

# VORLESUNGSSKRIPT

## GRUNDLAGEN DER OPTIMIERUNG

WINTERSEMESTER 2021

Roland Herzog\*

2022-10-18

\*Interdisciplinary Center for Scientific Computing, Heidelberg University, 69120 Heidelberg, Germany  
(roland.herzog@iwr.uni-heidelberg.de, <https://scoop.iwr.uni-heidelberg.de/team/roland-herzog>).

Material für 14 Wochen.

# Inhaltsverzeichnis

o Einführung	5
§ 1 Grundbegriffe und Klassifikation von Optimierungsaufgaben	5
§ 2 Notation und Wiederholung von Diffbarkeitsbegriffen	10
1 Unrestriktierte Optimierung	14
§ 3 Optimalitätsbedingungen der unrestrictierten Optimierung	14
§ 4 Das Gradientenverfahren	16
§ 4.1 Vorstellung des Verfahrens	18
§ 4.2 Das Gradientenverfahren in einem alternativen Skalarprodukt	23
§ 4.3 Konvergenz bei quadratischer Zielfunktion und exakter Liniensuche	25
§ 5 Das Newton-Verfahren	32
§ 5.1 Einige Hilfsresultate	33
§ 5.2 Das lokale Newton-Verfahren für die Nullstellenbestimmung $F(x) = 0$	36
§ 5.3 Das lokale Newton-Verfahren in der Optimierung	38
§ 5.4 Ein globalisiertes Newton-Verfahren in der Optimierung	39
2 Lineare Optimierung	42
3 Konvexe Optimierung	43



# Kapitel 0 Einführung

## § 1 GRUNDBEGRIFFE UND KLASIFIKATION VON OPTIMIERUNGSAUFGABEN

Die mathematische Optimierung beschäftigt sich mit Aufgaben der Form

$$\left. \begin{array}{lll} \text{Minimiere} & f(x) & \text{über } x \in \Omega \quad (\text{Zielfunktion}) \\ \text{sodass} & g_i(x) \leq 0 & \text{für } i \in \mathcal{I} \quad (\text{Ungleichungsnebenbedingungen}) \\ \text{und} & h_j(x) = 0 & \text{für } j \in \mathcal{E}. \quad (\text{Gleichungsnebenbedingungen}) \end{array} \right\} \quad (1.1)$$

$\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$  heißt die **Grundmenge** und  $x$  die **Optimierungsvariable** oder einfach die **Variable** der Aufgabe. Oft sind dabei

- die Funktionen  $f, g_i, h_j: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  hinreichend glatt ( $C^2$ -Funktionen),
- $\mathcal{I}$  und  $\mathcal{E}$  endliche (evtl. leere) Indexmengen.

Im Fall  $\Omega = \mathbb{R}^n$  spricht man von **kontinuierlicher Optimierung**. Im Fall  $\Omega = \mathbb{Z}^n$  handelt es sich um **diskrete (ganzzahlige) Optimierungsaufgaben**, die in dieser Lehrveranstaltung nur am Rande behandelt werden.

**Definition 1.1** (Grundbegriffe).

(i) Für eine Optimierungsaufgabe (1.1) heißt

$$F := \{x \in \Omega \mid g_i(x) \leq 0 \text{ für alle } i \in \mathcal{I}, h_j(x) = 0 \text{ für alle } j \in \mathcal{E}\}$$

die **zulässige Menge** (englisch: feasible set). Jedes  $x \in F$  heißt **zulässiger Punkt** (englisch: feasible point).

(ii) Die Ungleichung  $g_i(x) \leq 0$  heißt an der Stelle  $x$  **aktiv**, wenn  $g_i(x) = 0$  gilt. Sie heißt **inaktiv**, wenn  $g_i(x) < 0$  ist. Sie heißt **verletzt**, wenn  $g_i(x) > 0$  ist.

(iii) Der Wert

$$f^* := \inf \{f(x) \mid x \in F\}$$

heißt der **Optimalwert** (englisch: optimal value) der Aufgabe (1.1).

(iv) Im Fall  $F = \emptyset$  nennt man die Aufgabe (1.1) **unzulässig** (englisch: infeasible). Es gilt dann  $f^* = +\infty$ . Im Fall  $f^* = -\infty$  heißt das Problem **unbeschränkt** (englisch: unbounded).

- (v) Ein Punkt  $x^* \in F$  heißt ein **globaler Minimierer**, **globale Minimalstelle** oder **global optimale Lösung**, wenn gilt:

$$f(x^*) \leq f(x) \text{ für alle } x \in F.$$

Äquivalent dazu ist:  $f(x^*) = f^*$ . In diesem Fall heißt die Zahl  $f^*$  dann auch das **globale Minimum** oder der **globale Minimalwert** von (1.1).

- (vi) Ein globaler Minimierer  $x^*$  heißt **strikt**, wenn gilt:

$$f(x^*) < f(x) \text{ für alle } x \in F, x \neq x^*.$$

- (vii) Ein Punkt  $x^* \in F$  heißt ein **lokaler Minimierer**, **lokale Minimalstelle** oder **lokal optimale Lösung**, wenn es eine Umgebung  $U(x^*)$  gibt, sodass gilt:

$$f(x^*) \leq f(x) \text{ für alle } x \in F \cap U(x^*).$$

In diesem Fall heißt  $f(x^*)$  dann auch ein **lokales Minimum** oder ein **lokaler Minimalwert** von (1.1).

- (viii) Ein lokaler Minimierer  $x^*$  heißt **strikt**, wenn gilt:

$$f(x^*) < f(x) \text{ für alle } x \in F \cap U(x^*), x \neq x^*.$$

- (ix) Eine Optimierungsaufgabe (1.1) heißt **lösbar**, wenn sie mindestens einen globalen Minimierer besitzt, also einen zulässigen Punkt, an dem der Optimalwert angenommen wird. Ansonsten heißt die Aufgabe **unlösbar**.

**Quizfrage 1.1:** Welche Eigenschaften haben die in Abbildung 1.1 markierten Punkte?

**Quizfrage 1.2:** Was ist der Unterschied zwischen einem lokalen und einem globalen Minimierer?

**Quizfrage 1.3:** Ist jeder globale Minimierer auch ein lokaler Minimierer? Ist jeder lokale Minimierer auch ein globaler Minimierer?

**Quizfrage 1.4:** Gibt es Optimierungsaufgaben, die einen lokalen Minimierer besitzen, aber keinen globalen?

**Quizfrage 1.5:** Wie definiert man die Begriffe (strikter) globaler Maximierer und (strikter) lokaler Maximierer?

**Beachte:** Eine Maximierungsaufgabe „Maximiere  $f(x)$  über  $x \in F$ “ kann durch Übergang zu „Minimierte  $-f(x)$  über  $x \in F$ “ immer in eine Minimierungsaufgabe umgeschrieben werden.

Neben der Frage, welche verschiedenen Klassen von Optimierungsaufgaben es gibt, sind folgende Fragestellungen in der mathematischen Optimierung von Bedeutung:

- (1) Wann existieren Optimallösungen?

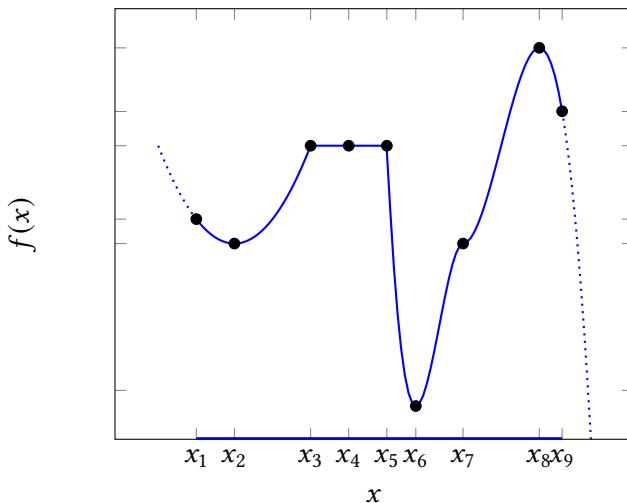


Abbildung 1.1: Illustration der Begriffe aus [Definition 1.1](#) anhand einer Zielfunktion  $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ . Die zulässige Menge ist das auf der  $x$ -Achse markierte Intervall.

- (2) Wie erkennt man sie? ( $\leadsto$  Optimalitätsbedingungen)
- (3) Wie kann man Lösungen algorithmisch berechnen?

In dieser Lehrveranstaltung werden wir diese Fragen für einige wichtige Typen von Optimierungsaufgaben (1.1) beantworten. Aufgaben der allgemeinen Form (1.1) mit nichtlinearer Zielfunktion und/oder nichtlinearen Nebenbedingungen werden in der Lehrveranstaltung *Nichtlineare Optimierung* behandelt. Später schließen sich Veranstaltungen beispielsweise zu unendlich-dimensionalen Optimierungsaufgaben, insbesondere Aufgaben der Optimierung mit partiellen Differentialgleichungen, an.

Solange nichts anderes gesagt wird, gehen wir ab jetzt immer von  $\Omega = \mathbb{R}^n$  aus.

### **Definition 1.2** (Klassifikation von Optimierungsaufgaben).

(i) Eine Optimierungsaufgabe (1.1) heißt **frei** oder **unrestringiert** (englisch: *unconstrained*), wenn  $\mathcal{I} = \mathcal{E} = \emptyset$  ist, andernfalls **gleichungs- und/oder ungleichungs-beschränkt** oder **-restringiert** (englisch: *equality constrained, inequality constrained*).<sup>1</sup>

(ii) Ungleichungsbeschränkungen der besonders einfachen Art

$$\ell_i \leq x_i \leq u_i, \quad i = 1, \dots, n$$

mit  $\ell_i \in \mathbb{R} \cup \{-\infty\}$  und  $u_i \in \mathbb{R} \cup \{\infty\}$  heißen **Box-Beschränkungen** (englisch: *box constraints, bound constraints*) mit **oberer Schranke**  $u$  und **unterer Schranke**  $\ell$ .

(iii) Sind  $f, g$  und  $h$  (affin-)lineare Funktionen von  $x$ , so sprechen wir von **linearer Optimierung**.<sup>2</sup> Eine lineare Optimierungsaufgabe heißt auch **lineares Programm** (englisch: *linear program, LP*),

<sup>1</sup>Wir behandeln unrestringierte Aufgaben in [Kapitel 1](#).

<sup>2</sup>Diese werden in [Kapitel 2](#) behandelt.

also z. B.

$$\text{Minimiere } c^T x \text{ sodass } Ax = b \text{ und } x \geq 0.$$

- (iv) Sind allgemeiner  $f$  und alle  $g_i$  konvexe Funktionen und sind alle  $h_j$  wieder (affin-)linear, so sprechen wir von **konvexer Optimierung**. Hierbei darf außerdem noch  $\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$  eine konvexe Teilmenge sein.<sup>3</sup>
- (v) Ist  $f$  ein quadratisches Polynom und sind  $g$  und  $h$  (affin-)linear, so sprechen wir von **quadratischer Optimierung**. Eine quadratische Optimierungsaufgabe heißt auch **quadratisches Programm (QP)**.
- (vi) Im allgemeinen Fall spricht man von **nichtlinearer Optimierung** und von einem **nichtlinearen Programm (NLP)**. Nichtlineare Optimierungsaufgaben und zugehörige Lösungsalgorithmen werden in der Lehrveranstaltung Nichtlineare Optimierung behandelt.

**Bemerkung 1.3.** Die Grundsteine der linearen Optimierung wurden in den 1940er Jahren von einer Projektgruppe SCOOP (Scientific Computation of Optimum Programs) um George Dantzig (1914–2005) bei der U.S. Air Force gelegt. Im militärischen Sprachgebrauch wurde die Ressourcenplanung als die Erstellung eines Programms bezeichnet, und diese Bezeichnung hat sich erhalten. George Dantzig entwickelte 1947 das Simplex-Verfahren (siehe Kapitel 2). Mehr zur Historie findet man in Gass, Assad, 2005.

