McCormick erinnert (s. etwa [4]). Die Ausführungen über Aufgaben ohne Nebenbedingungen knüpfen an die Arbeiten [9, 12] und Poll [7] an und übertragen die von Traub [13] sowie in [11] für die Gleichungsauflösung entwickelte Methode zur Steigerung der Konvergenzgeschwindigkeit auf Extremwertaufgaben. Außerdem wird auf eine Modifikation eingegangen, bei der die pro Schritt erforderliche Auflösung von linearen Gleichungen genähert nach einer Erweiterung des Schulz-Verfahrens erfolgt, s. [10]. Auf diese Möglichkeit wurde zuerst von Ulm [15] und Helfrich [3] beim Newton-Verfahren hingewiesen.

Bei Aufgaben mit Restriktionen, welche danach behandelt werden, ist die Approximation der Zielfunktion durch eine quadratische Funktion besonders angepaßt, falls \mathbf{K} durch lineare Gleichungen oder Ungleichungen beschrieben wird, da für die entstehende Aufgabe der quadratischen Optimierung mehrere einfache Algorithmen vorhanden sind, (z.B. das Verfahren von Wolfe in der vereinfachten Form von Collatz und Wetterling [1]). Erste Untersuchungen in der genannten Richtung stammen von Levitin und Poljak [5] und von Ulm und Poll [16].

2. Quadratische Interpolation und Steigungen

Es wird die Bemerkung vorangestellt, daß es für die Konvergenz der zu entwickelnden Verfahren zweckmäßig ist, die Stützstellen des Interpolationspolynoms in Knoten eines (orthogonalen) Gitters zu legen (s. Fig. 1 und 2).

Der Vektor $\mathbf{x} \in \mathbf{R}$ habe die Komponenten $(\mathbf{x})_i = x_i$ und die Matrix \mathbf{A} die Elemente $(\mathbf{A})_{ik} = a_{ik}$. Es sollen

$$\mathbf{x}\mathbf{y} = \sum_{i=1}^d x_i y_i, \quad \mathbf{A}\mathbf{x}\mathbf{y} = \sum_{i,k=1}^d a_{ik} x_k y_i, \quad \|\mathbf{x}\|^2 = \mathbf{x}\mathbf{x} \quad \text{und} \quad \|\mathbf{A}\|^2 = \sum_{i,k=1}^d |a_{ik}|^2$$

bedeuten¹. Falls \mathbf{A}^T die Transponierte von \mathbf{A} bezeichnet, gilt $\mathbf{A}\mathbf{x}\mathbf{y} = \mathbf{A}^T\mathbf{y}\mathbf{x}$. Die Funktion f sei in einem achsenparallelen „Quader“ \mathbf{Q} von \mathbf{R} erklärt und partiell differenzierbar². Die partiellen Differenzenquotienten von f , auch die mit wiederholtem Argument, werden wie üblich definiert (s. etwa Willers [18]); z.B. seien

$$\delta f(\dots, u_i v_i, \dots) = \frac{1}{u_i - v_i} \{f(\dots, u_i, \dots) - f(\dots, v_i, \dots)\},$$

$$\delta^2 f(\dots, u_i v_i w_i, \dots) = \frac{1}{u_i - w_i} \{\delta f(\dots, u_i v_i, \dots) - \delta f(\dots, v_i w_i, \dots)\}.$$

Außerdem werde die Bezeichnung

$$\delta f(v_1^{i-1}, u_i v_i, u_{i+1}^d) = \delta f(v_1, \dots, v_{i-1}, u_i v_i, u_{i+1}, \dots, u_d)$$

und Entsprechendes für die weiteren Differenzenquotienten vereinbart. Nach [8] wird der erste Steigung genannte Vektor $\delta f(\mathbf{u}, \mathbf{v})$ durch

$$(\delta f(\mathbf{u}, \mathbf{v}))_i = \delta f(v_1^{i+1}, u_i v_i, u_{i+1}^d)$$

definiert. Man bestätigt sofort

$$(2.1) \quad f(\mathbf{u}) - f(\mathbf{v}) = \delta f(\mathbf{u}, \mathbf{v})(\mathbf{u} - \mathbf{v}), \quad \delta f(\mathbf{u}, \mathbf{u}) = f'(\mathbf{u}) \quad \text{für } \mathbf{u}, \mathbf{v} \in \mathbf{Q}.$$

Die zweite Steigung $\delta^2 f(\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w})$ ist eine Matrix, die entsprechend [14] die Elemente

$$(\delta^2 f(\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w}))_{ik} = \begin{cases} 0 & \text{für } i < k \\ \delta^2 f(w_1^{i-1}, u_i v_i w_k, u_{i+1}^d) & \text{für } i = k \\ \delta^2 f(w_1^{k-1}, v_k w_k, v_{k+1}^{i-1}, u_i v_i, u_{i+1}^d) & \text{für } i > k \end{cases}$$

¹ Die Matrizennorm muß, wie es hier der Fall ist, passend zur Vektornorm sein.

² Bei den zu behandelnden Verfahren sind bestimmte Differenzierbarkeitsforderungen zu stellen, da Differenzenquotienten mit wiederholtem Argument auftreten können. Bei der praktischen Rechnung kommt dieser Fall jedoch kaum vor. Auch bleibt dann die Möglichkeit, zu einem sog. vereinfachten Verfahren überzugehen.

hat. Es gelten

$$\begin{aligned}
 (2.2) \quad & \delta f(\mathbf{u}, \mathbf{v}) - \delta f(\mathbf{u}, \mathbf{w}) = \delta^2 f(\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w}) (\mathbf{v} - \mathbf{w}) \\
 & \delta f(\mathbf{u}, \mathbf{w}) - \delta f(\mathbf{v}, \mathbf{w}) = \delta^2 f(\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w})^T (\mathbf{u} - \mathbf{v}) \\
 & \delta^2 f(\mathbf{u}, \mathbf{u}, \mathbf{u}) + \delta^2 f(\mathbf{u}, \mathbf{u}, \mathbf{u})^T = f''(\mathbf{u}) \quad \text{für } \mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w} \in Q.
 \end{aligned}$$

Sind außerdem die dritten partiellen Differenzenquotienten von f auf Q vorhanden und beschränkt, so existiert eine von $\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w}, \mathbf{z} \in Q$ unabhängige Zahl a mit³

$$\begin{aligned}
 (2.3) \quad & \|\delta^2 f(\mathbf{u}, \mathbf{w}, \mathbf{z}) - \delta^2 f(\mathbf{v}, \mathbf{w}, \mathbf{z})\| \leq a \|\mathbf{u} - \mathbf{v}\|, \\
 & \|\delta^2 f(\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{z}) - \delta^2 f(\mathbf{u}, \mathbf{w}, \mathbf{z})\| \leq a \|\mathbf{v} - \mathbf{w}\|, \\
 & \|\delta^2 f(\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w}) - \delta^2 f(\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{z})\| \leq a \|\mathbf{w} - \mathbf{z}\|.
 \end{aligned}$$

Der Beweis ist nicht schwierig, vgl. [7] oder [12]. Aus (2.3) lassen sich die folgenden Ungleichungen gewinnen, welche für zwei der behandelten Verfahren entscheidend sind:

$$\begin{aligned}
 (2.4) \quad & \|\delta f(\mathbf{y}, \mathbf{z}) + \delta^2 f(\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w}) (\mathbf{y} - \mathbf{z}) - f'(\mathbf{x}) \\
 & - \{\delta^2 f(\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w}) + \delta^2 f(\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w})^T\} (\mathbf{y} - \mathbf{x})\| \\
 & \leq p \{\|\mathbf{u} - \mathbf{x}\| + \|\mathbf{v} - \mathbf{x}\| + \|\mathbf{w} - \mathbf{x}\| + \|\mathbf{y} - \mathbf{x}\| + \|\mathbf{z} - \mathbf{x}\|\} \{\|\mathbf{y} - \mathbf{x}\| + \|\mathbf{z} - \mathbf{x}\|\}, \\
 (2.5) \quad & \|f''(\mathbf{x}) - \delta^2 f(\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w}) - \delta^2 f(\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w})^T\| \leq p \{\|\mathbf{u} - \mathbf{x}\| + \|\mathbf{v} - \mathbf{x}\| + \|\mathbf{w} - \mathbf{x}\|\} \\
 & \quad \text{für } \mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}, \mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w} \in Q.
 \end{aligned}$$

Dabei ist $p = 2a$ gesetzt worden.

Beweis. Zur Ungleichung (2.5) führen die Umformung

$$\begin{aligned}
 \delta^2 f(\mathbf{x}, \mathbf{x}, \mathbf{x}) - \delta^2 f(\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w}) &= \{\delta^2 f(\mathbf{x}, \mathbf{x}, \mathbf{x}) - \delta^2 f(\mathbf{u}, \mathbf{x}, \mathbf{x})\} \\
 &+ \{\delta^2 f(\mathbf{u}, \mathbf{x}, \mathbf{x}) - \delta^2 f(\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{x})\} + \{\delta^2 f(\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{x}) - \delta^2 f(\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w})\}
 \end{aligned}$$

und die entsprechende für die transponierte Matrix, falls man danach die Abschätzungen (2.3) anwendet. Wegen

$$\delta f(\mathbf{y}, \mathbf{z}) - f'(\mathbf{x}) = \delta^2 f(\mathbf{y}, \mathbf{x}, \mathbf{z})^T (\mathbf{y} - \mathbf{x}) + \delta^2 f(\mathbf{x}, \mathbf{z}, \mathbf{x}) (\mathbf{z} - \mathbf{x})$$

ist der Vektor auf der linken Seite von (2.4) gleich

$$\{\delta^2 f(\mathbf{x}, \mathbf{z}, \mathbf{x}) - \delta^2 f(\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w})\} (\mathbf{z} - \mathbf{x}) + \{\delta^2 f(\mathbf{y}, \mathbf{x}, \mathbf{z})^T - \delta^2 f(\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w})^T\} (\mathbf{y} - \mathbf{x}),$$

woraus sich nach Einfügungen der eben vorgeführten Art die Abschätzung (2.4) ergibt.