Nicht jede Optimierungsaufgabe ist lösbar, besitzt also einen globalen Minimierer. Ein Kriterium für die Lösbarkeit liefert der Satz von Weierstraß aus der Analysis: „Stetige reellwertige Funktionen nehmen auf kompakten Mengen ihr Minimum (und ihr Maximum) an.“ Damit folgt sofort: Wenn die Zielfunktion  $f: F \rightarrow \mathbb{R}$  stetig und die zulässige Menge  $F$  kompakt ist, dann besitzt die Aufgabe

$$\text{Minimiere } f(x) \text{ über } x \in F$$

mindestens einen globalen Minimierer. Wir wollen diese Voraussetzungen hier in zwei Richtungen abschwächen:

- (1) Es ist bereits ausreichend, dass es ein Niveau  $m \in \mathbb{R}$  gibt, sodass die zugehörige **Sublevelmenge** (englisch: *sublevel set*) von  $f$

$$L := \{x \in F \mid f(x) \leq m\}$$

nichtleer und kompakt ist.

- (2) An Stelle der Stetigkeit von  $f$  wird nur die Unterhalbstetigkeit benötigt:

**Definition 1.4** (Unterhalbstetigkeit). Es sei  $F \subseteq \mathbb{R}^n$  eine nichtleere Menge. Eine Funktion  $f: F \rightarrow \mathbb{R}$  heißt **unterhalbstetig** (auch: **halbstetig von unten**, englisch: *lower semicontinuous*) auf  $F$ , wenn gilt:

$$(x^{(k)}) \subseteq F, \quad x^{(k)} \rightarrow x^* \in F \quad \Rightarrow \quad \liminf_{k \rightarrow \infty} f(x^{(k)}) \geq f(x^*).$$

---

<sup>3</sup>Diese Aufgaben werden in Kapitel 3 besprochen.

**Lemma 1.5** (Äquivalenz zur Unterhalbstetigkeit).

Es sei  $F \subseteq \mathbb{R}^n$  eine nichtleere Menge. Für eine Funktion  $f: F \rightarrow \mathbb{R}$  sind äquivalent:

- (i)  $f$  ist unterhalbstetig auf  $F$ .
- (ii) Alle Sublevelmengen  $\{x \in F \mid f(x) \leq m\}$ ,  $m \in \mathbb{R}$ , sind abgeschlossen in  $F$ .

*Beweis.* Wir nehmen zunächst Aussage (i) an. Es sei  $L := \{x \in F \mid f(x) \leq m\}$  eine Sublevelmenge von  $f$ . Wenn  $L$  leer ist, ist nichts zu zeigen. Andernfalls betrachten wir eine Folge  $(x^{(k)}) \subseteq L$ , die in  $F$  konvergiert, also  $x^{(k)} \rightarrow x^* \in F$ . Dann gilt nach Definition der Unterhalbstetigkeit  $f(x^*) \leq \liminf_{k \rightarrow \infty} f(x^{(k)})$  und weiter  $f(x^{(k)}) \leq m$  wegen  $x^{(k)} \in L$ . Daraus folgt auch  $f(x^*) \leq m$ , d. h.,  $x^* \in L$ . Das zeigt, dass  $L$  in  $F$  abgeschlossen ist.

Umgekehrt gelte Aussage (ii). Wir betrachten eine Folge  $(x^{(k)}) \subseteq F$ ,  $x^{(k)} \rightarrow x^* \in F$ . Wir nehmen das Gegenteil von Aussage (i) an, also  $C := \liminf_{k \rightarrow \infty} f(x^{(k)}) < f(x^*)$ . Nach Definition des Limes inferior gibt es eine Teilfolge mit den Indizes  $k^{(\ell)}$ , sodass  $f(x^{(k^{(\ell)})}) \rightarrow C < f(x^*)$  konvergiert. Aufgrund der Annahme gibt es also ein  $\varepsilon > 0$  und ein  $\ell_0 \in \mathbb{N}$ , sodass für alle  $\ell > \ell_0$  die Beziehung  $f(x^{(k^{(\ell)})}) + \varepsilon \leq f(x^*)$  erfüllt ist. Mit anderen Worten: Alle „späten“ Folgenglieder von  $x^{(k^{(\ell)})}$  gehören zur Sublevelmenge mit dem Niveau  $f(x^*) - \varepsilon$ . Nach Voraussetzung ist diese Menge abgeschlossen, also gehört auch der Grenzwert  $x^*$  zu dieser Menge. Das bedeutet aber, dass  $f(x^*) \leq f(x^*) - \varepsilon$  ist – ein Widerspruch.  $\square$

Wir formulieren nun einen allgemeinen Existenzsatz für globale Minimierer.

**Satz 1.6** (Existenz eines globalen Minimierers).

Die zulässige Menge  $F \subseteq \mathbb{R}^n$  sei nicht leer. Weiter sei  $f: F \rightarrow \mathbb{R}$  unterhalbstetig, und für irgendein  $m \in \mathbb{R}$  sei die Sublevelmenge

$$L := \{x \in F \mid f(x) \leq m\}$$

nicht leer und kompakt.<sup>4</sup> Dann besitzt die Aufgabe

$$\text{Minimiere } f(x) \text{ über } x \in F$$

mehrstens einen globalen Minimierer.

*Beweis.* Wir zeigen zuerst, dass  $f$  auf  $F$  nach unten beschränkt sein muss. Andernfalls gibt es eine Folge  $(x^{(k)}) \subseteq F$  mit der Eigenschaft  $f(x^{(k)}) \leq -k$ . Für hinreichend große  $k \in \mathbb{N}$  liegen die Glieder dieser Folge in der Menge  $L$ . Da aber  $L$  kompakt ist, existiert eine konvergente Teilfolge  $(x^{(k^{(\ell)})}) \subseteq L$  mit der Eigenschaft  $x^{(k^{(\ell)})} \rightarrow x^* \in L$  für  $\ell \rightarrow \infty$ . Aufgrund der Unterhalbstetigkeit von  $f$  folgt  $f(x^*) \leq \liminf_{\ell \rightarrow \infty} f(x^{(k^{(\ell)})}) = -\infty$ ; Widerspruch.

<sup>4</sup>**Beachte:** Bei der Kompaktheit von Mengen kommt es nicht auf die Teilraumtopologie an, in der wir diese betrachten. Bei der Kompaktheit von  $L = \{x \in F \mid f(x) \leq m\}$  kommt es also nicht darauf an, ob wir sie als kompakte Teilmenge von  $F$  oder von  $\mathbb{R}^n$  ansehen. Die Charakterisierung „kompakt  $\Leftrightarrow$  abgeschlossen und beschränkt“ gilt jedoch in  $\mathbb{R}^n$  und nicht in beliebigen Teilmengen.

Es sei nun  $f^* := \inf_{x \in F} f(x) \in \mathbb{R}$  der endliche Optimalwert und  $m \in \mathbb{R}$  in Niveau wie in der Voraussetzung. Dann gibt es eine Folge  $(x^{(k)}) \subseteq F$  mit der Eigenschaft<sup>5</sup>  $f(x^{(k)}) \searrow f^*$ . Wir unterscheiden zwei Fälle: Falls  $m = f^*$  ist, dann besteht die Sublevelmenge  $L$  nur aus globalen Minimierern und ist nach Annahme nicht leer; fertig. Andernfalls ist  $m > f^*$ , und wegen  $f(x^{(k)}) \searrow f^*$  gilt: Für hinreichend große  $k \in \mathbb{N}$  gehört die Folge zur Sublevelmenge  $L$ , und aufgrund der Kompaktheit existiert eine konvergente Teilfolge  $x^{(k(\ell))} \rightarrow x^*$ , deren Grenzwert  $x^*$  in  $L$  liegt und insbesondere zulässig ist. Wegen der Unterhalbstetigkeit von  $f$  gilt  $\lim_{\ell \rightarrow \infty} f(x^{(k(\ell))}) \geq f(x^*)$ , aber auch  $\lim_{\ell \rightarrow \infty} f(x^{(k(\ell))}) = f^*$ . Dies zeigt, dass  $x^*$  ein globaler Minimierer ist.  $\square$

## § 2 NOTATION UND WIEDERHOLUNG VON DIFFERENZIERBARKEITSBEGRIFFEN

In diesem Skript verwenden wir farbige Kennzeichnungen für **Definitionen** und **Hervorhebungen**.

- Die natürlichen Zahlen sind  $\mathbb{N} = \{1, 2, \dots\}$ . Wir schreiben  $\mathbb{N}_0$  für  $\mathbb{N} \cup \{0\}$ .
- Wir bezeichnen offene Intervalle mit  $(a, b)$  und abgeschlossene Intervalle mit  $[a, b]$ .
- Matrizen werden üblicherweise mit lateinischen Großbuchstaben bezeichnet, Vektoren mit lateinischen Kleinbuchstaben und Skalare mit griechischen oder lateinischen Kleinbuchstaben. Die Einheitsmatrix wird mit  $\text{Id}$  bezeichnet. Wir unterscheiden den Vektorraum der Spaltenvektoren  $\mathbb{R}^n$  vom Vektorraum der Zeilenvektoren  $\mathbb{R}_n$ .
- Unendliche skalarwertige oder vektorwertige Folgen  $\mathbb{N} \rightarrow \mathbb{R}^n$  bezeichnen wir mit  $(x^{(k)})$  und nicht mit  $x_k$  etc., um einen Konflikt mit der Bezeichnung der Komponenten eines Vektors  $x = (x_1, \dots, x_n)^\top \in \mathbb{R}^n$  zu vermeiden. Endlich viele Vektoren werden dennoch auch gelegentlich mit  $x_1, x_2$  etc. bezeichnet, wenn wir deren Komponenten nicht benötigen.
- Die durch die streng monoton wachsende Folge  $\mathbb{N} \ni \ell \mapsto k^{(\ell)} \in \mathbb{N}$  gebildete **Teilfolge** einer Folge  $(x^{(k)})$  wird mit  $(x^{(k^{(\ell)})})$  bezeichnet.
- Für Vektoren  $x, y \in \mathbb{R}^n$  bezeichnet  $x^\top y$  das Euklidische Skalarprodukt (Innenprodukt) und  $\|x\|$  die euklidische Norm:

$$\|x\| = \sqrt{x^\top x}.$$

Wir schreiben also *nicht*  $\langle x, y \rangle$  oder  $x \cdot y$  für das Euklidische Skalarprodukt.

- Ist  $M \in \mathbb{R}^{n \times n}$  eine symmetrische, positiv definite Matrix, so erzeugt sie ein Skalarprodukt  $x^\top M y$  und eine Norm  $\|x\|_M = \sqrt{x^\top M x}$  auf  $\mathbb{R}^n$ . Es gilt  $\|x\| = \|x\|_{\text{Id}}$ .
- Für  $\varepsilon > 0$  und  $x^* \in \mathbb{R}^n$  ist

$$B_\varepsilon(x^*) := \{x \in \mathbb{R}^n \mid \|x - x^*\| < \varepsilon\}$$

---

<sup>5</sup>Für eine reelle Zahlenfolge  $(y^{(k)})$  bedeutet  $y^{(k)} \searrow y$ , dass  $y^{(k)} > y$  gilt und  $y^{(k)} \rightarrow y$ . Die Monotonie der Folge wird nicht verlangt.

die **offene  $\varepsilon$ -Umgebung** von  $x^*$  oder auch die **offene  $\varepsilon$ -Kugel** um  $x^*$ . Die **abgeschlossene  $\varepsilon$ -Umgebung** von  $x^*$  oder auch die **abgeschlossene  $\varepsilon$ -Kugel** notieren wir als

$$\overline{B_\varepsilon(x^*)} := \{x \in \mathbb{R}^n \mid \|x - x^*\| \leq \varepsilon\}.$$

- Das **Innere** einer Menge  $M \subseteq \mathbb{R}^n$  bezeichnen wir mit  $\text{int } M$  und den **Abschluss** mit  $\overline{M}$ .
- Für eine Funktion  $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  und gegebenes  $x \in \mathbb{R}^n$  heißt die Ableitung der partiellen Funktion  $t \mapsto f(x + t e_i)$  an der Stelle  $t = 0$  die *i-te partielle Ableitung* von  $f$  an der Stelle  $x$ , kurz:  $\frac{\partial}{\partial x_i} f(x)$ . Dabei ist  $e_i = (0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0)^\top$  einer der Vektoren der Standardbasis von  $\mathbb{R}^n$ . Mit anderen Worten:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} f(x) = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{f(x + t e_i) - f(x)}{t}.$$

- Allgemeiner heißt die Ableitung der Funktion  $t \mapsto f(x + t d)$  an der Stelle  $t = 0$  die **(beidseitige) Richtungsableitung** von  $f$  an der Stelle  $x$  in Richtung  $d \in \mathbb{R}^n$ , kurz:

$$\frac{\partial}{\partial d} f(x) = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{f(x + t d) - f(x)}{t}.$$

- Die rechtsseitige Ableitung der Funktion  $t \mapsto f(x + t d)$  an der Stelle  $t = 0$  heißt die **(einseitige) Richtungsableitung** von  $f$  an der Stelle  $x$  in Richtung  $d \in \mathbb{R}^n$ , kurz:

$$f'(x; d) = \lim_{t \searrow 0} \frac{f(x + t d) - f(x)}{t}.$$

- Eine Funktion  $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  heißt **differenzierbar** (kurz: **diffbar**) an der Stelle  $x \in \mathbb{R}^n$ , falls ein Vektor  $v \in \mathbb{R}_n$  (Zeilenvektor) existiert, sodass gilt:

$$\frac{f(x + d) - f(x) - v d}{\|d\|} \rightarrow 0 \quad \text{für } d \rightarrow 0.$$

Der Vektor  $v$  heißt in dem Fall die **(totale) Ableitung** von  $f$  an der Stelle  $x$  und wird mit  $f'(x)$  bezeichnet.