Mit den eingeführten Steigungen wird das folgende Interpolationspolynom gebildet:

$$(2.6) \quad g(\mathbf{x}) = f(\mathbf{u}) + \delta f(\mathbf{u}, \mathbf{v}) (\mathbf{x} - \mathbf{u}) + \delta^2 f(\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w}) (\mathbf{x} - \mathbf{v}) (\mathbf{x} - \mathbf{u}).$$

³ Bei den angegebenen Normen folgen aus (2.3) sofort die entsprechenden Ungleichungen für die transponierten Matrizen, z.B. $\|\delta^2 f(\mathbf{u}, \mathbf{w}, \mathbf{z})^T - \delta^2 f(\mathbf{v}, \mathbf{w}, \mathbf{z})^T\| \leq a \|\mathbf{u} - \mathbf{v}\|$. Bei anderen Normen trifft dies ebenfalls zu; eventuell ist die Konstante a abzuändern.

Man bestätigt nach einfacher Rechnung, daß für die $\frac{1}{2}(d+2)(d+1)$ Vektoren

$$\mathbf{y}_{ik} = (w_1, \dots, w_i, v_{i+1}, \dots, v_k, u_{k+1}, \dots, u_d) \quad \text{mit} \quad 0 \leq i \leq k \leq d,$$

zu denen auch $\mathbf{u} = \mathbf{y}_{00}$, $\mathbf{v} = \mathbf{y}_{0d}$ und $\mathbf{w} = \mathbf{y}_{dd}$ gehören, die Interpolationsbedingung $g(\mathbf{y}_{ik}) = f(\mathbf{y}_{ik})$ erfüllt ist. Die Vektoren \mathbf{y}_{ik} sind außerdem genau diejenigen, deren zugehörige Funktionswerte zur Angabe von g erforderlich sind. Es sind dies also genau die verwendeten Stützstellen. Für $d=3$ sind sie in der Fig. 1 als volle Kreise eingezeichnet.

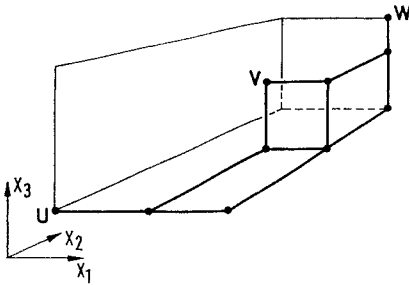


Fig. 1. Stützstellen von $g(\mathbf{x})$

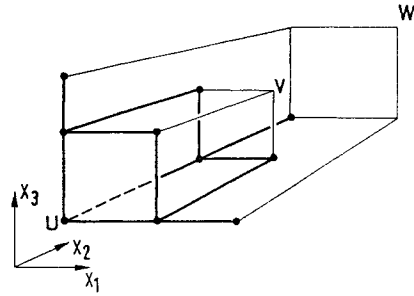


Fig. 2. Stützstellen von $\tilde{g}(\mathbf{x})$

Für die Ableitung von g ergibt sich

$$(2.7) \quad g'(\mathbf{x}) = \delta f(\mathbf{u}, \mathbf{v}) + \delta^2 f(\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w})(\mathbf{u} - \mathbf{v}) \\ + \{ \delta^2 f(\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w}) + \delta^2 f(\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w})^T \} (\mathbf{x} - \mathbf{u}).$$

Es wird weiterhin mit einer Interpolationsformel gearbeitet, welche die folgenden $\frac{1}{2}(d+2)(d+1)$ Stützstellen verwendet:

$$\mathbf{u}, (u_1, \dots, u_{i-1}, v_i, u_{i+1}, \dots, u_d), (u_1, \dots, u_{i-1}, w_i, u_{i+1}, \dots, u_d), \\ (u_1, \dots, u_{i-1}, v_i, u_{i+1}, \dots, u_{k-1}, v_k, u_{k+1}, \dots, u_d) \quad \text{für} \quad i, k = 1, \dots, d \quad \text{und} \quad i < k.$$

Sie sind für $d=3$ der Fig. 2 zu entnehmen. Das zugehörige Interpolationspolynom lautet

$$\tilde{g}(\mathbf{x}) = f(\mathbf{u}) + \sum_{i=1}^d \delta f(u_1^{i-1}, u_i, v_i, u_{i+1}^d) (x_i - u_i) \\ + \sum_{i=1}^d \delta^2 f(u_1^{i-1}, u_i, v_i, w_i, u_{i+1}^d) (x_i - u_i) (x_i - v_i) \\ + \sum_{i=1}^d \sum_{k=i+1}^d \delta^2 f(u_1^{i-1}, u_i, v_i, u_{i+1}^{k-1}, u_k, v_k, u_{k+1}^d) (x_i - u_i) (x_k - u_k),$$

während für seine Ableitung

$$(2.8) \quad \tilde{g}'(\mathbf{x}) = \Delta f(\mathbf{u}, \mathbf{v}) + \hat{\Delta}^2 f(\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w})(\mathbf{u} - \mathbf{v}) + \Delta^2 f(\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w})(\mathbf{x} - \mathbf{u})$$

folgt. Dabei wurden die Abkürzungen

$$\begin{aligned} (\Delta f(\mathbf{u}, \mathbf{v}))_i &= \delta f(u_1^{i-1}, u_i, v_i, u_{i+1}^d), \\ (\hat{\Delta}^2 f(\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w}))_{ik} &= \begin{cases} \delta^2 f(u_1^{i-1}, u_i, v_i, w_i, u_{i+1}^d) & \text{für } i = k \\ 0 & \text{für } i \neq k, \end{cases} \\ (\Delta^2 f(\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w}))_{ik} &= \begin{cases} 2\delta^2 f(u_1^{i-1}, u_i, v_i, w_i, u_{i+1}^d) & \text{für } i = k \\ \delta^2 f(u_1^{i-1}, u_i, v_i, u_{i+1}^{k-1}, u_k, v_k, u_{k+1}^d) & \text{für } i < k \\ \delta^2 f(u_1^{k-1}, u_k, v_k, u_{k+1}^{i-1}, u_i, v_i, u_{i+1}^d) & \text{für } i > k \end{cases} \end{aligned}$$

verwendet [12]. Es gelten neben $\Delta f(\mathbf{u}, \mathbf{u}) = f'(\mathbf{u})$ und $\Delta^2 f(\mathbf{u}, \mathbf{u}, \mathbf{u}) = f''(\mathbf{u})$ die später benötigten Ungleichungen

$$(2.9) \quad \|\Delta f(\mathbf{y}, \mathbf{z}) + \hat{\Delta}^2 f(\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w})(\mathbf{y} - \mathbf{z}) - f'(\mathbf{x}) - \Delta^2 f(\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w})(\mathbf{y} - \mathbf{x})\| \\ \leq \rho \{\|\mathbf{u} - \mathbf{x}\| + \|\mathbf{v} - \mathbf{x}\| + \|\mathbf{w} - \mathbf{x}\| + \|\mathbf{y} - \mathbf{x}\| + \|\mathbf{z} - \mathbf{x}\|\} \{\|\mathbf{y} - \mathbf{x}\| + \|\mathbf{z} - \mathbf{x}\|\},$$

$$(2.10) \quad \|f''(\mathbf{x}) - \Delta^2 f(\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w})\| \leq \rho \{\|\mathbf{u} - \mathbf{x}\| + \|\mathbf{v} - \mathbf{x}\| + \|\mathbf{w} - \mathbf{x}\|\} \\ \text{für } \mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}, \mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w} \in Q.$$

Man kann sie ebenso beweisen, wie es für die in [12] zentralen Ungleichungen dort vorgeführt wurde.

3. Verfahren für Aufgaben ohne Restriktionen

Es sei k eine nichtnegative ganze Zahl, deren zweckmäßige Bestimmung später im Abschnitt 6 beschrieben wird.

Verfahren 1. Startvektoren: $\mathbf{x}_0, \mathbf{y}_0, \mathbf{z}_0$;

Iterationsvorschrift: $\mathbf{w}_{n,-1} = \mathbf{y}_n, \mathbf{w}_{n,0} = \mathbf{z}_n$

$$\Delta f(\mathbf{w}_{n,v}, \mathbf{w}_{n,v-1}) + \hat{\Delta}^2 f(\mathbf{z}_n, \mathbf{y}_n, \mathbf{x}_n)(\mathbf{w}_{n,v} - \mathbf{w}_{n,v-1}) \\ + \Delta^2 f(\mathbf{z}_n, \mathbf{y}_n, \mathbf{x}_n)(\mathbf{w}_{n,v+1} - \mathbf{w}_{n,v}) = \mathbf{0} \quad (v = 0, \dots, k),$$

$$\mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{w}_{n,k-1}, \quad \mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{w}_{n,k}, \quad \mathbf{z}_{n+1} = \mathbf{w}_{n,k+1} \quad (n = 0, 1, \dots).$$

Verfahren 2. Startvektoren: $\mathbf{x}_0, \mathbf{y}_0, \mathbf{z}_0$;

Iterationsvorschrift: $\mathbf{w}_{n,-1} = \mathbf{y}_n, \mathbf{w}_{n,0} = \mathbf{z}_n$

$$\delta f(\mathbf{w}_{n,v}, \mathbf{w}_{n,v-1}) + \delta^2 f(\mathbf{z}_n, \mathbf{y}_n, \mathbf{x}_n)(\mathbf{w}_{n,v} - \mathbf{w}_{n,v-1}) \\ + \{\delta^2 f(\mathbf{z}_n, \mathbf{y}_n, \mathbf{x}_n) + \delta^2 f(\mathbf{z}_n, \mathbf{y}_n, \mathbf{x}_n)^T\}(\mathbf{w}_{n,v+1} - \mathbf{w}_{n,v}) = \mathbf{0} \quad (v = 0, \dots, k),$$

$$\mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{w}_{n,k-1}, \quad \mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{w}_{n,k}, \quad \mathbf{z}_{n+1} = \mathbf{w}_{n,k+1} \quad (n = 0, 1, \dots).$$

Man bestimmt also in beiden Verfahren den Vektor $\mathbf{w}_{n,v+1}$ jeweils aus einem linearen Gleichungssystem, dessen Koeffizientenmatrix unabhängig von v ist. Für $k=0, d=0$ fallen beide Verfahren zusammen; für diesen Fall sind sie in [9] betrachtet worden, während für $k=0, d>1$ das Verfahren 1 in [12] und das Verfahren 2 in [7] behandelt worden sind. Für $k=0$ ist auch die Entstehung der Verfahren leicht zu erkennen. Der Vektor $\mathbf{z}_{n+1} = \mathbf{w}_{n,1}$ löst dann die Gleichung $g'(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ bzw. $\tilde{g}'(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$, wobei das Interpolationspolynom g bzw. \tilde{g} durch die

Vektoren z_n, z_{n-1} und z_{n-2} festgelegt wird. Die Gleichung $g'(x) = 0$ bzw. $\tilde{g}'(x) = 0$ kann als Näherung für $f'(x) = 0$ angesehen werden.