- Für diffbare Funktionen  $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  gilt

$$f'(x) = \left( \frac{\partial f(x)}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial f(x)}{\partial x_n} \right) \in \mathbb{R}_n.$$

Den transponierten Vektor (Spaltenvektor)

$$\nabla f(x) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f(x)}{\partial x_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial f(x)}{\partial x_n} \end{pmatrix} = f'(x)^\top \in \mathbb{R}^n$$

bezeichnen wir als den **Gradienten** (bzgl. des Euklidischen Skalarprodukts) von  $f$  an der Stelle  $x$ .

- Für diffbare Funktionen  $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  gilt:

$$f'(x; d) = \frac{\partial}{\partial d} f(x) = f'(x) d = \nabla f(x)^\top d.$$

- Eine Funktion  $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  heißt **stetig partiell diffbar** oder kurz:  $C^1(\mathbb{R}^n, \mathbb{R})$ , wenn alle partiellen Ableitungen  $\frac{\partial f(x)}{\partial x_i}$  als Funktionen von der Stelle  $x$  stetig sind.  $C^1$ -Funktionen sind überall diffbar.
- Eine vektorwertige Funktion  $F: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$  heißt an der Stelle  $x$  **diffbar**, wenn alle Komponentenfunktionen  $F_1, \dots, F_m$  dort diffbar sind. In diesem Fall ist die Ableitung  $F'(x)$  durch die **Jacobimatrix** von  $F$  an der Stelle  $x$ , also durch

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial F_1(x)}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial F_1(x)}{\partial x_n} \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial F_m(x)}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial F_m(x)}{\partial x_n} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{m \times n},$$

gegeben.

- $F$  heißt **stetig partiell diffbar**, wenn alle Einträge der Jacobimatrix als Funktionen von der Stelle  $x$  stetig sind.  $C^1$ -Funktionen sind überall diffbar.
- Eine Funktion  $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  heißt **zweimal differenzierbar** (kurz: **zweimal diffbar**) an der Stelle  $x \in \mathbb{R}^n$ , falls  $f$  in einer Umgebung von  $x$  diffbar ist und die Ableitung  $x \mapsto f'(x) \in \mathbb{R}^n$  an der Stelle  $x$  diffbar ist. In diesem Fall ist die zweite Ableitung  $f''(x)$  durch die **Hessematrix** von  $f$  an der Stelle  $x$ , also durch die Matrix der zweiten partiellen Ableitungen

$$\left( \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_i \partial x_j} \right)_{i,j=1}^n = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_1^2} & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_1 \partial x_2} & \dots & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_2 \partial x_1} & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_2^2} & \dots & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_2 \partial x_n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_n \partial x_1} & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_n \partial x_2} & \dots & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_n^2} \end{pmatrix},$$

gegeben. Diese ist dann symmetrisch (Satz von Schwarz)<sup>6</sup>.

- Eine Funktion  $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  heißt **zweimal stetig partiell differenzierbar** oder kurz:  $C^2(\mathbb{R}^n, \mathbb{R})$ , wenn alle Einträge der Hessematrix als Funktionen von der Stelle  $x$  stetig sind.  $C^2$ -Funktionen sind überall zweimal diffbar.

Schließlich benötigen wir auch den Satz von Taylor, den wir in zwei Versionen angeben:

**Satz 2.1** (Taylor, siehe [Cartan, 1967](#), Theorem 5.6.3). *Es sei  $G \subseteq \mathbb{R}^n$  offen,  $k \in \mathbb{N}_0$  und  $f: G \rightarrow \mathbb{R}$   $k$ -mal diffbar sowie  $(k+1)$ -mal diffbar im Punkt  $x_0 \in G$ . Dann gilt: Für alle  $\varepsilon > 0$  existiert  $\delta > 0$ , sodass gilt:*

$$\text{im Fall } k = 0 : |f(x_0 + d) - f(x_0) - f'(x_0) d| \leq \varepsilon \|d\|,$$

$$\text{im Fall } k = 1 : |f(x_0 + d) - f(x_0) - f'(x_0) d - \frac{1}{2} d^\top f''(x_0) d| \leq \varepsilon \|d\|^2.$$

<sup>6</sup>siehe z. B. [Cartan, 1967](#), Proposition 5.2.2

für alle  $\|d\| < \delta$ .

**Satz 2.2** (Taylor, siehe Geiger, Kanzow, 1999, Satz A.2 oder auch Heuser, 2002, Satz 168.1).

Es sei  $G \subseteq \mathbb{R}^n$  offen,  $k \in \mathbb{N}_0$  und  $f: G \rightarrow \mathbb{R}$  ( $k+1$ -mal stetig partiell diffbar, kurz:  $C^{k+1}(G, \mathbb{R})$ ). Falls  $x_0$  und  $x_0 + d$  und die gesamte Verbindungsstrecke in  $G$  liegen, dann existiert  $\xi \in (0, 1)$ , sodass gilt:

$$\text{im Fall } k = 0 : \quad f(x_0 + d) = f(x_0) + f'(x_0 + \xi d) d \quad (\text{Mittelwertsatz}),$$

$$\text{im Fall } k = 1 : \quad f(x_0 + d) = f(x_0) + f'(x_0) d + \frac{1}{2} d^\top f''(x_0 + \xi d) d.$$

# Kapitel 1 Unrestringierte Optimierung

Wir betrachten in diesem Kapitel das unrestringierte (freie) Optimierungsproblem (1.1) mit  $\Omega = \mathbb{R}^n$  und  $\mathcal{I} = \mathcal{E} = \emptyset$ , also

$$\text{Minimiere } f(x) \text{ über } x \in \mathbb{R}^n.$$

Wir beschränken uns auf das Auffinden *lokaler* Minimalstellen. Globale Minimierer zu bestimmen ist sehr schwierig und nur unter zusätzlichen Voraussetzungen an die Funktion  $f$  überhaupt algorithmisch möglich.

## § 3 OPTIMALITÄTSBEDINGUNGEN DER UNRESTRINGIERTEN OPTIMIERUNG

**Literatur:** Geiger, Kanzow, 1999, Kapitel 2

**Satz 3.1** (Notwendige Bedingung 1. Ordnung).

Es sei  $x^*$  ein lokaler Minimierer, und  $f$  sei an der Stelle  $x^*$  diffbar. Dann ist die Ableitung  $f'(x^*) = 0$ .

*Beweis.* Es sei  $d \in \mathbb{R}^n$  beliebig. Wir betrachten die Kurve  $\gamma: (-\delta, \delta) \rightarrow \mathbb{R}^n$ ,  $\gamma(t) := x^* + t d$ . Für hinreichend kleines  $\delta > 0$  verläuft diese Kurve innerhalb der Umgebung der lokalen Optimalität von  $x^*$ . Daraus folgt, dass  $f \circ \gamma$  bei  $t = 0$  einen lokalen Minimierer besitzt. **Quizfrage 3.1:** Ist das klar?

Aufgrund dieser lokalen Optimalität gilt für den Differenzenquotienten

$$\frac{f(\gamma(t)) - f(\gamma(0))}{t} = \frac{f(x^* + t d) - f(x^*)}{t} \begin{cases} \geq 0 & \text{für } t > 0, \\ \leq 0 & \text{für } t < 0. \end{cases}$$

Andererseits konvergiert aber der Differenzenquotient für  $t \rightarrow 0$  gegen den Grenzwert  $f'(x^*) d$ . Es muss daher notwendigerweise  $f'(x^*) d = 0$  gelten. Da  $d \in \mathbb{R}^n$  beliebig war, bedeutet das  $f'(x^*) = 0$ .  $\square$

Ein Punkt  $x \in \mathbb{R}^n$  mit der Eigenschaft  $f'(x) = 0$  heißt **stationärer Punkt** von  $f$ .

**Quizfrage 3.2:** Wie kann man sich die Eigenschaft „ $f'(x) = 0$ “ beispielsweise für eine Funktion  $f: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$  vorstellen?

**Beachte:** Die Bedingung „ $f'(x) = 0$ “ ist keinesfalls hinreichend dafür, dass  $x$  ein lokaler Minimierer von  $f$  ist. Mit Hilfe von Bedingungen 2. Ordnung kann man stationäre Punkte genauer unterscheiden.

**Satz 3.2** (Notwendige Bedingung 2. Ordnung).

Es sei  $x^*$  ein lokaler Minimierer, und  $f$  sei an der Stelle  $x^*$  zweimal diffbar. Dann ist die Hessematrix  $f''(x^*)$  positiv semidefinit.<sup>1</sup>

*Beweis.* Es sei  $d \in \mathbb{R}^n$  beliebig. Wie in Satz 3.1 definieren wir  $\gamma(t) := x^* + t d$  und betrachten wieder  $\varphi := f \circ \gamma$ , das bei  $t = 0$  einen lokalen Minimierer besitzt. Da  $\varphi$  an dieser Stelle zweimal diffbar ist, folgt aus Satz 2.1: Für alle  $\varepsilon > 0$  existiert  $\delta > 0$ , sodass

$$|\varphi(t) - \varphi(0) - \varphi'(0)t - \frac{1}{2}\varphi''(0)t^2| \leq \varepsilon t^2$$

für alle  $|t| < \delta$  ist. Aufgrund von Satz 3.1 ist  $\varphi'(0) = 0$ , und aus der lokalen Optimalität folgt  $\varphi(0) \leq \varphi(t)$  für alle  $|t|$  hinreichend klein. Wir erhalten also

$$-\frac{1}{2}\varphi''(0)t^2 \leq \varphi(t) - \varphi(0) - \frac{1}{2}\varphi''(0)t^2 \leq \varepsilon t^2$$

für alle  $|t|$  hinreichend klein, folglich

$$\frac{1}{2}\varphi''(0) \geq -\varepsilon.$$

Da  $\varepsilon > 0$  beliebig war, folgt  $\varphi''(0) = d^\top f''(x^*)d \geq 0$ . Da wiederum  $d \in \mathbb{R}^n$  beliebig war, ist  $f''(x^*)$  positiv semi-definit.  $\square$

**Quizfrage 3.3:** Wie kann man sich die Eigenschaft „ $f''(x)$  ist positiv semidefinit“ beispielsweise für eine Funktion  $f: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$  vorstellen?

**Beachte:** Auch die Bedingungen „ $f'(x) = 0$ “ und „ $f''(x)$  ist positiv semidefinit“ gemeinsam sind nicht hinreichend dafür, dass  $x$  ein lokaler Minimierer von  $f$  ist.

**Satz 3.3** (Hinreichende Bedingung 2. Ordnung).

Es sei  $f$  zweimal diffbar an der Stelle  $x^*$ , und es gelte

- (i)  $f'(x^*) = 0$  und
- (ii)  $f''(x^*)$  ist positiv definit mit kleinstem Eigenwert  $\mu > 0$ .

Dann gilt: Zu jedem  $\beta \in (0, \mu)$  gibt es eine Umgebung  $U_\beta(x^*)$  von  $x^*$  mit der Eigenschaft

$$f(x) \geq f(x^*) + \frac{\beta}{2}\|x - x^*\|^2 \quad \text{für alle } x \in U_\beta(x^*). \quad (3.1)$$

Insbesondere ist  $x^*$  ein strikter lokaler Minimierer von  $f$ .

*Beweis.* Wir nutzen dieses Mal Satz 2.1 direkt für die Funktion  $f$ . Für jedes  $\varepsilon > 0$  existiert  $\delta > 0$ , sodass gilt:

$$|f(x^* + d) - f(x^*) - f'(x^*)d - \frac{1}{2}d^\top f''(x^*)d| \leq \varepsilon \|d\|^2$$

---

<sup>1</sup>Aufgrund der Symmetrie von  $f''(x^*)$  ist dies äquivalent dazu, dass alle Eigenwerte von  $f''(x^*)$  nicht-negativ sind.

für alle  $\|d\| < \delta$ . Nach Voraussetzung ist  $f'(x^*) = 0$ . Es folgt also

$$-\varepsilon \|d\|^2 \leq f(x^* + d) - f(x^*) - \frac{1}{2} d^\top f''(x^*) d$$

für alle  $\|d\| < \delta$ . Das bedeutet aber

$$f(x^* + d) \geq f(x^*) + \frac{1}{2} d^\top f''(x^*) d - \varepsilon \|d\|^2$$

für alle  $\|d\| < \delta$ .

Aus der linearen Algebra ist bekannt, dass die Werte des Rayleigh-Quotienten für die symmetrische Matrix  $f''(x^*)$  nach oben bzw. unten durch den größten bzw. den kleinsten Eigenwert beschränkt sind, dass also insbesondere gilt:

$$d^\top f''(x^*) d \geq \mu \|d\|^2 \quad \text{für alle } d \in \mathbb{R}^n.$$

Nun können wir die Behauptung zeigen: Zu  $\beta \in (0, \mu)$  wähle  $\varepsilon := (\mu - \beta)/2 > 0$  und ein dazugehöriges  $\delta > 0$ . Dann gilt also

$$\begin{aligned} f(x^* + d) &\geq f(x^*) + \frac{1}{2} d^\top f''(x^*) d - \varepsilon \|d\|^2 \\ &\geq f(x^*) + \frac{\mu}{2} \|d\|^2 - \varepsilon \|d\|^2 \\ &= f(x^*) + \frac{\beta}{2} \|d\|^2 \end{aligned}$$

für alle  $\|d\| < \delta$ . □

Zu der Eigenschaft (3.1) sagt man auch, die Funktion  $f$  habe mindestens **quadratisches Wachstum** in der Nähe von  $x^*$  bzw.  $f$  verhalte sich lokal **stark konvex** (siehe Kapitel 3).

**Quizfrage 3.4:** Wie kann man sich die Eigenschaft (3.1) beispielsweise für eine Funktion  $f: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$  vorstellen?

**Quizfrage 3.5:** Welche Eigenschaft der Funktion  $f$  beschreibt der kleinste Eigenwert  $\mu$  von  $f''(x^*)$ ?

Erfüllt  $f$  an einem stationären Punkt  $x^*$  die notwendige, aber nicht die hinreichende Bedingung 2. Ordnung, so ist keine Aussage über das Vorliegen eines lokalen Minimierers möglich. Es gibt also eine „unentscheidbare Lücke“ zwischen diesen Bedingungen.

Ende der Woche 1

## § 4 DAS GRADIENTENVERFAHREN

**Literatur:** Geiger, Kanzow, 1999, Kapitel 8

Das Gradientenverfahren ist der einfachste Vertreter in der Klasse der Abstiegsverfahren. Bei Abstiegsverfahren entsteht eine Folge von Iterierten  $x^{(k)} \subseteq \mathbb{R}^n$ . In jeder Iteration werden folgende Schritte ausgeführt:

- (1) Bestimmen einer Abstiegsrichtung  $d^{(k)}$  für  $f$  am aktuellen Punkt  $x^{(k)}$ .
- (2) Bestimmen einer Schrittänge  $t^{(k)} > 0$ , sodass  $f(x^{(k)} + t^{(k)} d^{(k)}) \leq f(x^{(k)})$  gilt.<sup>2</sup>
- (3) Aufdatieren durch  $x^{(k+1)} := x^{(k)} + t^{(k)} d^{(k)}$ .
- (4) Erhöhen des Iterationszählers  $k \rightsquigarrow k + 1$ .

In diesem § 4 sei  $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  mindestens einmal stetig partiell diffbar, kurz:  $C^1$ . Es gilt also für die (beidseitige) Richtungsableitung

$$\frac{\partial}{\partial d} f(x) := \lim_{t \rightarrow 0} \frac{f(x + t d) - f(x)}{t} = f'(x) d.$$

Außerdem dürfen wir den Satz von Taylor 2.2 in Form des Mittelwertsatzes (also für  $k = 0$ ) verwenden.

#### Definition 4.1 (Abstiegsrichtung).

Ein Vektor  $d \in \mathbb{R}^n$  heißt **Abstiegsrichtung** (englisch: descent direction) für  $f$  im Punkt  $x \in \mathbb{R}^n$ , wenn gilt:

$$f'(x) d < 0. \quad (4.1)$$

Der negative Gradient  $-\nabla f(x)$  ist die **Richtung des steilsten Abstiegs** (englisch: *direction of steepest descent*) von  $f$  im Punkt  $x$ . Er ist immer eine Abstiegsrichtung, außer in einem stationären Punkt. Wir können (4.1) auch schreiben als  $\nabla f(x)^\top d < 0$ . Anschaulich bedeutet dies, dass der Winkel zwischen der Richtung  $d$  und dem negativen Gradienten  $-\nabla f(x)$  kleiner als  $90^\circ$  ist, siehe Abbildung 4.1.

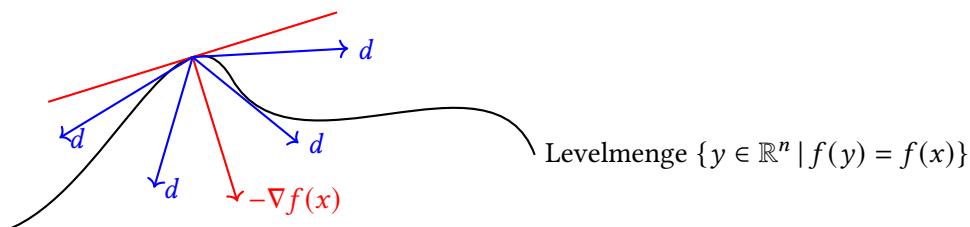


Abbildung 4.1: Verschiedene Abstiegsrichtungen  $d$  für  $f$  im Punkt  $x$ .

**Quizfrage 4.1:** Mit welchem Begriff könnte man die Menge aller Abstiegsrichtungen einer Funktion  $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  in einem Punkt  $x$  geometrisch beschreiben?

<sup>2</sup>Der neue Funktionswert ist also geringer oder wenigstens nicht größer als der aktuelle, daher der Name „Abstiegsverfahren“.

## § 4.1 VORSTELLUNG DES VERFAHRENS

Beim (einfachen) **Gradientenverfahren** wird als Abstiegsrichtung  $d^{(k)} = -\nabla f(x^{(k)})$  gewählt. Es heißt deshalb auch das **Verfahren des steilsten Abstiegs** (englisch: *steepest descent method*). Es orientiert sich nur an den Funktionswerten von  $f$ , nicht an den Optimalitätsbedingungen aus § 3.

Bei der Wahl der Schrittweiten  $t^{(k)}$  verwendet das Verfahren einen Algorithmus zur **Liniensuche** (englisch: *line search*), bei der  $f$  entlang einer Richtung  $d$  nach einer geeigneten Schrittweite „durchsucht“ wird. Wie das folgende Beispiel zeigt, reicht es dabei nicht aus, dass  $f(x^{(k)})$  von Iteration zu Iteration streng monoton fällt, um Konvergenz gegen einen Minimierer oder wenigstens gegen einen stationären Punkt zu erzielen:

**Beispiel 4.2.** Es seien  $f(x) = x^2$ ,  $x^{(0)} = 1$  und  $d^{(k)} = -1$  sowie als Schrittweiten  $t^{(k)} = (\frac{1}{2})^{k+2}$  gewählt. Dann ist die Folge der Iterierten gegeben durch

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + t^{(k)} (-1) = x^{(0)} - \sum_{i=0}^k (\frac{1}{2})^{i+2} = \frac{1}{2} + (\frac{1}{2})^{k+2}.$$

Daraus folgt  $x^{(k+1)} < x^{(k)}$  und  $f(x^{(k+1)}) < f(x^{(k)})$ . Die Folge der Funktionswerte fällt also streng monoton. Jedoch konvergiert  $x^{(k)} \searrow x^* = 1/2$ , also gegen einen „uninteressanten“ Punkt und nicht gegen den strikten globalen Minimierer von  $f$  bei  $x = 0$ .

**Quizfrage 4.2:** Was ist das „Problem“ mit den in Beispiel 4.2 gewählten Schrittweiten?

Angesichts des Beispiels 4.2 sollten wir uns also fragen, welche Bedingung man an die Schrittweiten stellen sollte, um Konvergenz des Gradientenverfahrens gegen einen stationären Punkt ( $f'(x) = 0$ ) zu erhalten.

Die **exakte Liniensuche** (englisch: *exact line search*)

$$\text{„Bestimme } t^{(k)} := t_{\min} \text{ so, dass } f(x^{(k)} + t_{\min} d^{(k)}) = \min_{t \geq 0} f(x^{(k)} + t d^{(k)}) \text{ gilt“} \quad (4.2)$$

ist außer in Sonderfällen für besonders einfache Zielfunktionen  $f$  nicht praktikabel.

**Quizfrage 4.3:** Welche Schwierigkeiten könnten sich beim Versuch, die Schrittweite nach (4.2) zu wählen, ergeben?

Daher greift man zu einer besser realisierbaren Schrittweitenstrategie: Zu einer gegebenen Abstiegsrichtung  $d$  für die Funktion  $f$  im Punkt  $x$  bestimmt man eine Schrittweite  $t > 0$ , sodass die **Armijo-Bedingung**<sup>3</sup> erfüllt ist:

$$f(x + t d) \leq f(x) + \sigma t f'(x) d. \quad (4.3)$$

Dabei ist  $\sigma \in (0, 1)$  der **Armijo-Parameter**. **Quizfrage 4.4:** Welche anschauliche Bedeutung hat der Parameter  $\sigma$ ?

---

<sup>3</sup>Armijo, 1966

Zur Veranschaulichung der Bedingung (4.3) führen wir die **Liniensuchfunktion**

$$\varphi(t) := f(x + t d) \quad (4.4)$$

zur **Suchrichtung**  $d$  ein. Man nennt  $\varphi$  auch den **Schnitt** durch die Funktion  $f$  am Punkt  $x$  in Richtung  $d$ . Die Funktion  $\varphi$  erbt die Differenzierbarkeiteigenschaften von  $f$ , ist also auf  $\mathbb{R}$  stetig diffbar, und es gilt

$$\varphi'(t) = f'(x + t d) d.$$

Also lautet die Armijo-Bedingung (4.3) alternativ

$$\varphi(t) \leq \varphi(0) + \sigma t \varphi'(0). \quad (4.5)$$

Diese Bedingung wird in Abbildung 4.2 illustriert. **Beachte:** Beim Gradientenverfahren gilt  $\varphi'(0) = f'(x) d = -\|\nabla f(x)\|^2$ .