Es wird in diesem und dem folgenden Abschnitt vorausgesetzt, daß ein stationärer Vektor x^* von f existiert, d.h. x^* erfülle $f'(x) = 0$. Außerdem sei die zugehörige Funktionalmatrix regulär,

$$(3.1) \quad \|f''(x^*)^{-1}\| \leq q.$$

In einer Umgebung

$$Q_\varrho(x^*) = \{x \in R: |x_i - x_i^*| \leq \varrho \text{ für } i = 1, \dots, d\}$$

mit $\varrho > 0$ mögen die dritten partiellen Differenzenquotienten von f beschränkt sein, so daß dort die Ungleichungen (2.3), (2.9) und (2.10) gelten.

Es werden jetzt für den Konvergenzsatz benötigte Zahlenfolgen eingeführt.

Zahlenfolgen 1. Startwerte: r_0, s_0, t_0 .

Rekursionsformel für $k = 2l$: $m_n = 10pq/(1 - 3pqr_n)$, $q_n = m_n r_n$,

$$r_{n+1} = q_n^l s_n, \quad s_{n+1} = q_n^l t_n, \quad t_{n+1} = q_n^{l+1} s_n = q_n r_{n+1} \quad (n = 0, 1, \dots).$$

Rekursionsformel für $k = 2l + 1$: $m_n = 10pq/(1 - 3pqr_n)$, $q_n = m_n r_n$,

$$r_{n+1} = q_n^l t_n, \quad s_{n+1} = q_n^{l+1} s_n, \quad t_{n+1} = q_n^{l+1} t_n = q_n r_{n+1} \quad (n = 0, 1, \dots).$$

Aussage 1. Es wird neben $3pqr_0 < 1$ die Ungleichungskette

$$(3.2) \quad q_0 s_0 \leq t_0 \leq s_0 \leq r_0 \leq \varrho$$

vorausgesetzt. Dann gelten für $n \geq 0$

- a) $r_n \leq r_{n-1} \leq \dots \leq r_0 \leq \varrho$, b) $q_n \leq q_{n-1} \leq \dots \leq q_0 \leq 1$,
c) $q_n s_n \leq t_n \leq s_n \leq r_n$.

Außerdem ergibt sich, falls $n \geq 2$ ist, für $k = 2l$

$$(3.3) \quad r_{n+1} \leq m_0^{2l+1} r_n^l r_{n-1}^{l+1} r_{n-2}$$

und für $k = 2l + 1$

$$(3.4) \quad r_{n+1} \leq m_0^{l+1} r_n^{l+1} r_{n-1}.$$

Beweis. Für $n = 0$ sind a), b) und c) nach Voraussetzung erfüllt. Der Schluß von n auf $n + 1$ kann im Falle $k = 2l$ wie folgt geführt werden: Wegen $q_n \leq 1$ ist $r_{n+1} \leq s_n \leq r_n$ und somit auch $q_{n+1} \leq q_n$. Weiterhin folgert man

$$q_{n+1} s_{n+1} \leq q_n s_{n+1} = q_n^{l+1} t_n \leq q_n^{l+1} s_n = t_{n+1} \leq q_n^l t_n = s_{n+1} \leq q_n^l s_n = r_{n+1}.$$

Im Falle $k = 2l + 1$ ergibt sich wegen $q_n \leq 1$ sofort $r_{n+1} \leq t_n \leq r_n$ und $q_{n+1} \leq q_n$, sowie

$$q_{n+1} s_{n+1} \leq q_n s_{n+1} = q_n^{l+2} s_n \leq q_n^{l+1} t_n = t_{n+1} \leq q_n^{l+1} s_n = s_{n+1} \leq q_n^l t_n = r_{n+1}.$$

Damit sind a), b) und c) bestätigt. Die Ungleichung (3.3) erhält man über

$$r_{n+1} = q_n^l s_n = q_n^l q_{n-1}^l t_{n-1} = q_n^l q_{n-1}^l t_{n-1} = q_n^l q_{n-1}^l q_{n-2} r_{n-1} \leq m_0^{2l+1} r_n^l r_{n-1}^{l+1} r_{n-2}$$

und die Ungleichung (3.4) über

$$r_{n+1} = q_n^l t_n = q_n^l q_{n-1} r_n \leq m_0^{l+1} r_n^{l+1} r_{n-1}.$$

Zurückgehend auf die Verfahren 1 und 2 wird verlangt, daß für ihre Startvektoren

$$(3.5) \quad \|x_0 - x^*\| \leq r_0, \quad \|y_0 - x^*\| \leq s_0, \quad \|z_0 - x^*\| \leq t_0$$

gelten. Außerdem sei neben (3.2) die Ungleichung $3pqr_0 < 1$ erfüllt. Hieraus folgen $q_0 = m_0 r_0 < 1$ und über (3.3) und (3.4), daß $\lim r_n = 0$ ist.

Behauptung. Die Vektoren $w_{n,v}$ seien nach dem Verfahren 1 oder nach dem Verfahren 2 bestimmt. Mit den Zahlenfolgen 1 erhält man

$$\|w_{n,v} - x^*\| \leq \begin{cases} q_n^\lambda t_n & \text{für } v = 2\lambda \\ q_n^{\lambda+1} s_n & \text{für } v = 2\lambda + 1 \quad (v = -1, \dots, k+1; n = 0, 1, \dots), \end{cases}$$

woraus sich sowohl für $k = 2l$ als auch für $k = 2l + 1$ die Abschätzungen

$$(3.6) \quad \|x_{n+1} - x^*\| \leq r_{n+1}, \quad \|y_{n+1} - x^*\| \leq s_{n+1}, \quad \|z_{n+1} - x^*\| \leq t_{n+1} \\ (n = 0, 1, \dots)$$

ergeben.

Beweis. Es genügt zu zeigen, daß aus $\|x_n - x^*\| \leq r_n$, $\|y_n - x^*\| \leq s_n$, $\|z_n - x^*\| \leq t_n$ die genannte Abschätzung für $v = -1, \dots, k+1$ folgt, wenn $n \geq 0$ irgendeine ganze Zahl ist. Um im Beweis nicht ständig zwischen dem Verfahren 1 und dem Verfahren 2 unterscheiden zu müssen, werden die Abkürzungen

$$\begin{aligned} h(u, v) &= \delta f(u, v) \quad \text{bzw.} \quad H(u, v) = \Delta f(u, v) \\ (3.7) \quad H(u, v, w) &= \delta^2 f(u, v, w) \quad \text{bzw.} \quad H(u, v, w) = \hat{\Delta}^2 f(u, v, w) \\ G(u, v, w) &= \delta^2 f(u, v, w) + \delta^2 f(u, v, w)^T \quad \text{bzw.} \quad G(u, v, w) = \Delta^2 f(u, v, w) \end{aligned}$$

eingeführt.

Wenn die Matrix F_n durch

$$F_n = f''(x^*)^{-1} \{G(z_n, y_n, x_n) - G(x^*, x^*, x^*)\}$$

definiert wird, folgt mit (2.5) bzw. (2.10) wegen $x_n, y_n, z_n \in Q_\rho(x^*)$

$$\|F_n\| \leq pq(r_n + s_n + t_n) \leq 3pqr_n < 1.$$

Es existiert also $G(z_n, y_n, x_n)^{-1} = (I + F_n)^{-1} f''(x^*)^{-1}$, und es ist

$$\|G(z_n, y_n, x_n)^{-1}\| \leq \frac{q}{1 - 3pqr_n}.$$

Insbesondere sind damit die linearen Gleichungssysteme für $w_{n,v+1}$ stets eindeutig lösbar.

Die Behauptung ist für $v = -1$ und $v = 0$ wegen $\|y_n - x^*\| \leq s_n$ und $\|z_n - x^*\| \leq t_n$ richtig. Für den Schluß von v auf $v+1$ wird neben $x_n, y_n, z_n \in Q_\rho(x^*)$ auch $w_{n,v}, w_{n,v-1} \in Q_\rho(x^*)$ vorausgesetzt. Über die aus den Iterationsvorschriften zu

gewinnende Beziehung

$$\begin{aligned} \boldsymbol{w}_{n,\nu+1} - \boldsymbol{x}^* &= -\boldsymbol{G}(\boldsymbol{z}_n, \boldsymbol{y}_n, \boldsymbol{x}_n)^{-1} \{ \boldsymbol{h}(\boldsymbol{w}_{n,\nu}, \boldsymbol{w}_{n,\nu-1}) \\ &\quad + \boldsymbol{H}(\boldsymbol{z}_n, \boldsymbol{y}_n, \boldsymbol{x}_n) (\boldsymbol{w}_{n,\nu} - \boldsymbol{w}_{n,\nu-1}) - \boldsymbol{f}'(\boldsymbol{x}^*) - \boldsymbol{G}(\boldsymbol{z}_n, \boldsymbol{y}_n, \boldsymbol{x}_n) (\boldsymbol{w}_{n,\nu} - \boldsymbol{x}^*) \} \end{aligned}$$

kommt man mit Hilfe von (2.4) bzw. (2.9) zu der Abschätzung

$$\begin{aligned} \|\boldsymbol{w}_{n,\nu+1} - \boldsymbol{x}^*\| &\leq \frac{pq}{1-3pqr_n} \{r_n + s_n + t_n + \|\boldsymbol{w}_{n,\nu} - \boldsymbol{x}^*\| + \|\boldsymbol{w}_{n,\nu-1} - \boldsymbol{x}^*\|\} \\ &\quad \cdot \{\|\boldsymbol{w}_{n,\nu} - \boldsymbol{x}^*\| + \|\boldsymbol{w}_{n,\nu-1} - \boldsymbol{x}^*\|\}. \end{aligned}$$

Mit dieser Ungleichung erhält man für eine gerade Zahl $\nu = 2\lambda$

$$\|\boldsymbol{w}_{n,\nu+1} - \boldsymbol{x}^*\| \leq \frac{5pqr_n}{1-3pqr_n} \{q_n^\lambda t_n + q_n^\lambda s_n\} \leq q_n q_n^\lambda s_n = q_n^{\lambda+1} s_n.$$

Falls $\nu = 2\lambda + 1$ ist, folgt mit $q_n s_n \leq t_n$

$$\|\boldsymbol{w}_{n,\nu+1} - \boldsymbol{x}^*\| \leq \frac{5pqr_n}{1-3pqr_n} \{q_n^{\lambda+1} s_n + q_n^\lambda t_n\} \leq q_n q_n^\lambda t_n = q_n^{\lambda+1} t_n.$$

Somit ist die Behauptung bewiesen.