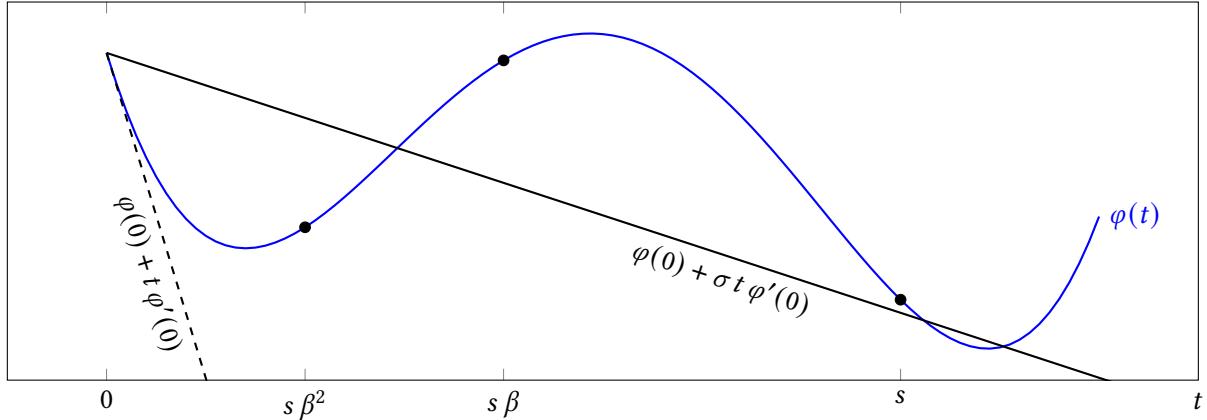


Abbildung 4.2: Darstellung der Armijo-Bedingung (4.5) und einigen Test-Schrittweiten beim Backtracking. Der Armijo-Parameter ist hier als  $\sigma = 0.1$  und der Backtracking-Parameter als  $\beta = 0.5$  gewählt.

In der praktischen Durchführung wird eine Schrittweite, die (4.5) erfüllt, über eine **Backtracking-Strategie** gefunden: Man beginnt mit einer Startschrittweite  $s > 0$  und testet nacheinander die (kleiner werdenden) Schrittweiten  $t = s, s \beta, s \beta^2$  etc., bis zum ersten Mal (4.5) erfüllt ist. Dabei ist  $\beta \in (0, 1)$  der **Backtracking-Parameter**.

**Satz 4.3** (Wohldefiniertheit der Armijo-Backtracking-Strategie).

Es sei  $\sigma \in (0, 1)$  beliebig. Zu jedem Paar  $(x, d) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$  mit  $f'(x) d < 0$  existiert ein  $T > 0$ , sodass die Armijo-Bedingung (4.5) für alle  $t \in [0, T]$  gilt.

**Beachte:** Aus diesem Satz folgt, dass die Armijo-Backtracking-Strategie wohldefiniert ist, da ein Exponent  $\ell_0 \in \mathbb{N}_0$  existiert, sodass Schrittweiten der Form  $t = s \beta^\ell$  für  $\ell \geq \ell_0$  immer in  $[0, T]$  liegen.

*Beweis.* Angenommen, die Aussage sei falsch, dann existiert eine Folge  $t^{(k)} \searrow 0$  mit der Eigenschaft

$$f(x + t^{(k)} d) > f(x) + \sigma t^{(k)} f'(x) d$$

für alle  $k \in \mathbb{N}$ , also auch

$$\frac{f(x + t^{(k)} d) - f(x)}{t^{(k)}} > \sigma f'(x) d.$$

Im Grenzübergang  $k \rightarrow \infty$  folgt

$$f'(x) d \geq \sigma f'(x) d,$$

was im Widerspruch zur Voraussetzung  $f'(x) d < 0$  steht.  $\square$

Wir geben nun das Gradientenverfahren mit Armijo-Liniensuche an:

**Algorithmus 4.4** (Gradientenverfahren mit Armijo-Schrittweiteinsuche).

**Eingabe:** Startschätzung  $x^{(0)} \in \mathbb{R}^n$

**Eingabe:** Armijo-Parameter  $\sigma \in (0, 1)$ , Backtracking-Parameter  $\beta \in (0, 1)$ , Startschrittweite  $s > 0$

1: Setze  $k := 0$

2: **while** Abbruchkriterium nicht erfüllt **do**

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

4:     Bestimme eine Schrittweite  $t^{(k)} > 0$  mit der Armijo-Backtracking-Strategie zur Startschrittweite  $s$ , sodass (4.3) erfüllt ist, also:

$$f(x^{(k)} + t^{(k)} d^{(k)}) \leq f(x^{(k)}) + \sigma t^{(k)} f'(x^{(k)}) d^{(k)}$$

5:     Setze  $x^{(k+1)} := x^{(k)} + t^{(k)} d^{(k)}$

6:     Setze  $k := k + 1$

7: **end while**

Zur Durchführung des Gradientenverfahrens mit Armijo-Schrittweiteinsuche werden folgende problemspezifische Routinen benötigt:

(1) Routine zur Auswertung der Zielfunktion  $f(x)$ .

(2) Routine zur Auswertung der Ableitung  $f'(x)$  bzw. zur Auswertung von Richtungsableitungen  $f'(x) d$ .

**Quizfrage 4.5:** Angenommen, für die Funktion  $f$  liegt (neben der Routine für die Auswertung der Funktionswerte) eine Routine vor, die zu einer gegebenen Stelle  $x$  und einer gegebenen Richtung  $d$  die Richtungsableitung  $f'(x) d$  bestimmt. Wieso reicht das für die Durchführung von Algorithmus 4.4 aus? Wie bestimmt man insbesondere den negativen Gradienten in Zeile 3?

Für den Beweis eines Konvergenzsatzes für das Gradientenverfahren benötigen wir folgendes Resultat:

**Lemma 4.5** (Konvergenz des Differenzenquotienten bei variabler Stelle und Richtung).

Es seien  $x, d \in \mathbb{R}^n$ ,  $x^{(k)}, d^{(k)} \subseteq \mathbb{R}^n$  mit  $x^{(k)} \rightarrow x$  und  $d^{(k)} \rightarrow d$  sowie  $t^{(k)} \searrow 0$ . Dann gilt

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{f(\textcolor{red}{x^{(k)}} + t^{(k)} \textcolor{red}{d^{(k)}}) - f(\textcolor{red}{x^{(k)}})}{t^{(k)}} = f'(x) d.$$

*Beweis.* Wegen des [Mittelwertsatzes 2.2](#) existiert zu jedem  $k \in \mathbb{N}$  ein  $\xi^{(k)} \in (0, 1)$  mit

$$\begin{aligned} f(x^{(k)} + t^{(k)} d^{(k)}) - f(x^{(k)}) &= t^{(k)} f'(x^{(k)} + \xi^{(k)} t^{(k)} d^{(k)}) d^{(k)} \\ \Rightarrow \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{f(x^{(k)} + t^{(k)} d^{(k)}) - f(x^{(k)})}{t^{(k)}} &= \lim_{k \rightarrow \infty} \underbrace{f'(x^{(k)} + \xi^{(k)} t^{(k)} d^{(k)})}_{\rightarrow x} d^{(k)} = f'(x) d. \end{aligned}$$

□

Wir analysieren jetzt [Algorithmus 4.4](#) ohne Abbruchbedingung, sodass eine unendliche Folge  $x^{(k)}$  entsteht. Insbesondere nehmen wir an, dass kein Punkt  $x^{(k)}$  stationär ist.

**Satz 4.6** (Ein globaler Konvergenzsatz für das Gradientenverfahren).

Jeder Häufungspunkt  $x^*$  einer durch [Algorithmus 4.4](#) erzeugten Folge  $x^{(k)}$  ist ein stationärer Punkt von  $f$ , erfüllt also  $f'(x^*) = 0$ .

*Beweis.* Es sei  $x^* \in \mathbb{R}^n$  ein Häufungspunkt von  $x^{(k)}$ . Es gibt also eine Teilfolge  $x^{(k^{(\ell)})}$  mit  $x^{(k^{(\ell)})} \rightarrow x^*$ , und wegen der Stetigkeit von  $f$  gilt  $f(x^{(k^{(\ell)})}) \rightarrow f(x^*)$ . Da  $f(x^{(k)})$  aber monoton fällt, konvergiert die gesamte Folge  $f(x^{(k)}) \rightarrow f(x^*)$ . Somit gilt also auch  $f(x^{(k+1)}) - f(x^{(k)}) \rightarrow 0$ .

Angenommen, es sei  $f'(x^*) \neq 0$ . Aus [Zeilen 3 bis 5](#) des [Algorithmus 4.4](#) folgt

$$\underbrace{f(x^{(k+1)}) - f(x^{(k)})}_{\rightarrow 0} \leq \sigma t^{(k)} f'(x^{(k)}) d^{(k)} = -\sigma t^{(k)} \|\nabla f(x^{(k)})\|^2 \leq 0,$$

also

$$t^{(k)} \|\nabla f(x^{(k)})\|^2 \rightarrow 0.$$

Auf der Teilfolge gilt aber auch  $\nabla f(x^{(k^{(\ell)})}) \rightarrow \nabla f(x^*) \neq 0$ , also muss  $t^{(k^{(\ell)})} \rightarrow 0$  gelten.

Nötigenfalls durch Einschränkung auf eine weitere Teilfolge (sodass  $t^{(k^{(\ell)})} \leq \beta s$  gilt, was wegen  $t^{(k^{(\ell)})} \rightarrow 0$  immer geht) können wir davon ausgehen, dass in der Armijo-Backtracking-Suche die Schrittweite  $\beta^{-1} t^{(k^{(\ell)})}$  probiert, aber nicht akzeptiert wurde:

$$\begin{aligned} f(x^{(k^{(\ell)})} + \beta^{-1} t^{(k^{(\ell)})} d^{(k^{(\ell)})}) &> f(x^{(k^{(\ell)})}) + \sigma \beta^{-1} t^{(k^{(\ell)})} \nabla f(x^{(k^{(\ell)})})^\top d^{(k^{(\ell)})} \\ \Rightarrow \frac{f(x^{(k^{(\ell)})} + \beta^{-1} t^{(k^{(\ell)})} d^{(k^{(\ell)})}) - f(x^{(k^{(\ell)})})}{\beta^{-1} t^{(k^{(\ell)})}} &> \sigma \nabla f(x^{(k^{(\ell)})})^\top d^{(k^{(\ell)})} = -\sigma \|\nabla f(x^{(k^{(\ell)})})\|^2. \end{aligned}$$

Die Grenzübergänge  $x^{(k^{(\ell)})} \rightarrow x^*$ ,  $d^{(k^{(\ell)})} = -\nabla f(x^{(k^{(\ell)})}) \rightarrow -\nabla f(x^*)$  und  $t^{(k^{(\ell)})} \rightarrow 0$  für  $\ell \rightarrow \infty$  ergeben mit [Lemma 4.5](#):

$$-\|\nabla f(x^*)\|^2 \geq -\sigma \|\nabla f(x^*)\|^2,$$

was wegen  $\sigma \in (0, 1)$  zum Widerspruch führt. Es gilt also  $\nabla f(x^*) = 0$  und damit  $f'(x^*) = 0$ . □

**Bemerkung 4.7** (Zur praktischen Implementierung des Gradientenverfahrens).

Typische Abbruchkriterien beim Gradientenverfahren<sup>4</sup> sind:

$$(i) \quad f(x^{(k-1)}) - f(x^{(k)}) \leq ATOL_f + RTOL_f |f(x^{(k-1)})|,$$

$$(ii) \quad \|x^{(k-1)} - x^{(k)}\| \leq ATOL_x + RTOL_x \|x^{(k-1)}\|.$$

Gefordert werden beide Bedingungen gleichzeitig. Dabei wird oft  $RTOL_f = RTOL_x^2$  gewählt. Als „Notbremsen“ dienen zusätzlich die Abfragen

$$(iii) \quad \|\nabla f(x^{(k)})\| \leq ATOL_{\nabla f(x)} + RTOL_{\nabla f(x)} \|\nabla f(x^{(0)})\|,$$

$$(iv) \quad k \leq k_{\max}$$

Als Parameter der Armijo-Liniensuche wählt man z. B.  $\sigma = 10^{-2}$  und  $\beta = 1/2$ .