Da (r_n) eine Nullfolge ist, konvergieren die Folgen $(\boldsymbol{w}_{n,\nu})$ für jedes in Frage kommende ν . Insbesondere ist $\lim \boldsymbol{x}_n = \boldsymbol{x}^*$. Für die Konvergenzgeschwindigkeit der letzten Folge sind die Ungleichungen (3.3) und (3.4) maßgeblich. Die zugehörigen charakteristischen Gleichungen lauten für $k = 2l$

$$(3.8) \quad \kappa = l + \frac{l+1}{\kappa} + \frac{1}{\kappa^2}$$

und für $k = 2l + 1$

$$(3.9) \quad \kappa = l + 1 + \frac{1}{\kappa}.$$

Sie besitzen jeweils eine positive, dominante Lösung

$$(3.10) \quad \kappa = \kappa^*(k),$$

durch welche bekanntlich die Konvergenzgeschwindigkeit festgelegt wird⁴. Für einige k können die Zahlen $\kappa^*(k)$ der Tabelle 1 entnommen werden. Wie bestätigt

Tabelle 1. Konvergenzgeschwindigkeiten (3.10) und (3.12)

k	$\kappa^*(k)$	$\kappa^{**}(k)$	k	$\kappa^*(k)$	$\kappa^{**}(k)$
0	1,32	1,41	6	4,05	4,19
1	1,62	2	7	4,24	5
2	2,15	2,30	8	5,03	5,16
3	2,41	3	9	5,19	6
4	3,08	3,24	10	6,02	6,14
5	3,30	4			

⁴ Wegen $\|\boldsymbol{x}_n - \boldsymbol{x}^*\| \leq r_n$ erfolgt die Konvergenz der Folge (\boldsymbol{x}_n) mindestens mit der Geschwindigkeit von (r_n) .

werden kann, gilt generell für $k=2l$ und $k=2l+1$

$$(3.11) \quad l+1 < \kappa^*(k) < l+2;$$

also strebt $\kappa^*(k)$ mit k monoton gegen Unendlich.

Beachtet man, daß bei hinreichend guten Startvektoren $\mathbf{x}_0, \mathbf{y}_0, \mathbf{z}_0$ sich Zahlen r_0, s_0, t_0 mit (3.2), (3.5) und $13pqr_0 < 1$ finden lassen, so erhält man zusammenfassend den

Konvergenzsatz 1. *Es existiere ein stationärer Vektor \mathbf{x}^* von f , und es sei $f''(\mathbf{x}^*)$ nicht singulär. In einer Umgebung von \mathbf{x}^* seien die dritten partiellen Differenzenquotienten von f vorhanden und beschränkt. Dann konvergieren die Verfahren 1 und 2 mit der Geschwindigkeit $\kappa^*(k)$ aus (3.10) gegen \mathbf{x}^* , falls nur die Startvektoren gut genug sind.*

Für die Frage, wie man die Zahl k zweckmäßig wählt, wird der Wirkungsgrad (nach Ostrowski [6]) herangezogen. Hier gehen die eben errechnete Konvergenzgeschwindigkeit und außerdem der Aufwand pro Schritt entscheidend ein. Für genauere Ausführungen sei auf den Abschnitt 6 verwiesen.

Es werde noch eine Variante der Verfahren 1 und 2 angeführt, wobei zur Vereinfachung die vereinheitlichenden Abkürzungen (3.7) benutzt werden.

Verfahren 3. Startvektoren: $\mathbf{x}_0, \mathbf{y}_0$; $\mathbf{u}_0 = \alpha \mathbf{x}_0 + (1-\alpha) \mathbf{y}_0$ mit $0 < \alpha < 1$.
Iterationsvorschrift: $\mathbf{w}_{n,-1} = \mathbf{u}_n$, $\mathbf{w}_{n,0} = \mathbf{y}_n$

$$\begin{aligned} \mathbf{h}(\mathbf{w}_{n,v}, \mathbf{w}_{n,v-1}) + \mathbf{H}(\mathbf{y}_n, \mathbf{u}_n, \mathbf{x}_n)(\mathbf{w}_{n,v} - \mathbf{w}_{n,v-1}) \\ + \mathbf{G}(\mathbf{y}_n, \mathbf{u}_n, \mathbf{x}_n)(\mathbf{w}_{n,v+1} - \mathbf{w}_{n,v}) = 0 \end{aligned} \quad (v=0, \dots, k),$$

$$\mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{w}_{n,k}, \quad \mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{w}_{n,k+1}, \quad \mathbf{u}_{n+1} = \alpha \mathbf{x}_{n+1} + (1-\alpha) \mathbf{y}_{n+1} \quad (n=0, 1, \dots).$$

Für dieses Verfahren gilt, wie hier ohne Beweis mitgeteilt wird, der Konvergenzsatz 1 Wort für Wort, wenn man von dem Wert der Konvergenzgeschwindigkeit absieht. Er ändert sich zu

$$(3.12) \quad \kappa = \kappa^{**}(k),$$

wobei diese Zahl die positive, dominante Lösung der Gleichung $\kappa = l + (l+2)/\kappa$ für $k=2l$ und gleich $l+2$ für $k=2l+1$ ist.

4. Verfahren ohne Auflösung linearer Gleichungssysteme

Es werden die Verfahren 1 und 2 abgeändert, indem die dort erforderliche Auflösung linearer Gleichungssysteme in der Weise genähert vorgenommen wird, daß keine Verminderung der Konvergenzgeschwindigkeit eintritt. Die Approximation wird mit Hilfe einer Erweiterung des Schulz-Verfahrens zur Matrizeninversion durchgeführt; dabei wird die Gleichungsauflösung durch eine feste Anzahl von Matrizenmultiplikationen ersetzt. Zur Beschreibung des Verfahrens wird wieder von den Abkürzungen (3.7) Gebrauch gemacht, um beide Interpolationsansätze gleichzeitig zu erfassen.

Verfahren 4. Startvektoren: $\mathbf{x}_0, \mathbf{y}_0, \mathbf{z}_0$; Startmatrix: \mathbf{X}_0 ;
Iterationsvorschrift: $\mathbf{w}_{n,-1} = \mathbf{y}_n, \quad \mathbf{w}_{n,0} = \mathbf{z}_n$

$$\mathbf{w}_{n,v+1} = \mathbf{w}_{n,v} - \mathbf{X}_n \{ \mathbf{h}(\mathbf{w}_{n,v}, \mathbf{w}_{n,v-1}) + \mathbf{H}(\mathbf{z}_n, \mathbf{y}_n, \mathbf{x}_n) (\mathbf{w}_{n,v} - \mathbf{w}_{n,v-1}) \} \quad (v=0, \dots, k),$$

$$\mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{w}_{n,k-1}, \quad \mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{w}_{n,k}, \quad \mathbf{z}_{n+1} = \mathbf{w}_{n,k+1},$$

$$\mathbf{X}_{n+1} = \mathbf{X}_n + \mathbf{X}_n \sum_{\mu=1}^{l+1} \{ \mathbf{I} - \mathbf{G}(\mathbf{z}_{n+1}, \mathbf{y}_{n+1}, \mathbf{x}_{n+1}) \mathbf{X}_n \}^\mu \quad (n=0, 1, \dots).$$

Die Zahlen k und l hängen über $k=2l$ oder $k=2l+1$ zusammen.

Für eine Konvergenzuntersuchung werden zuerst angepaßte Zahlenfolgen definiert.

Zahlenfolgen 2. Startwerte: r_0, s_0, t_0, ϱ_0 ;

Rekursionsformel für $k=2l$: $q_n = m r_n, \quad p_n = m \sqrt[l]{1+\beta} r_n$ mit $\beta \geq 1, m > 0$,

$$\varrho_{n+1} = q_n^l s_n, \quad s_{n+1} = q_n^l t_n, \quad t_{n+1} = q_n^{l+1} s_n, \quad r_{n+1} = q_n^{l+1} r_n + \beta \varrho_{n+1}.$$

Rekursionsformel für $k=2l+1$: q_n, p_n wie oben

$$\varrho_{n+1} = q_n^l t_n, \quad s_{n+1} = q_n^{l+1} s_n, \quad t_{n+1} = q_n^{l+1} t_n, \quad r_{n+1} = q_n^{l+1} r_n + \beta \varrho_{n+1}.$$

Aussage 2. Falls $p_0 \leq 1$ und

$$q_0 s_0 \leq t_0 \leq s_0 \leq \varrho_0 \leq r_0 \leq \varrho$$

erfüllt sind, folgen für $n \geq 0$

$$\text{a) } r_n \leq r_{n-1} \leq \dots \leq r_0 \leq \varrho,$$

$$\text{b) } q_n s_n \leq t_n \leq s_n \leq \varrho_n \leq r_n \leq \varrho;$$

und im Falle $k=2l$ gilt die Ungleichung

$$(4.1) \quad r_{n+1} \leq m^{l+1} r_n^{l+2} + \beta m^{2l+1} r_n^l r_{n-1}^{l+1} r_{n-2},$$

sowie im Falle $k=2l+1$ die Ungleichung

$$(4.2) \quad r_{n+1} \leq m^{l+1} r_n^{l+2} + \beta m^{l+1} r_n^{l+1} r_{n-1}.$$

Der Beweis kann weitgehend von dem zur Aussage 1 übernommen werden. Es genügt, einige Ergänzungen für den Schluß von n auf $n+1$ zu bringen. Es wird für a) wegen $q_n \leq p_n \leq 1$

$$r_{n+1} \leq q_n^{l+1} r_n + \beta q_n^l r_n \leq (1+\beta) q_n^l r_n = p_n^l r_n \leq r_n.$$

Für b) ist nur hinzuzufügen, daß $\varrho_{n+1} \leq r_{n+1}$ wegen $\beta \geq 1$ ist.

Es sei an die Größen q und ϱ aus (3.1) und die dort genannten Voraussetzungen erinnert. Zusätzlich werden

$$\tilde{q} = \|f''(\mathbf{x}^*)\|, \quad m = \tilde{q} + 13p(q+1),$$

$$\beta = \max \left\{ 1, \sum_{\mu=1}^{l+1} \sum_{\sigma=1}^{\mu} \binom{\mu}{\sigma} \tilde{q}^{\mu-\sigma} (q+1)^{\sigma+1} 3^\sigma p^\sigma \right\},$$

sowie $\mathbf{X}^* = f''(\mathbf{x}^*)^{-1}$ gesetzt. Es seien $\varrho \leq 1$ und $p_0 = m \sqrt[l]{1+\beta} r_0 < 1$, so daß sich (r_n) nach der Aussage 2 als eine Nullfolge erweist. Von den Startwerten zum

Verfahren 4 wird

$$(4.3) \quad \|x_0 - x^*\| \leq r_0, \quad \|y_0 - x^*\| \leq s_0, \quad \|z_0 - x^*\| \leq t_0, \quad \|X_0 - X^*\| \leq r_0$$

verlangt, d.h. sie sollen genügend gut sein. Die wesentlichen Konvergenzeigenschaften des Verfahrens ergeben sich unmittelbar aus der folgenden

Behauptung. Unter den Voraussetzungen (4.3) und $\varrho \leq 1$, $p_0 < 1$ gilt für die Vektor- und Matrizenfolgen aus dem Verfahren 4 unter Verwendung der Zahlenfolgen 2

$$(4.4) \quad \begin{aligned} \|w_{n,v} - x^*\| &\leq \begin{cases} q_n^\lambda t_n & \text{für } v = 2\lambda \\ q_n^{\lambda+1} s_n & \text{für } v = 2\lambda + 1, \end{cases} \\ \|X_{n+1} - X^*\| &\leq r_{n+1} \quad (v = -1, \dots, k+1; n = 0, 1, \dots); \end{aligned}$$

insbesondere hat man für gerades und ungerades k

$$(4.5) \quad \|x_{n+1} - x^*\| \leq \varrho_{n+1} \leq r_{n+1}, \quad \|y_{n+1} - x^*\| \leq s_{n+1}, \quad \|z_{n+1} - x^*\| \leq t_{n+1} \\ (n = 0, 1, \dots).$$

Beweis. Es werden (4.4) und (4.5) für einen beliebigen Index $n \geq 0$, d.h. für x_n, y_n, z_n, X_n vorausgesetzt und hieraus die genannten Abschätzungen für $w_{n,v}$ ($v = -1, \dots, k+1$) und X_{n+1} hergeleitet. Für $v = -1$ und $v = 0$ gilt die Behauptung. Im Induktionsschluß von v auf $v+1$ geht man vom ersten Teil der Iterationsvorschrift aus; unter Verwendung von $X^* f''(x^*) = I$ erhält man

$$\begin{aligned} w_{n,v+1} - x^* &= -X_n \{h(w_{n,v}, w_{n,v-1}) + H(z_n, y_n, x_n) (w_{n,v} - w_{n,v-1}) - f'(x^*) \\ &\quad - G(z_n, y_n, x_n) (w_{n,v} - x^*)\} + X^* \{f''(x^*) - G(z_n, y_n, x_n)\} (w_{n,v} - x^*) \\ &\quad + (X^* - X_n) \{f''(x^*) + [G(z_n, y_n, x_n) - f''(x^*)]\} (w_{n,v} - x^*). \end{aligned}$$

Da neben $x_n, y_n, z_n \in Q_\varrho(x^*)$ auch $w_{n,v}, w_{n,v-1} \in Q_\varrho(x^*)$ sind, ergibt sich mit (2.4), (2.5) bzw. (2.9), (2.10) und $\|X_n\| \leq \|X^*\| + \|X_n - X^*\| \leq q + 1$:

$$\begin{aligned} \|w_{n,v+1} - x^*\| &\leq p(q+1) \{r_n + s_n + t_n + \|w_{n,v} - x^*\| + \|w_{n,v-1} - x^*\|\} \\ &\quad \cdot \{\|w_{n,v} - x^*\| + \|w_{n,v-1} - x^*\|\} + p q \{r_n + s_n + t_n\} \|w_{n,v} - x^*\| \\ &\quad + \{\tilde{q} + p(r_n + s_n + t_n)\} r_n \|w_{n,v} - x^*\|. \end{aligned}$$

Man gewinnt hieraus bei Verwendung von $t_n \leq s_n \leq r_n \leq 1$, daß für $v = 2\lambda$

$$\begin{aligned} \|w_{n,v+1} - x^*\| &\leq 5p(q+1) r_n \{q_n^\lambda t_n + q_n^\lambda s_n\} + 3p q r_n q_n^\lambda t_n + (\tilde{q} + 3p) r_n q_n^\lambda t_n \\ &\leq m r_n q_n^\lambda s_n = q_n^{\lambda+1} s_n \end{aligned}$$

ist, während die Behauptung für $v = 2\lambda + 1$ über

$$\begin{aligned} \|w_{n,v+1} - x^*\| &\leq 5p(q+1) r_n \{q_n^{\lambda+1} s_n + q_n^\lambda t_n\} + 3p q r_n q_n^{\lambda+1} s_n + (\tilde{q} + 3p) r_n q_n^{\lambda+1} s_n \\ &\leq m r_n q_n^\lambda t_n = q_n^{\lambda+1} t_n \end{aligned}$$

folgt. Gleichzeitig ist damit (4.5) gezeigt. Es sind daher $x_{n+1}, y_{n+1}, z_{n+1} \in Q_\varrho(x^*)$. Es ist noch (4.4) zu bestätigen. Nach einigen elementaren Umformungen, die im einzelnen nicht wiedergegeben werden sollen (vgl. [10]), bekommt man aus dem

zweiten Teil der Iterationsvorschrift

$$\begin{aligned} \mathbf{X}_{n+1} - \mathbf{X}^* &= (\mathbf{X}_n - \mathbf{X}^*) \{f''(\mathbf{x}^*) (\mathbf{X}^* - \mathbf{X}_n)\}^{l+1} \\ &+ \sum_{\mu=1}^{l+1} \sum_{\sigma=1}^{\mu} \binom{\mu}{\sigma} \mathbf{X}_n \{f''(\mathbf{x}^*) (\mathbf{X}^* - \mathbf{X}_n)\}^{\mu-\sigma} \{f''(\mathbf{x}^*) - G(\mathbf{z}_{n+1}, \mathbf{y}_{n+1}, \mathbf{x}_{n+1})\} \mathbf{X}_n\}^{\sigma}. \end{aligned}$$

Somit kann unter Beachtung von (2.5) bzw. (2.10) und $t_{n+1} \leq s_{n+1} \leq \varrho_{n+1} \leq r_n \leq 1$ folgendermaßen abgeschätzt werden:

$$\begin{aligned} \|\mathbf{X}_{n+1} - \mathbf{X}^*\| &\leq \tilde{q}^{l+1} r_n^{l+2} + \sum_{\mu=1}^{l+1} \sum_{\sigma=1}^{\mu} \binom{\mu}{\sigma} \tilde{q}^{\mu-\sigma} (q+1)^{\sigma+1} r_n^{\mu-\sigma} p^{\sigma} (t_{n+1} + s_{n+1} + \varrho_{n+1})^{\sigma} \\ &\leq m^{l+1} r_n^{l+2} + \beta \varrho_{n+1} = r_{n+1}. \end{aligned}$$

Damit ist der Beweis der Behauptung erbracht.

Da (r_n) bei den genannten Voraussetzungen eine Nullfolge ist, erhält man mit (4.4) und (4.5) u. a. die Aussagen $\lim \mathbf{x}_n = \mathbf{x}^*$ und $\lim \mathbf{X}_n = \mathbf{X}^* = f''(\mathbf{x}^*)^{-1}$. Die Konvergenzgeschwindigkeit wird wegen (4.4) und (4.5) durch die Ungleichungen (4.1) und (4.2) festgelegt. Zu dem jeweils ersten Summanden auf der rechten Seite gehört die Geschwindigkeit $\kappa = l+2$, während die zu dem zweiten Summanden gehörige Geschwindigkeit den Wert $\kappa = \kappa^*(k)$ aus (3.10) hat. Da nach (3.11) stets $\kappa^*(k) < l+2$ ist, gibt $\kappa^*(k)$ den Ausschlag.

Der folgende Satz ist somit in allen Teilen bewiesen.

Konvergenzsatz 2. *Es sei ein stationärer Vektor \mathbf{x}^* von f vorhanden, und es existiere $\mathbf{X}^* = f''(\mathbf{x}^*)^{-1}$. In einer Umgebung von \mathbf{x}^* seien die dritten partiellen Differenzenquotienten von f angebbar und beschränkt. Bei hinreichend guten Startwerten konvergiert dann das Verfahren 4 mit der Geschwindigkeit $\kappa = \kappa^*(k)$ aus (3.10), d. h. mit der Geschwindigkeit $\kappa = \kappa^*(k)$ streben die Vektorfolge (\mathbf{x}_n) gegen \mathbf{x}^* und die Matrizenfolge (\mathbf{X}_n) gegen \mathbf{X}^* .*

5. Verfahren für Aufgaben mit Restriktionen (Optimierungsaufgaben)

Es sei die Aufgabe

$$(5.1) \quad f(\mathbf{x}) = \text{Minimum!} \quad \text{für } \mathbf{x} \in \mathbf{K}$$

gestellt, d. h. es ist ein Vektor \mathbf{x}^* gesucht, für den $f(\mathbf{x}^*) \leq f(\mathbf{x})$ für alle $\mathbf{x} \in \mathbf{K}$ zutrifft. \mathbf{K} wird als konvexe, abgeschlossene und nicht leere Teilmenge von \mathbf{R} angenommen. Es wird vorausgesetzt, daß die im Abschnitt 2 definierte zweite Steigung $\delta^2 f(\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w})$ für alle $\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w} \in \mathbf{K}$ existiert⁵ und stetig ist und daß es eine Konstante $\alpha > 0$ gibt, mit der

$$(5.2) \quad \delta^2 f(\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w}) \mathbf{y} \mathbf{y} \geq \alpha \|\mathbf{y}\|^2 \quad \text{für } \mathbf{y} \in \mathbf{R} \quad \text{und } \mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w} \in \mathbf{K}$$

gilt. Für die transponierte Matrix $\delta^2 f(\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w})^T$ besteht dann ebenfalls die Ungleichung, so daß mit Hilfe von (2.2) für $\mathbf{x} = \mathbf{u} = \mathbf{v} = \mathbf{w}$ die Aussage

$$(5.3) \quad f''(\mathbf{x}) \mathbf{y} \mathbf{y} \geq 2\alpha \|\mathbf{y}\|^2 \quad \text{für } \mathbf{y} \in \mathbf{R} \quad \text{und } \mathbf{x} \in \mathbf{K}$$

⁵ Es werden dann u. U. auch Funktionswerte für Vektoren außerhalb von \mathbf{K} benötigt.

folgt. Die Matrizen $f''(\mathbf{x})$ sind also gleichmäßig positiv definit auf \mathbf{K} . Hieraus ergibt sich die eindeutige Lösbarkeit der Aufgabe (5.1)⁶; der Minimalvektor heie $\mathbf{x}^* \in \mathbf{K}$. Auerdem ist f streng konvex auf \mathbf{K} .