**Quizfrage 4.6:** Welche Bedeutung haben die Bedingungen (i) bis (iii)?

**Quizfrage 4.7:** Wie setzt man ATOL und RTOL, wenn man in Bedingungen (i) bis (iii) entweder nur eine absolute oder nur eine relative Abbruchbedingung verwenden möchte?

**Bemerkung 4.8** (Alternative Startschriftweite bei der Armijo-Liniensuche).

In der praktischen Durchführung verwendet man beim Gradientenverfahren oft eine iterationsabhängige Startschriftweite  $s^{(k)} > 0$ . Man geht davon aus, dass der durch  $s^{(k)}$  erreichbare Abstieg im aktuellen Schritt in erster Näherung gleich groß sein wird wie der im letzten Schritt realisierte Abstieg:

$$\begin{aligned} s^{(k)} f'(x^{(k)}) d^{(k)} &= f(x^{(k)}) - f(x^{(k-1)}) \\ \Rightarrow s^{(k)} &= \frac{f(x^{(k)}) - f(x^{(k-1)})}{f'(x^{(k)}) d^{(k)}} > 0. \end{aligned} \tag{4.6}$$

Speziell beim Gradientenverfahren ergibt sich dann also

$$s^{(k)} = -\frac{f(x^{(k)}) - f(x^{(k-1)})}{\|\nabla f(x^{(k)})\|^2} \tag{4.7}$$

als Vorschlag für die Startschriftweite ab Iteration  $k = 1$ . Ersetzt man auch die rechte Seite in (4.6) durch die lineare Näherung  $f(x^{(k)}) - f(x^{(k-1)}) \approx t^{(k-1)} f'(x^{(k-1)}) d^{(k-1)}$ , so erhalten wir an Stelle von (4.7) den Vorschlag

$$s^{(k)} = t^{(k-1)} \frac{\|\nabla f(x^{(k-1)})\|^2}{\|\nabla f(x^{(k)})\|^2} \tag{4.8}$$

für die Startschriftweite.

Auch unter Verwendung dieser Startschriftweiten kann man Satz 4.6 beweisen.

<sup>4</sup>Mehr dazu findet man etwa in Gill, Murray, Wright, 1981. ATOL steht für „absolute Toleranz“ und RTOL für „relative Toleranz“.

## § 4.2 DAS GRADIENTENVERFAHREN IN EINEM ALTERNATIVEN SKALARPRODUKT

Bei der Herleitung des Gradientenverfahrens/Verfahrens des steilsten Abstiegs haben wir stillschweigend die Eigenschaft benutzt, dass der Gradient

$$\nabla f(x) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f(x)}{\partial x_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial f(x)}{\partial x_n} \end{pmatrix}$$

die Richtung des steilsten Anstiegs und  $-\nabla f(x)$  die des steilsten Abstiegs der Funktion  $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  im Punkt  $x$  darstellt, die wir als Suchrichtung verwendet haben. Dies ist aber nur dann richtig, wenn der Raum der Optimierungsvariablen  $\mathbb{R}^n$  mit dem Euklidischen Skalarprodukt  $(x, y) := x^\top y$  ausgestattet ist.

Wir wollen untersuchen, wie sich das Verfahren ändert, wenn man als Skalarprodukt

$$(x, y)_M := x^\top M y$$

mit einer symmetrischen, positiv definiten (s. p. d.) Matrix  $M$  wählt. Dementsprechend ändert sich auch die Norm zur Längen- und Abstandsmessung in

$$\|x\|_M := (x^\top M x)^{1/2}.$$

Per Definition maximiert die Richtung des steilsten Anstiegs den Ausdruck  $f'(x) d$  über alle Vektoren  $d \in \mathbb{R}^n$  konstanter Länge:

$$\begin{aligned} &\text{Maximiere } f'(x) d \quad \text{über } d \in \mathbb{R}^n \\ &\text{unter } \|d\|_M = 1. \end{aligned} \tag{4.9}$$

Die Normierung auf die Länge 1 ist willkürlich gewählt. Alternativ könnten wir auch die äquivalente Aufgabe

$$\begin{aligned} &\text{Maximiere } f'(x) d \quad \text{über } d \in \mathbb{R}^n \\ &\text{unter } \|d\|_M \leq 1 \end{aligned}$$

betrachten. **Quizfrage 4.8:** Warum ist diese Aufgabe gleichwertig?

Aufgabe (4.9) ist eine restriktive Optimierungsaufgabe, die wir jedoch ohne Kenntnisse der Theorie lösen können: Wir schreiben die Zielfunktion als  $M$ -Skalarprodukt um:<sup>5</sup>

$$f'(x) d = \nabla f(x)^\top d = \nabla f(x)^\top M^{-1} M d = (M^{-1} \nabla f(x))^\top M d,$$

wobei die Symmetrie  $M = M^\top$  benutzt wurde. Die Cauchy-Schwarzsche Ungleichung zeigt, dass dieser Ausdruck genau dann maximal wird, wenn  $d$  parallel zu  $M^{-1} \nabla f(x)$  liegt. Er wird dagegen minimal, wenn  $d$  antiparallel zu  $M^{-1} \nabla f(x)$  liegt. Wir fassen zusammen:

**Lemma 4.9** (Richtung des steilsten Abstiegs im  $M$ -Skalarprodukt).

Falls  $f'(x) \neq 0$  gilt, ist die dann eindeutige Lösung  $d^*$  von (4.9) gegeben durch

$$d^* = M^{-1} \nabla f(x) =: \nabla_M f(x). \tag{4.10}$$

(Die ohnehin willkürliche Normierung  $\|d\|_M = 1$  in (4.9) wurde dabei fallengelassen.)

<sup>5</sup>Das heißt, wir bestimmen hier den Riesz-Repräsentanten von  $f'(x)$ .

Daher ist  $d^* = -\nabla_M f(x)$  die **Richtung des steilsten Abstiegs bzgl. des  $M$ -Skalarprodukts**. Wir berechnen diese durch Lösung des linearen Gleichungssystems

$$M d^* = -\nabla f(x). \quad (4.11)$$

Bei Verwendung des Euklidischen Skalarprodukts ( $M = \text{Id}$ ) schreiben wir weiter  $\nabla f(x)$  statt  $\nabla_{\text{Id}} f(x)$ . Manchmal wird die Verwendung von  $\nabla_M f(x)$  an Stelle der Euklidischen Gradientenrichtung  $\nabla f(x)$  als **Vorkonditionierung** (englisch: *preconditioning*) bezeichnet.

Nach Konstruktion ist für jede beliebige s. p. d. Matrix  $M$  die Lösung  $d^*$  von (4.11) eine Abstiegsrichtung für  $f$  im Punkt  $x$ . Dies können wir auch nochmals durch direkte Rechnung bestätigen, vgl. (4.1):

$$f'(x) d^* = -\nabla f(x)^T M^{-1} \nabla f(x) = -\|\nabla f(x)\|_{M^{-1}}^2 = -\|\nabla_M f(x)\|_M^2 < 0, \quad (4.12)$$

falls nicht  $x$  bereits ein stationärer Punkt ist.

Algorithmisch ergeben sich durch Verwendung des  $M$ -Skalarprodukts an Stelle des Euklidischen Skalarprodukts folgende Änderungen: In [Algorithmus 4.4](#) lautet Zeile 3 nun  $d^{(k)} := -\nabla_M f(x^{(k)})$ , er wird durch Lösung des linearen Gleichungssystems

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

ausgeführt. Die übrigen Schritte, insbesondere die Armijo-Bedingung

$$f(x^{(k)} + t^{(k)} d^{(k)}) \leq f(x^{(k)}) + \sigma t^{(k)} f'(x^{(k)}) d^{(k)}$$

bleiben unverändert. Der globale [Konvergenz-Satz 4.6](#) gilt weiter. Als **Abbruchbedingung (ii)** in [Bemerkung 4.7](#) dient nun  $\|x^{(k)} - x^{(k-1)}\|_M \leq \text{ATOL}_x + \text{RTOL}_x \|x^{(k-1)}\|_M$  und als **Bedingung (iii)**  $\|\nabla_M f(x^{(k)})\|_M \leq \text{ATOL}_{\nabla f(x)} + \text{RTOL}_{\nabla_M f(x)} \|\nabla f(x^{(0)})\|_M$ .

**Quizfrage 4.9:** Warum ändert sich **Abbruchbedingung (i)** nicht?

Als Startschriftweite analog (4.7) bzw. (4.8) wählt man

$$s^{(k)} = -\frac{f(x^{(k)}) - f(x^{(k-1)})}{\|\nabla_M f(x^{(k)})\|_M^2} \quad \text{bzw.} \quad s^{(k)} = t^{(k-1)} \frac{\|\nabla_M f(x^{(k-1)})\|_M^2}{\|\nabla_M f(x^{(k)})\|_M^2}. \quad (4.13)$$

Zur Unterscheidung vom Euklidischen Fall heißt das Verfahren dann auch das **vorkonditionierte Gradientenverfahren** (englisch: *preconditioned steepest descent method*). Wir geben es der Vollständigkeit halber nochmal an:

**Algorithmus 4.10** (Vorkonditioniertes Gradientenverfahren mit Armijo-Schrittweitensuche).

**Eingabe:** Startschätzung  $x^{(0)} \in \mathbb{R}^n$

**Eingabe:** Armijo-Parameter  $\sigma \in (0, 1)$ , Backtracking-Parameter  $\beta \in (0, 1)$ , Startschriftweite  $s > 0$

**Eingabe:** s. p. d. Matrix  $M \in \mathbb{R}^{n \times n}$

1: Setze  $k := 0$

2: **while** Abbruchkriterium nicht erfüllt **do**

3: Bestimme  $d^{(k)}$  durch Lösung des linearen Gleichungssystems  $M d^{(k)} = -\nabla f(x^{(k)})$

- 4: Bestimme eine Schrittweite  $t^{(k)} > 0$  mit der Armijo-Backtracking-Strategie zur Startschrittweite  $s$ , sodass (4.3) erfüllt ist, also:

$$f(x^{(k)} + t^{(k)} d^{(k)}) \leq f(x^{(k)}) + \sigma t^{(k)} f'(x^{(k)}) d^{(k)}$$

5: Setze  $x^{(k+1)} := x^{(k)} + t^{(k)} d^{(k)}$

6: Setze  $k := k + 1$

7: **end while**

**Beachte:** Das Verfahren verallgemeinert das unvorkonditionierte Gradientenverfahren (Algorithmus 4.4), das sich im Fall  $M = \text{Id}$  ergibt.

### § 4.3 KONVERGENZ BEI QUADRATISCHER ZIELFUNKTION UND EXAKTER LINIENSUCHE

**Literatur:** Geiger, Kanzow, 1999, Kapitel 8.2

Um die Konvergenzgeschwindigkeit des (vorkonditionierten) Gradientenverfahrens zu untersuchen, wenden wir es auf die einfachsten sinnvollen unrestringierten Optimierungsaufgaben an. Bei diesen ist die Zielfunktion ein stark konvexes (siehe Kapitel 3) quadratisches Polynom:

$$f(x) = \frac{1}{2} x^T Q x + c^T x + \gamma \quad (4.14)$$

mit einer s. p. d. Matrix  $Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ,  $c \in \mathbb{R}^n$  und  $\gamma \in \mathbb{R}$ . Der globale Minimierer von  $f$  ist eindeutig und charakterisiert durch  $f'(x^*) = 0$ , also durch das lineare Gleichungssystem

$$Q x^* = -c \quad \text{oder äquivalent} \quad x^* = -Q^{-1}c, \quad (4.15)$$

denn dies ist die einzige Lösung der notwendigen Bedingungen (Satz 3.1), und die hinreichenden Bedingungen (Satz 3.3) sind dort erfüllt. Für ein beliebiges  $x \in \mathbb{R}^n$  bezeichnen wir die Größe

$$r := Q x + c = \nabla f(x)$$

auch als das zu  $x$  gehörige **Residuum**.