Das Nherungsverfahren basiert darauf, da man in jedem Schritt die Zielfunktion f durch eine quadratische Funktion approximiert und dann das Optimierungsproblem mit vereinfachter Zielfunktion lst. Fr $k=0$ ist das Verfahren in [16] behandelt worden.

Verfahren 5. Startvektoren: $\mathbf{x}_0, \mathbf{y}_0, \mathbf{z}_0$;

Iterationsvorschrift: $\mathbf{w}_{n,-1} = \mathbf{y}_n, \mathbf{w}_{n,0} = \mathbf{z}_n$,

$\mathbf{w}_{n,v+1} \in \mathbf{K}$ Minimalvektor zu $g_{n,v}$ auf \mathbf{K} , wobei

$$g_{n,v}(\mathbf{x}) = \delta f(\mathbf{w}_{n,v}, \mathbf{w}_{n,v-1})(\mathbf{x} - \mathbf{w}_{n,v}) + \delta^2 f(\mathbf{z}_n, \mathbf{y}_n, \mathbf{x}_n)(\mathbf{x} - \mathbf{w}_{n,v-1})(\mathbf{x} - \mathbf{w}_{n,v})$$

$$(v = 0, \dots, k)$$

$$\mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{w}_{n,k-1}, \quad \mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{w}_{n,k}, \quad \mathbf{z}_{n+1} = \mathbf{w}_{n,k+1} \quad (n = 0, 1, \dots).$$

Wegen $g''_{n,v}(\mathbf{x}) = \delta^2 f(\mathbf{z}_n, \mathbf{y}_n, \mathbf{x}_n) + \delta^2 f(\mathbf{z}_n, \mathbf{y}_n, \mathbf{x}_n)^T$ fr alle $\mathbf{x} \in \mathbf{R}$ erhlt man mit (5.2)

$$g''_{n,v}(\mathbf{x}) \mathbf{y} \mathbf{y} \geq 2\alpha \|\mathbf{y}\|^2 \quad \text{fr } \mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbf{R}.$$

Hieraus folgt die eindeutige Lsbarkeit der Nherungsaufgaben; es gibt fr jedes interessierende n und v genau einen Vektor $\mathbf{w}_{n,v+1} \in \mathbf{K}$ mit $g_{n,v}(\mathbf{w}_{n,v+1}) \leq g_{n,v}(\mathbf{x})$ fr alle $\mathbf{x} \in \mathbf{K}$.

Falls \mathbf{K} durch lineare Gleichungen oder Ungleichungen festgelegt ist, kann man z.B. das Verfahren von Wolfe zur Lsung der Teilaufgaben heranziehen. Bekanntlich wird bei diesem Verfahren (fr eine besonders kurze Form s. [4]) die Aufgabe der quadratischen Optimierung in eine Aufgabe der linearen Optimierung mit einer Zusatzbedingung berfhrt; diese lst man zweckmig nach dem dualen revidierten Simplexverfahren. Die spezielle Struktur der Zielfunktionen $g_{n,v}$ zieht dabei die Vereinfachung nach sich, da man mit einer optimalen Ecke fr $g_{n,v}$ sofort eine erste Ecke fr die nchste Zielfunktion $g_{n,v+1}$ hat. Dagegen mu eine optimale Ecke fr $g_{n,k}$ nicht notwendig eine Ecke fr $g_{n+1,0}$ sein. Auf die Darstellung von Details werde hier verzichtet.

Als Hilfsmittel fr einen Konvergenzsatz wird die folgende bekannte Aussage herangezogen.

6 Es werde ein Beweis fr diese bekannte Aussage wiedergegeben. Es seien $\mathbf{a} \in \mathbf{K}$ ein fester Vektor und $\mathbf{L} = \{\mathbf{x} \in \mathbf{K} : f(\mathbf{x}) \leq f(\mathbf{a})\}$. Die Menge \mathbf{L} ist abgeschlossen. Es sei \mathbf{u} ein beliebiger Vektor aus \mathbf{L} . Dann folgt aus der Taylorformel

$$f(\mathbf{u}) = f(\mathbf{a}) + f'(\mathbf{a})(\mathbf{u} - \mathbf{a}) + \frac{1}{2} f''(\mathbf{v})(\mathbf{u} - \mathbf{a})(\mathbf{u} - \mathbf{a}), \quad \mathbf{v} \in \mathbf{K} \text{ passend,}$$

mit der Schwarzschen Ungleichung und (5.3)

$$f(\mathbf{a}) \geq f(\mathbf{u}) \geq f(\mathbf{a}) - \|f'(\mathbf{a})\| \|\mathbf{u} - \mathbf{a}\| + \alpha \|\mathbf{u} - \mathbf{a}\|^2, \quad \|\mathbf{u}\| \leq \|\mathbf{a}\| + \|\mathbf{u} - \mathbf{a}\| \leq \|\mathbf{a}\| + \frac{1}{\alpha} \|f'(\mathbf{a})\|,$$

d.h. \mathbf{L} ist beschrnkt. Somit existiert fr die stetige Funktion f ein Vektor $\mathbf{x}^* \in \mathbf{L}$ mit $f(\mathbf{x}^*) = \min \{f(\mathbf{x}) : \mathbf{x} \in \mathbf{L}\} = \min \{f(\mathbf{x}) : \mathbf{x} \in \mathbf{K}\}$. Wegen der strengen Konvexitt von f gibt es keinen weiteren derartigen Vektor.

Aussage. Es seien die Menge K konvex und abgeschlossen und die Funktion h auf K konvex und einmal stetig differenzierbar. Ein Vektor $y \in K$ ist genau dann ein Minimalvektor von h auf K , wenn

$$h'(y)(x - y) \geq 0 \quad \text{für alle } x \in K$$

gilt.

Beweis. Es sei y ein Minimalvektor und sei doch $h'(y)(x - y) < 0$ für ein $x \in K$, so wird auch $h'(y + \lambda(x - y))(x - y) < 0$ für alle $0 \leq \lambda \leq \lambda_0$ mit einem passenden $0 < \lambda_0 \leq 1$. Folglich ist

$$h(y + \lambda_0(x - y)) - h(y) = \lambda_0 h'(y + \lambda(x - y))(x - y) < 0,$$

da $0 \leq \lambda \leq \lambda_0$ für den entsprechenden Zwischenwert λ gilt. Wegen $y + \lambda_0(x - y) \in K$ ist ein Widerspruch erreicht. Gilt umgekehrt $h'(y)(x - y) \geq 0$ für alle $x \in K$, so ergibt sich bekanntlich mit der Konvexität von h die Ungleichung $h(x) \geq h(y) + h'(y)(x - y)$, also wie behauptet $h(x) \geq h(y)$ für alle $x \in K$.

Es wird nun eine wichtige, (2.4) bzw. (2.9) entsprechende Ungleichung hergeleitet. Die quadratische Funktion

$$g(x) = \delta f(y, z)(x - y) + \delta^2 f(u, v, w)(x - z)(x - y)$$

besitzt auf K genau einen Minimalvektor $\tilde{x} \in K$, denn $g''(x)$ ist gleichmäßig positiv definit auf K . In einer Umgebung $Q_\rho(x^*)$ des Minimalvektors x^* von f mögen die Ungleichungen (2.3) bestehen. Dann gilt für $u, v, w, y, z \in P_\rho(x^*) = K \cap Q_\rho(x^*)$

$$(5.4) \quad \|\tilde{x} - x^*\| \leq p \{ \|u - x^*\| + \|v - x^*\| + \|w - x^*\| + \|y - x^*\| + \|z - x^*\| \} \\ \cdot \{ \|y - x^*\| + \|z - x^*\| \};$$

dabei ist die Zahl $p \geq a/2\alpha$.

Beweis von (5.4). Es ist auf Grund der Definition von g

$$(5.5) \quad g(\tilde{x}) - g(x^*) = \delta f(y, z)(\tilde{x} - x^*) \\ - \delta^2 f(u, v, w) \{ (x^* - z)(x^* - y) - (\tilde{x} - z)(\tilde{x} - y) \}.$$

Beachtet man

$$g'(x) = \delta f(y, z) + \delta^2 f(u, v, w)(x - z) + \delta^2 f(u, v, w)^T(x - y)$$

für $x = \tilde{x}$ und außerdem

$$\delta^2 f(u, v, w)^T(\tilde{x} - y)(\tilde{x} - x^*) = \delta^2 f(u, v, w)(\tilde{x} - x^*)(\tilde{x} - y),$$

so ergibt sich

$$g(\tilde{x}) - g(x^*) = g'(\tilde{x})(\tilde{x} - x^*) - \delta^2 f(u, v, w) \\ \cdot \{ (x^* - z)(x^* - y) - (\tilde{x} - z)(\tilde{x} - y) + (\tilde{x} - z)(\tilde{x} - x^*) + (\tilde{x} - x^*)(\tilde{x} - y) \} \\ = g'(\tilde{x})(\tilde{x} - x^*) - \delta^2 f(u, v, w)(\tilde{x} - x^*)(\tilde{x} - x^*).$$

Da \tilde{x} Minimalvektor von g ist, gilt nach der obigen Aussage $g'(\tilde{x})(\tilde{x} - x^*) \leq 0$. Verwendet man weiterhin (5.2), so wird $g(\tilde{x}) - g(x^*) \leq -\alpha \|\tilde{x} - x^*\|^2$, d.h.

$$(5.6) \quad \alpha \|\tilde{x} - x^*\|^2 \leq g(x^*) - g(\tilde{x}).$$

Für eine obere Schranke zu $g(\mathbf{x}^*) - g(\tilde{\mathbf{x}})$ wird die leicht mit (2.2) zu bestätigende Beziehung

$$\delta f(\mathbf{y}, \mathbf{z}) = f'(\mathbf{x}^*) + \delta^2 f(\mathbf{y}, \mathbf{z}, \mathbf{x}^*) (\mathbf{z} - \mathbf{x}^*) + \delta^2 f(\mathbf{y}, \mathbf{x}^*, \mathbf{x}^*)^T (\mathbf{y} - \mathbf{x}^*)$$

verwendet; es wird mit (5.5)

$$\begin{aligned} g(\mathbf{x}^*) - g(\tilde{\mathbf{x}}) &= f'(\mathbf{x}^*) (\mathbf{x}^* - \tilde{\mathbf{x}}) + \{\delta^2 f(\mathbf{y}, \mathbf{z}, \mathbf{x}^*) - \delta^2 f(\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w})\} (\mathbf{z} - \mathbf{x}^*) (\mathbf{x}^* - \tilde{\mathbf{x}}) \\ &\quad + \{\delta^2 f(\mathbf{y}, \mathbf{x}^*, \mathbf{x}^*)^T - \delta^2 f(\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w})^T\} (\mathbf{y} - \mathbf{x}^*) (\mathbf{x}^* - \tilde{\mathbf{x}}) \\ &\quad + \delta^2 f(\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w}) \{(\mathbf{z} - \mathbf{x}^*) (\mathbf{x}^* - \tilde{\mathbf{x}}) + (\mathbf{x}^* - \tilde{\mathbf{x}}) (\mathbf{y} - \mathbf{x}^*) \\ &\quad + (\mathbf{x}^* - \mathbf{z}) (\mathbf{x}^* - \mathbf{y}) - (\tilde{\mathbf{x}} - \mathbf{z}) (\tilde{\mathbf{x}} - \mathbf{y})\}. \end{aligned}$$

Der letzte Summand auf der rechten Seite ist gleich

$$= -\delta^2 f(\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w}) (\tilde{\mathbf{x}} - \mathbf{x}^*) (\tilde{\mathbf{x}} - \mathbf{x}^*) \leq -\alpha \|\tilde{\mathbf{x}} - \mathbf{x}^*\|^2;$$

für den ersten Summanden rechts gilt nach der Aussage die Beziehung

$$f'(\mathbf{x}^*) (\mathbf{x}^* - \tilde{\mathbf{x}}) \leq 0,$$

da \mathbf{x}^* der Minimalvektor von f ist. Die geschweiften Klammern der mittleren Summanden kann man nach entsprechenden Einfügungen (vgl. Beweis von (2.5)) mit Hilfe von (2.3) jeweils durch

$$a\{\|\mathbf{u} - \mathbf{x}^*\| + \|\mathbf{v} - \mathbf{x}^*\| + \|\mathbf{w} - \mathbf{x}^*\| + \|\mathbf{y} - \mathbf{x}^*\| + \|\mathbf{z} - \mathbf{x}^*\|\}$$

abschätzen, so daß man insgesamt

$$\begin{aligned} g(\mathbf{x}^*) - g(\tilde{\mathbf{x}}) &\leq -\alpha \|\tilde{\mathbf{x}} - \mathbf{x}^*\|^2 \\ (5.7) \quad &+ a\{\|\mathbf{u} - \mathbf{x}^*\| + \|\mathbf{v} - \mathbf{x}^*\| + \|\mathbf{w} - \mathbf{x}^*\| + \|\mathbf{y} - \mathbf{x}^*\| + \|\mathbf{z} - \mathbf{x}^*\|\} \\ &\cdot \{\|\mathbf{y} - \mathbf{x}^*\| + \|\mathbf{z} - \mathbf{x}^*\|\} \|\tilde{\mathbf{x}} - \mathbf{x}^*\| \end{aligned}$$

erhält. Aus (5.6) und (5.7) gewinnt man unmittelbar die gewünschte Formel (5.4).

Geeignete Schrankenfolgen für die Fehler der Näherungen $\mathbf{w}_{n,r}$ bekommt man durch eine leichte Modifikation der Zahlenfolgen 1.

Zahlenfolgen 3. Startwerte: r_0, s_0, t_0 ;

Rekursionsformel für $k=2l$: $q_n = m r_n$ mit $m=10p$

$$r_{n+1} = q_n^l s_n, \quad s_{n+1} = q_n^l t_n, \quad t_{n+1} = q_n r_{n+1} \quad (n=0, 1, \dots).$$

Rekursionsformel für $k=2l+1$: $q_n = m r_n$ mit $m=10p$

$$r_{n+1} = q_n^l t_n, \quad s_{n+1} = q_n^{l+1} s_n, \quad t_{n+1} = q_n r_{n+1} \quad (n=0, 1, \dots).$$

Völlig analog zur Aussage 1 beweist man

Aussage 3. Unter der Voraussetzung

$$q_0 s_0 \leq t_0 \leq s_0 \leq r_0 \leq \varrho$$

gelten für $n \geq 0$

- a) $r_n \leq r_{n-1} \leq \dots \leq r_0 \leq \varrho,$
 b) $q_n s_n \leq t_n \leq s_n \leq r_n,$

sowie die Ungleichungen (3.3) und (3.4) mit $m_0 = m = 10p$.

Eine wichtige Vorstufe für eine Konvergenzaussage bildet die

Behauptung. Für die Startwerte zum Verfahren 5 gelte

$$\|x_0 - x^*\| \leq r_0, \quad \|y_0 - x^*\| \leq s_0, \quad \|z_0 - x^*\| \leq t_0.$$

Dann bestehen die Abschätzungen

$$\|w_{n,v} - x^*\| \leq \begin{cases} q_n^\lambda t_n & \text{für } v = 2\lambda \\ q_n^{\lambda+1} s_n & \text{für } v = 2\lambda + 1 \end{cases} \quad (v = -1, \dots, k+1; n = 0, 1, \dots);$$

insbesondere sind

$$\|x_{n+1} - x^*\| \leq r_{n+1}, \quad \|y_{n+1} - x^*\| \leq s_{n+1}, \quad \|z_{n+1} - x^*\| \leq t_{n+1} \quad (n = 0, 1, \dots).$$

Auf Grund der Beweise zu den beiden vorangegangenen Behauptungen dieser Art genügt es hier zu erwähnen, daß über die Iterationsvorschrift mit Hilfe der Ungleichung (5.4) die Abschätzung

$$\begin{aligned} \|w_{n,v+1} - x^*\| \leq & p \{ \|x_n - x^*\| + \|y_n - x^*\| + \|z_n - x^*\| + \|w_{n,v} - x^*\| \\ & + \|w_{n,v-1} - x^*\| \} \{ \|w_{n,v} - x^*\| + \|w_{n,v-1} - x^*\| \} \end{aligned}$$

folgt, falls nur $w_{n,v}, w_{n,v-1}, x_n, y_n, z_n \in P_\varrho(x^*)$ sind.

Für $q_0 < 1$ sichert die Behauptung zusammen mit Aussage 3 die Konvergenz der Folge (x_n) gegen x^* , wobei die Geschwindigkeit wiederum $\kappa^*(k)$ beträgt. Es besteht also der folgende

Konvergenzsatz 3. *Unter der Voraussetzung (5.2) hat die Aufgabe (5.1) genau einen Minimalvektor $x^* \in K$. Falls die dritten partiellen Differenzenquotienten der Zielfunktion f in einer Umgebung von x^* vorhanden und beschränkt sind, konvergiert die nach dem Verfahren 5 bestimmte Vektorfolge (x_n) bei hinreichend guten Startwerten mit der Geschwindigkeit $\kappa = \kappa^*(k)$ aus (3.10) gegen x^* .*

Ein Verfahren der hier behandelten Klasse, welches bei konvexen Funktionen für alle Startwerte konvergiert, ist in [17] entwickelt und untersucht worden.

6. Zweckmäßige Bestimmung von k

Nach Ostrowski [6] wird der Wirkungsgrad λ eines Verfahrens durch

$$(6.1) \quad \lambda = \kappa^{1/\alpha}$$

definiert, wenn κ die Konvergenzgeschwindigkeit und α der Aufwand pro Iterationsschritt sind. Für α wird hier vereinfachend die Anzahl der pro Schritt neu zu berechnenden Funktionswerte von f genommen. Eine Möglichkeit zur Berücksichtigung weiterer Anteile des Aufwandes wie Anzahl der Matrizenbildungen, Anzahl der zu lösenden linearen Gleichungssysteme bzw. Optimierungsaufgaben, ...

ist z.B. in [10] beschrieben worden; einheitliche Aussagen für alle Funktionen f sind nach einer derartigen Verfeinerung jedoch nicht mehr zu erwarten.

Es sollen zwei Verfahren i und j miteinander verglichen werden. Die Wirkungsgrade seien λ_i und λ_j , während zur Erreichung einer bestimmten Genauigkeit insgesamt A_i und A_j Funktionswerte erforderlich seien. Dann gilt die asymptotische Beziehung

$$(6.2) \quad A_i : A_j \approx \lg \lambda_j : \lg \lambda_i.$$

Man wird daher das Verfahren mit dem größeren Wirkungsgrad auswählen. Da bei den vorliegenden Verfahren λ außer von der Dimension d noch von der Zahl k abhängt, wird man $k = k_{\max}$ bei festem d entsprechend der Forderung

$$(6.3) \quad \lambda(k_{\max}, d) = \max_{k=0,1,\dots} \lambda(k, d)$$

bestimmen.

Für die Anzahl der Funktionswerte, die pro Schritt im laufenden Verfahren erforderlich sind, findet man beim Verfahren 1 für $d > 2$

$$\alpha_1^*(k, d) = \binom{d+2}{2} + k(d+1),$$

beim Verfahren 2

$$\alpha_2^*(k, d) = \binom{d+1}{2} + kd,$$

beim Verfahren 3 (Interpolationspolynom $\tilde{p}(x)$) für $d > 2$

$$\alpha_1^{**}(k, d) = \binom{d+2}{2} + k(d+1)$$

und beim Verfahren 3 (Interpolationspolynom $p(x)$)

$$\alpha_2^{**}(k, d) = \binom{d+2}{2} + kd - 1.$$

Beim Verfahren 4 (Interpolationspolynom $p(x)$) und beim Verfahren 5 ist diese Zahl mit $\alpha_2^*(k, d)$ gleich der kleinsten von den genannten.

Satz. Unter den Verfahren 1, 2 und 3 hat das Verfahren 2 für jede Dimension d bei optimaler Wahl von k den größten Wirkungsgrad.

Aus diesem Grunde wurde für Aufgaben mit Restriktionen nur das dem Verfahren 2 entsprechende Verfahren 5 untersucht.