**Quizfrage 4.10:** An welcher Stelle geht die Symmetrie der Matrix  $Q$  ein?

Natürlich wird man das Gradientenverfahren (Algorithmus 4.11) zur Lösung von (4.14) bzw. des linearen Gleichungssystems (4.15) überhaupt nur dann in Erwägung ziehen, wenn

- (1) die direkte Lösung des linearen Gleichungssystems (4.15) mit dem Gauss-Verfahren etwa aufgrund der Dimension von  $Q$  zu aufwändig ist
- (2) oder wenn die Matrix  $Q$  nicht explizit vorliegt, sondern nur eine Funktion, die Matrix-Vektor-Produkte  $Q x$  auswertet.

**Beachte:** Das Verfahren kommt bereits mit Matrix-Vektor-Produkten  $Qx$  aus. Diese werden bei der Berechnung des Gradienten  $\nabla f(x) = Qx + c$  in Zeile 3 benötigt.

Im Fall der quadratischen Zielfunktion lässt sich sogar die exakte Schrittweite (4.2)

$$t_{\min} = \arg \min_{t \geq 0} f(x^{(k)} + t d^{(k)})$$

im  $k$ -ten Schritt berechnen:

$$t^{(k)} := t_{\min} = \frac{(d^{(k)})^\top M d^{(k)}}{(d^{(k)})^\top Q d^{(k)}}. \quad (4.16)$$

In diesem Abschnitt wählen wir statt der Armijo-Strategie in Algorithmus 4.4 stets die exakte Schrittweite (4.16). Der Vollständigkeit halber geben wir das Verfahren für diesen Spezialfall nochmals an:

**Algorithmus 4.11** (Vorkonditioniertes Gradientenverfahren bei quadratischer Zielfunktion).

**Eingabe:** Startschätzung  $x^{(0)} \in \mathbb{R}^n$

**Eingabe:** s. p. d. Matrix  $M \in \mathbb{R}^{n \times n}$

```

1: Setze  $k := 0$ 
2: Setze  $r^{(0)} := Qx^{(0)} + c$ 
3: Setze  $d^{(0)} := -M^{-1}r^{(0)}$ 
4: while Qbbruchkriterium nicht erfüllt do
5:   Setze  $q^{(k)} := Qd^{(k)}$ 
6:   Setze  $t^{(k)} := -\frac{(r^{(k)})^\top d^{(k)}}{(d^{(k)})^\top q^{(k)}}$ 
7:   Setze  $x^{(k+1)} := x^{(k)} + t^{(k)} d^{(k)}$ 
8:   Setze  $r^{(k+1)} := r^{(k)} + t^{(k)} q^{(k)}$ 
9:   Setze  $d^{(k+1)} := -M^{-1}r^{(k+1)}$ 
10:  Setze  $k := k + 1$ 
11: end while
12: return  $x^{(k)}$ 
```

Es stellt sich nun die Frage nach dem Konvergenzverhalten sowie nach der Rolle des Vorkonditionierers/Skalarprodukts  $M$ . Dazu geben wir zunächst ein Hilfsresultat an, das die Funktionswerte, den Fehler  $x - x^*$  und das Residuum in Beziehung setzt:

**Lemma 4.12.** Es gilt

$$f(x) - f(x^*) = \frac{1}{2} \|x - x^*\|_Q^2 = \frac{1}{2} \|r\|_{Q^{-1}}^2. \quad (4.17)$$

*Beweis.* Durch direkte Rechnung ergibt sich

$$\begin{aligned}
f(x) - f(x^*) &= \frac{1}{2} x^\top Q x + c^\top x + \gamma - \frac{1}{2} (x^*)^\top Q x^* - c^\top x^* - \gamma \\
&= \frac{1}{2} x^\top Q x - (x^*)^\top Q x - \frac{1}{2} (x^*)^\top Q x^* + (x^*)^\top Q x^* \quad \text{denn } c = -Q x^* \\
&= \frac{1}{2} x^\top Q x - (x^*)^\top Q x + \frac{1}{2} (x^*)^\top Q x^* \\
&= \frac{1}{2} \|x - x^*\|_Q^2 \\
&= \frac{1}{2} (x - x^*)^\top r = \frac{1}{2} r^\top Q^{-1} r \quad \text{denn } r = Q(x - x^*) \\
&= \frac{1}{2} \|r\|_{Q^{-1}}^2.
\end{aligned}$$

□

Für die Iterierten von Algorithmus 4.11 zur Minimierung von (4.14) gilt nun die folgende Rekursion:

$$\begin{aligned}
f(x^{(k+1)}) - f(x^*) &= \frac{1}{2} \|r^{(k+1)}\|_{Q^{-1}}^2 = \frac{1}{2} \|r^{(k)} + t^{(k)} Q d^{(k)}\|_{Q^{-1}}^2 \quad \text{wegen (4.17)} \\
&= \frac{1}{2} \|r^{(k)}\|_{Q^{-1}}^2 + t^{(k)} (r^{(k)})^\top d^{(k)} + \frac{1}{2} (t^{(k)})^2 (d^{(k)})^\top Q d^{(k)} \\
&= \frac{1}{2} \|r^{(k)}\|_{Q^{-1}}^2 - \frac{[(r^{(k)})^\top d^{(k)}]^2}{(d^{(k)})^\top Q d^{(k)}} + \frac{1}{2} \frac{[(r^{(k)})^\top d^{(k)}]^2}{(d^{(k)})^\top Q d^{(k)}} \quad \text{wegen } t^{(k)} = -\frac{(r^{(k)})^\top d^{(k)}}{(d^{(k)})^\top Q d^{(k)}} \\
&= \frac{1}{2} \|r^{(k)}\|_{Q^{-1}}^2 - \frac{1}{2} \frac{[(r^{(k)})^\top d^{(k)}]^2}{(d^{(k)})^\top Q d^{(k)}} \\
&= \left(1 - \frac{[(r^{(k)})^\top d^{(k)}]^2}{[(d^{(k)})^\top Q d^{(k)}][(r^{(k)})^\top Q^{-1} r^{(k)}]}\right) (f(x^{(k)}) - f(x^*)) \quad \text{wegen (4.17).}
\end{aligned}$$

Hier setzen wir nun den speziellen Zusammenhang  $r^{(k)} = -M d^{(k)}$  für die Iterierten aus Algorithmus 4.11 ein:

$$= \left(1 - \frac{[(d^{(k)})^\top M d^{(k)}]^2}{[(d^{(k)})^\top Q d^{(k)}][(d^{(k)})^\top M Q^{-1} M d^{(k)}]}\right) (f(x^{(k)}) - f(x^*)) \quad (4.18)$$

Für die weitere Abschätzung des Bruches benutzen wir die **Kantorovich-Ungleichung**, die wir zunächst für den Fall  $M = \text{Id}$  angeben:

**Lemma 4.13** (Kantorovich-Ungleichung). Es sei  $Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$  s. p. d. und  $\alpha := \lambda_{\min}(Q)$  sowie  $\beta := \lambda_{\max}(Q)$ . Dann gilt

$$1 \leq \frac{(x^\top Q x)(x^\top Q^{-1} x)}{\|x\|^4} \leq \frac{(\alpha + \beta)^2}{4 \alpha \beta} \leq \frac{\beta}{\alpha} \quad (4.19)$$

für alle  $x \in \mathbb{R}^n$ ,  $x \neq 0$ .

**Beachte:** Für den Rayleigh-Quotienten von  $Q$  gilt

$$\frac{x^T Q x}{\|x\|^2} \leq \lambda_{\max}(Q) = \beta \quad \text{und analog} \quad \frac{x^T Q^{-1} x}{\|x\|^2} \leq \lambda_{\max}(Q^{-1}) = 1/\alpha.$$

Die zugehörigen Eigenvektoren erfüllen die Ungleichungen jeweils mit Gleichheit. Die offensichtliche Abschätzung

$$\frac{(x^T Q x)(x^T Q^{-1} x)}{\|x\|^4} \leq \frac{\beta}{\alpha}$$

ist jedoch nicht scharf, da derselbe Vektor  $x$  i. A. nicht gleichzeitig Eigenvektor zum größten und zum kleinsten Eigenwert sein kann. Die Kantorovich-Ungleichung (4.19) verbessert diese Abschätzung.

*Beweis.* Aus der Cauchy-Schwarz-Ungleichung folgt<sup>6</sup>

$$\|x\|^2 = x^T x = x^T Q^{-1/2} Q^{1/2} x \leq \|Q^{-1/2} x\| \|Q^{1/2} x\|.$$

Durch Quadrieren erhalten wir

$$\|x\|^4 \leq \|Q^{-1/2} x\|^2 \|Q^{1/2} x\|^2 = (x^T Q x)(x^T Q^{-1} x)$$

und damit die untere Schranke in (4.19).

Es seien nun<sup>7</sup>  $\lambda_1, \dots, \lambda_n > 0$  die Eigenwerte von  $Q$  und  $v_1, \dots, v_n$  ein Satz zugehöriger orthonormaler Eigenvektoren. Es sei  $x \in \mathbb{R}^n$ ,  $x \neq 0$  beliebig. Wir stellen  $x$  als  $x = \sum_{i=1}^n \gamma_i v_i$  dar. O. B. d. A. sei  $\|x\|^2 = \sum_{i=1}^n \gamma_i^2 = 1$ . Einsetzen in die linke Seite von (4.19) ergibt:

$$\frac{(x^T Q x)(x^T Q^{-1} x)}{\|x\|^4} = \underbrace{\left[ \sum_{i=1}^n \lambda_i \gamma_i^2 \right]}_{=\mathbb{E}(T)} \underbrace{\left[ \sum_{i=1}^n \frac{1}{\lambda_i} \gamma_i^2 \right]}_{=\mathbb{E}(1/T)}.$$

Es ist jetzt aus Gründen der Übersichtlichkeit hilfreich, diese Faktoren als Erwartungswerte einer „Zufallsvariablen“  $T$  bzw.  $1/T$  zu interpretieren, wobei  $T$  die Werte  $\lambda_i \in [\alpha, \beta]$  mit „Wahrscheinlichkeit“  $\gamma_i^2$  annimmt. Für  $0 < \alpha \leq T \leq \beta$  gilt

$$0 \leq (\beta - T)(T - \alpha) = (\beta + \alpha - T)T - \alpha\beta,$$

also auch

$$\frac{1}{T} \leq \frac{\alpha + \beta - T}{\alpha\beta}$$

und daher (Erwartungswert nehmen)

$$\begin{aligned} \mathbb{E}(T)\mathbb{E}(1/T) &\leq \mathbb{E}(T) \frac{\alpha + \beta - \mathbb{E}(T)}{\alpha\beta} \\ &= \frac{(\alpha + \beta)^2}{4\alpha\beta} - \frac{1}{\alpha\beta} \left[ \mathbb{E}(T) - \frac{1}{2}(\alpha + \beta) \right]^2 \\ &\leq \frac{(\alpha + \beta)^2}{4\alpha\beta}. \end{aligned}$$

<sup>6</sup>Hierbei ist  $Q^{1/2}$  die Matrixwurzel der s. p. d. Matrix  $Q$ , also diejenige eindeutig bestimmte s. p. d. Matrix, deren Quadrat wieder  $Q$  ist. Weiter ist  $Q^{-1/2}$  die Inverse von  $Q^{1/2}$ .  $Q^{-1/2}$  ist gleichzeitig die Matrixwurzel der s. p. d. Matrix  $Q^{-1}$ .

<sup>7</sup>Wir folgen ab hier dem Beweis von Anderson, 1971, wie er in der Masterarbeit Alpargu, 1996, Abschnitt 1.2.2 wiedergegeben ist.

Damit ist die erste (wesentliche) obere Schranke in (4.19) bewiesen. Die noch fehlende Ungleichung folgt elementar aus  $0 < \alpha \leq \beta$ .  $\square$

Um die Kantorovich-Ungleichung zur Abschätzung von (4.18) verwenden zu können, benötigen wir noch eine Verallgemeinerung von der Euklidischen Norm  $\|x\|$  auf die  $M$ -Norm  $\|x\|_M$ . Im Folgenden seien  $\lambda_{\min}(Q; M) > 0$  und  $\lambda_{\max}(Q; M) > 0$  der kleinste und größte Eigenwert des **verallgemeinerten Eigenwertproblems** (englisch: *generalized eigenvalue problem*)

$$Qx = \lambda Mx \quad \text{oder äquivalent} \quad M^{-1}Qx = \lambda x$$

mit den s. p. d. Matrizen  $Q$  und  $M$ .