Beweis der Aussage. Es wird behauptet, daß die Ungleichungen

$$\max_k \kappa^*(k)^{1/\alpha_1^*(k,d)} \leq \max_k \kappa^*(k)^{1/\alpha_2^*(k,d)}$$

und

$$\max_k \kappa^{**}(k)^{1/\alpha_1^{**}(k,d)} \leq \max_k \kappa^{**}(k)^{1/\alpha_2^{**}(k,d)} \leq \max_k \kappa^*(k)^{1/\alpha_2^*(k,d)}$$

gelten, falls die Maxima jeweils über alle ganzen Zahlen $k \geq 0$ genommen werden. Die Ungleichungen führen unmittelbar zur Aussage. Wegen $\alpha_2^*(k, d) \leq \alpha_1^*(k, d)$

und $\alpha_2^{**}(k, d) \leq \alpha_1^{**}(k, d)$ sind die erste Ungleichung und der erste Teil der zweiten Ungleichung sofort ersichtlich. Da weiterhin $\alpha_2^{**}(k, d) = \alpha_2^{**}(k+1, d)$ und, wie leicht zu bestätigen ist, $\kappa^{**}(k) < \kappa^{**}(k+1)$ zutreffen und folglich

$$\kappa^{**}(k)^{1/\alpha_2^{**}(k, d)} < \kappa^{**}(k+1)^{1/\alpha_2^{**}(k+1, d)}$$

für jede ganze Zahl $k \geq 0$ gilt, ist auch der zweite Teil der obigen Ungleichung und damit die Aussage bewiesen.

Die Tabelle 2 enthält zum Verfahren 2, welches auf Grund der obigen Aussage hervorzuheben ist, einige Angaben zur Illustration: In Abhängigkeit von d die optimale Stufenzahl k_{\max} , die Logarithmen der Wirkungsgrade $\lambda_2^*(k) = \kappa^*(k)^{1/\alpha_2^*(k)}$ für $k=0$ und $k=k_{\max}$, sowie als Maß für den verbleibenden Aufwand bei der Verwendung von k_{\max} das Verhältnis von $\lg \lambda_2^*(0)$ zu $\lg \lambda_2^*(k_{\max})$ in Prozent (s. (6.2)).

Tabelle 2. Wirkungsgrade für das Verfahren 2

d	k_{\max}	$\lg \lambda_2^*(0)$	$\lg \lambda_2^*(k_{\max})$	$\lg \lambda_2^*(0) : \lg \lambda_2^*(k_{\max})$
1	1	0,12212	0,12212	100%
2	2	0,04071	0,04743	86%
3	2	0,02035	0,02767	74%
4	4	0,01221	0,01879	65%
5	4	0,00814	0,01396	58%
6	4	0,00582	0,01086	54%
7	4	0,00436	0,00872	50%
10	6	0,00222	0,00528	42%
15	8	0,00116	0,00312	37%
20	8	0,00064	0,00201	32%
30	12	0,00028	0,00106	26%

7. Numerische Beispiele

Auf einer Rechenanlage „Minsk 22“ (Hochschule für Verkehrswesen „Friedrich List“ zu Dresden) sind mehrere Testbeispiele nach dem Verfahren 2 durchgerechnet und der Aufwand an Funktionswerten für $k=0$ und $k=k_{\max}$ miteinander verglichen worden. Ein Beispiel ist aus [2] übernommen worden:

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^d f_i(\mathbf{x})^2, \quad f_i(\mathbf{x}) = \sum_{k=1}^d (a_{ik} \sin x_k + b_{ik} \cos x_k) + e_i \quad (i=1, \dots, d);$$

hierbei sind die a_{ik}, b_{ik} Zufallszahlen aus $[-100, +100]$, während die e_i so gewählt werden, daß ein vorgegebener Zufallsvektor \mathbf{x}^* mit Komponenten aus $[-\pi, +\pi]$ die Eigenschaft $f(\mathbf{x}^*)=0$ hat, d.h. \mathbf{x}^* ist Lösung der Aufgabe $f(\mathbf{x}) = \text{Minimum!}$ bei $\mathbf{x} \in \mathbf{R}$. Mit Zufallszahlen r_i aus $[-\pi, +\pi]$ sind die Komponenten der Startvektoren in der Form $x_i^* + \varepsilon r_i$ gewählt worden; durch die Zahl ε kann die Güte der Startvektoren gesteuert werden. Für einige Dimensionen d sind Angaben über die benötigte Anzahl $A(k)$ von Funktionswerten zur Erreichung einer bestimmten Genauigkeit in der Tabelle 3 zusammengefaßt. In den Beispielen 1 bis 7 wurde $\varepsilon=0,1$ gesetzt. Für $d=6, 8, 10$ stellte sich mit diesem ε keine Konvergenz ein; die Güte der Startvektoren wurde daher verbessert, indem jetzt $\varepsilon=0,01$ genommen wurde (Beispiele 8 bis 13).

Tabelle 3. Numerische Ergebnisse

Nr.	d	$f(\mathbf{x}_0)$	Verfahren 2, $k=0$		Verfahren 2, $k=k_{\max}$		$A(k_{\max}):A(0)$
			$f(\mathbf{x}_{\text{end}})$	$A(0)$	$f(\mathbf{x}_{\text{end}})$	$A(k_{\max})$	
1	2	701	0, ¹² 63	25	0, ¹¹ 11	21	84 %
2	3	890	0, ¹² 24	47	0, ¹² 24	38	81 %
3	3	847	0, ¹³ 85	54	0, ¹¹ 66	39	72 %
4	4	1274	0, ¹¹ 30	96	0, ⁹ 14	77	80 %
5	4	943	div.		—		
6	6	2709	div.		—		
7	6	7776	div.		—		
8	4	40	0, ¹¹ 97	56	0, ¹⁰ 15	42	75 %
9	6	15	0, ¹⁰ 15	239	0, ¹⁰ 65	137	57 %
10	8	34	0, ⁹ 14	334	div.		
11	10	104	0, ⁸ 10	452	0, ¹⁰ 93	327	72 %
12	10	77	div.		0, ⁸ 52	232	
13	10	88	0, ⁹ 14	728	0, ⁹ 11	432	58 %

Die genannten Fälle weisen darauf hin, daß die in den Konvergenzsätzen auftretende Voraussetzung über die Güte der Startvektoren in konkreten Beispielen durchaus eine starke Forderung bedeuten kann. Die Beschaffung von genügend guten Startvektoren kann u.U. ein zu beachtendes Zusatzproblem sein; in manchen Fällen kann man hierfür mit Erfolg langsamer konvergente, aber gegen größere Startvektoren weniger anfällige Verfahren heranziehen.

Es sei weiterhin das Beispiel

$$f = \frac{1}{1 + (x_1 - x_2)^2} + \sin \frac{\pi x_2 + x_3}{2} + \exp \left(- \left(\frac{x_1 + x_3}{x_2} - 2 \right)^2 \right) = \text{Extremum!}$$

mit den stationären Vektoren $x_1 = x_2 = x_3 = \pm \sqrt{4n+1}$ ($n=0, 1, \dots$) erwähnt. Um den Funktionswert f für einen der stationären Vektoren um vier Dezimalstellen zu verbessern, sind bei bestimmten Startvektoren für $k=0$ insgesamt $A(0)=89$ Funktionswerte benötigt worden, während für $k=k_{\max}=2$ nur $A(k_{\max})=38$ Funktionswerte, d.h. 43 % von $A(0)$ erforderlich waren.

Es sei schließlich vermerkt, daß in den Beispielen mit singulärer Matrix $f''(\mathbf{x}^*)$ die Konvergenz stets nur linear erfolgte.

Literatur

1. Collatz, L., Wetterling, W.: Optimierungsaufgaben. Berlin-Heidelberg-New York: Springer 1966.
2. Fletcher, D., Powell, M. J. D.: A rapidly convergent descent method for minimization. Comput. J. **6**, 163–168 (1963).
3. Helfrich, H.-P.: Ein modifiziertes Newton-Verfahren. In „Funktionalanalytische Methoden in der numerischen Mathematik“. ISNM **12**, 61–70 (1969).
4. Künzi, H. P.: Zum heutigen Stand der nichtlinearen Optimierungstheorie. Unternehmensforschung **12**, 1–22 (1968).
5. Levitin, E. S., Poljak, B. T.: Minimierungsverfahren unter Berücksichtigung von Nebenbedingungen [Russ.]. Ž. Vyčisl. Mat. i Mat. Fiz. **6**, 787–823 (1966).
6. Ostrowski, A.: Solution of equations and systems of equations. 2nd ed. New York-London: Academic Press 1966.

7. Poll, V.: Über einige Methoden zur Bestimmung von stationären Punkten bei Funktionen von mehreren Veränderlichen [Russ.]. *Izv. Akad. Nauk Est. SSR Ser. Fiz. Mat.* **16**, 35–44 und 157–167 (1967).
8. Schmidt, J. W.: Eine Übertragung der Regula falsi auf Gleichungen in Banachräumen. *Z. Ang. Math. Mech.* **41**, T 61–T 63 (1961); **43**, 1–8 und 97–110 (1963).
9. — Extremwertermittlung mit Funktionswerten. *Wiss. Zeitschr. TU Dresden* **12**, 1601–1605 (1963).
10. — Leder, D.: Ableitungsfreie Verfahren ohne Auflösung linearer Gleichungen. *Computing* **5**, 71–81 (1970).
11. — Schwetlick, H.: Ableitungsfreie Verfahren mit höherer Konvergenzgeschwindigkeit. *Computing* **3**, 215–226 (1968).
12. — Trinkaus, H.-F.: Extremwertermittlung mit Funktionswerten bei Funktionen von mehreren Veränderlichen. *Computing* **1**, 224–232 (1966).
13. Traub, J. F.: *Iterative methods for the solution of equations*. Englewood Cliffs, N. J.: Prentice-Hall 1964.
14. Ulm, S.: Über verallgemeinerte Steigungen [Russ.]. *Izv. Akad. Nauk Est. SSR Ser. Fiz. Mat.* **16**, 13–26 und 146–156 (1967).
15. — Über Iterationsverfahren mit sukzessiver Approximation des inversen Operators [Russ.]. *Izv. Akad. Nauk Est. SSR Ser. Fiz. Mat.* **16**, 403–411 (1967).
16. — Poll, V.: Über einige Verfahren zur Lösung von Minimierungsaufgaben [Russ.]. *Izv. Akad. Nauk Est. SSR Ser. Fiz. Mat.* **17**, 151–163 (1968).
17. Vettters, K.: Quadratische Approximationsmethoden zur konvexen Optimierung. *Z. Ang. Math. Mech.* **50**, 479–484 (1970).
18. Willers, Fr. A.: *Methoden der praktischen Analysis*. 3. Aufl. Berlin: Walter de Gruyter 1957.

Prof. Dr. J. W. Schmidt und Dr. K. Vettters
Bereich Numerische Mathematik
Sektion Mathematik
Technische Universität Dresden
DDR-8027 Dresden
Zellescher Weg