**Folgerung 4.14** (verallgemeinerte Kantorovich-Ungleichung). *Es seien  $Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$  und  $M \in \mathbb{R}^{n \times n}$  beide s. p. d. und  $\alpha := \lambda_{\min}(Q; M)$  sowie  $\beta := \lambda_{\max}(Q; M)$ . Dann gilt*

$$1 \leq \frac{(x^T Q x)(x^T M Q^{-1} M x)}{\|x\|_M^4} \leq \frac{(\alpha + \beta)^2}{4 \alpha \beta} \leq \frac{\beta}{\alpha} \quad (4.20)$$

für alle  $x \in \mathbb{R}^n$ ,  $x \neq 0$ .

*Beweis.* Für die Abschätzung nach unten verwenden wir

$$\|x\|_M^2 = x^T M x = x^T Q^{1/2} Q^{-1/2} M x \leq (x^T Q x)^{1/2} (x^T M Q^{-1} M x)^{1/2}$$

und daher  $\|x\|_M^4 \leq (x^T Q x)(x^T M Q^{-1} M x)$ .

Wir benutzen nun die Cholesky-Zerlegung<sup>8</sup>  $M = LL^T$  und setzen  $y := L^T x$ , also  $x = L^{-T} y$  ein:

$$\frac{(x^T Q x)(x^T M Q^{-1} M x)}{(x^T M x)^2} = \frac{(y^T L^{-1} Q L^{-T} y)(y^T L^T Q^{-1} L y)}{(y^T y)^2}.$$

Dies entspricht der Form in (4.19) mit der s. p. d. Matrix  $\tilde{Q} := L^{-1} Q L^{-T}$ . Deren Eigenpaare  $(\lambda, v)$  erfüllen

$$\tilde{Q}v = L^{-1}Q L^{-T}v = \lambda v, \quad v \neq 0,$$

also auch

$$Q L^{-T} v = \lambda L v.$$

Ersetzen wir noch  $v$  durch  $L^T w$ , so erhalten wir

$$Q w = \lambda M w. \quad (4.21)$$

Damit ist gezeigt, dass  $(\lambda, v)$  genau dann ein Eigenpaar von  $\tilde{Q} = L^{-1} Q L^{-T}$  ist, wenn  $(\lambda, w = L^{-T} v)$  ein Eigenpaar des verallgemeinerten Eigenwertproblems (4.21) ist. Insbesondere sind die Eigenwerte gleich. Es seien nun wie angenommen  $0 < \alpha \leq \beta$  die extremalen Eigenwerte von (4.21), dann sind dies auch die extremalen Eigenwerte von  $\tilde{Q}$ , und die Behauptung folgt aus der gewöhnlichen Kantorovich-Ungleichung (4.19).  $\square$

<sup>8</sup>Stattdessen könnten wir auch mit der Matrix-Wurzel  $M^{1/2}$  arbeiten.

Mit Hilfe der **verallgemeinerten (spektralen) Konditionszahl** (englisch: *generalized (spectral) condition number*) von  $Q$  bzgl.  $M$ ,

$$\kappa := \text{cond}_2(Q; M) = \frac{\lambda_{\max}(Q; M)}{\lambda_{\min}(Q; M)} \quad (4.22)$$

können wir die Abschätzung (4.20) auch in der äquivalenten Form

$$1 \leq \frac{(x^T Q x)(x^T M Q^{-1} M x)}{\|x\|_M^4} \leq \frac{(\kappa + 1)^2}{4\kappa} \leq \kappa \quad (4.23)$$

schreiben.

Mit Hilfe der verallgemeinerten Kantorovich-Ungleichung (4.20) folgt nun für die in (4.18) abzuschätzende Klammer:

$$1 - \frac{[(d^{(k)})^T M d^{(k)}]^2}{[(d^{(k)})^T Q d^{(k)}][(d^{(k)})^T M Q^{-1} M d^{(k)}]} \leq 1 - \frac{4\alpha\beta}{(\alpha+\beta)^2} = \frac{(\beta-\alpha)^2}{(\beta+\alpha)^2} = \left(\frac{\kappa-1}{\kappa+1}\right)^2.$$

Damit haben wir das klassische Konvergenzresultat des (vorkonditionierten) Gradientenverfahrens bewiesen:

**Satz 4.15** (Globaler Konvergenzsatz für quadratische Zielfunktionen).

Es seien  $Q$  und  $M$  s. p. d. Matrizen und  $\kappa$  die verallgemeinerte Konditionszahl von  $Q$  bzgl.  $M$ , siehe (4.22). Das Gradientenverfahren im  $M$ -Skalarprodukt (Algorithmus 4.10) mit exakter Schrittweite  $t_{\min}$ , angewendet zur Minimierung der Zielfunktion (4.14), konvergiert für jeden Startvektor  $x^{(0)} \in \mathbb{R}^n$  gegen den eindeutigen globalen Minimierer  $x^*$ , und es gelten die Abschätzungen

$$f(x^{(k+1)}) - f(x^*) \leq \left(\frac{\kappa-1}{\kappa+1}\right)^2 (f(x^{(k)}) - f(x^*)) \quad (4.24)$$

und deswegen auch

$$\|x^{(k+1)} - x^*\|_Q \leq \left(\frac{\kappa-1}{\kappa+1}\right) \|x^{(k)} - x^*\|_Q, \quad (4.25a)$$

$$\|x^{(k)} - x^*\|_Q \leq \left(\frac{\kappa-1}{\kappa+1}\right)^k \|x^{(0)} - x^*\|_Q. \quad (4.25b)$$

**Beachte:** Damit können wir das Gradientenverfahren auch als ein iteratives Verfahren zur Lösung linearer Gleichungssysteme mit s. p. d. Koeffizientenmatrizen verstehen.

**Bemerkung 4.16** (Zum Konvergenzverhaltens des Gradientenverfahrens).

- (i) Für große Konditionszahlen  $\kappa$  ist die Konvergenz sehr langsam. Es zeigt sich ein Zick-Zack-Verlauf bei den Iterierten.
- (ii) Im gegenteiligen Extremfall ist  $\kappa = 1$ , d. h.,  $M = Q$  (oder ein Vielfaches davon), konvergiert das Gradientenverfahren in einem Schritt:  $x^{(1)} = x^*$ . Allerdings bedeutet dies, dass bei der Berechnung der Suchrichtung  $d^{(0)} = \nabla_M f(x^{(0)})$  ein lineares Gleichungssystem mit  $M = Q$  als Koeffizientenmatrix zu lösen ist. Wenn man dies kann, so kann man natürlich auch direkt die Optimalitätsbedingungen  $Q x^* = -c$  lösen.

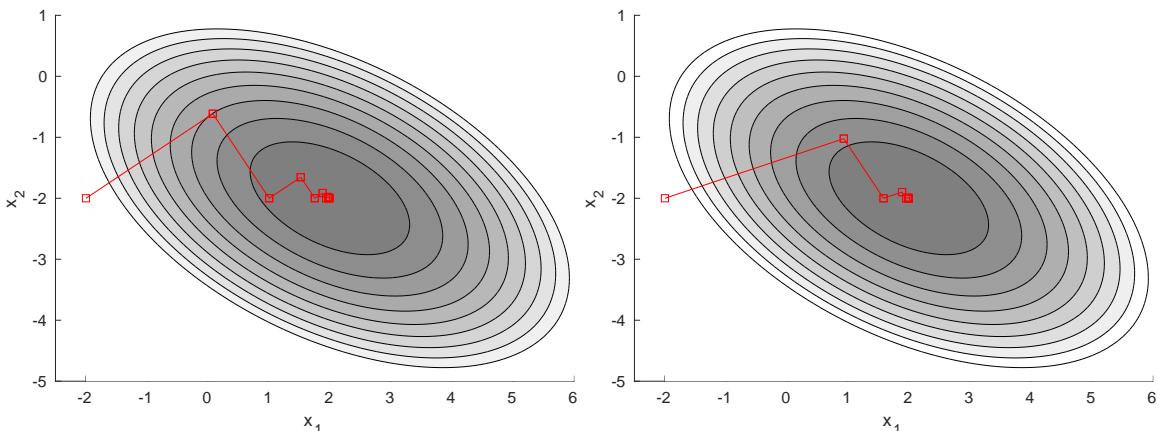


Abbildung 4.3: Illustration des Gradientenverfahrens (Algorithmus 4.10) mit Startpunkt  $x^{(0)} = (-2, -2)^T$  und exakter Schrittweite (4.16) für die Minimierung von (4.14) mit  $Q = \begin{pmatrix} 3 & 2 \\ 2 & 6 \end{pmatrix}$  und  $c = \begin{pmatrix} -2 \\ 8 \end{pmatrix}$ . Die exakte Lösung ist  $x^* = (2, -2)^T$ . Verlauf bei Verwendung des Skalarprodukts  $M = \text{Id}$  (links) und  $M = \text{diag}(Q)$  (rechts).

- (iii) Für allgemeine  $C^2$ -Funktionen  $f$  ist die Konvergenzgeschwindigkeit in der Nähe eines lokalen Optimums  $x^*$ , an dem  $f''(x^*)$  s. p. d. ist, wegen

$$f(x) = f(x^*) + \nabla f(x^*)^T(x - x^*) + \frac{1}{2}(x - x^*)^T f''(x^* + \xi(x - x^*))(x - x^*)$$

durch die verallgemeinerte Konditionszahl der Hessematrix  $f''(x^*)$  bzgl.  $M$  bestimmt.

- (iv) In der Praxis sucht man einen Kompromiss bei der Wahl von  $M$ , sodass die Konditionszahl  $\kappa$  möglichst klein, lineare Gleichungssysteme mit  $M$  als Koeffizientenmatrix aber noch leicht zu lösen sind. Manchmal ist bereits die Wahl

$$M = \text{diag}(f''(x^{(0)}))$$

konvergenzbeschleunigend.

Das in vielerlei Hinsicht beste Abstiegsverfahren zur Minimierung von (4.14) bzw. zur Lösung linearer Gleichungssysteme (4.15) mit s. p. d. Matrix  $Q$  ist das **Verfahren der konjugierten Gradienten (CG-Verfahren)**, siehe Vorlesung *Nichtlineare Optimierung* oder *Numerische Lineare Algebra*. Beim CG-Verfahren erhält man mit i. W. demselben Aufwand pro Iteration an Stelle von (4.25b) die Konvergenzabschätzung

$$\|x^{(k)} - x^*\|_Q \leq 2 \left( \frac{\sqrt{\kappa} - 1}{\sqrt{\kappa} + 1} \right)^k \|x^{(0)} - x^*\|_Q.$$

Es gibt auch nichtlineare Varianten des CG-Verfahrens für allgemeine Zielfunktionen, siehe Lehrveranstaltung *Nichtlineare Optimierung*.

Ende der Woche 2

## § 5 DAS NEWTON-VERFAHREN

Wir untersuchen in diesem Abschnitt das Newton-Verfahren zur Lösung der (nichtlinearen) Gleichung  $F(x) = 0$ . Dabei wird  $F: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$  im gesamten Abschnitt als stetig partiell diffbar ( $C^1$ -Funktion) angenommen. Später wenden wir das Verfahren auf die notwendige Bedingung 1. Ordnung der Aufgabe „Minimiere  $f(x)$  über  $x \in \mathbb{R}^n$ “ an, also zur Lösung von  $F(x) = \nabla f(x) = 0$ .

**Idee:** Es sei  $x^{(0)}$  die Schätzung einer Nullstelle von  $F$ . Wir legen im Punkt  $x^{(0)}$  die Tangente (ein **lineares Modell**) an die Funktion und bestimmen *deren* Nullstelle:

$$F(x^{(0)}) + F'(x^{(0)})(x - x^{(0)}) = 0 \Leftrightarrow x = x^{(0)} - F'(x^{(0)})^{-1}F(x^{(0)}).$$

Diese Nullstelle dient als nächste Iterierte usw.

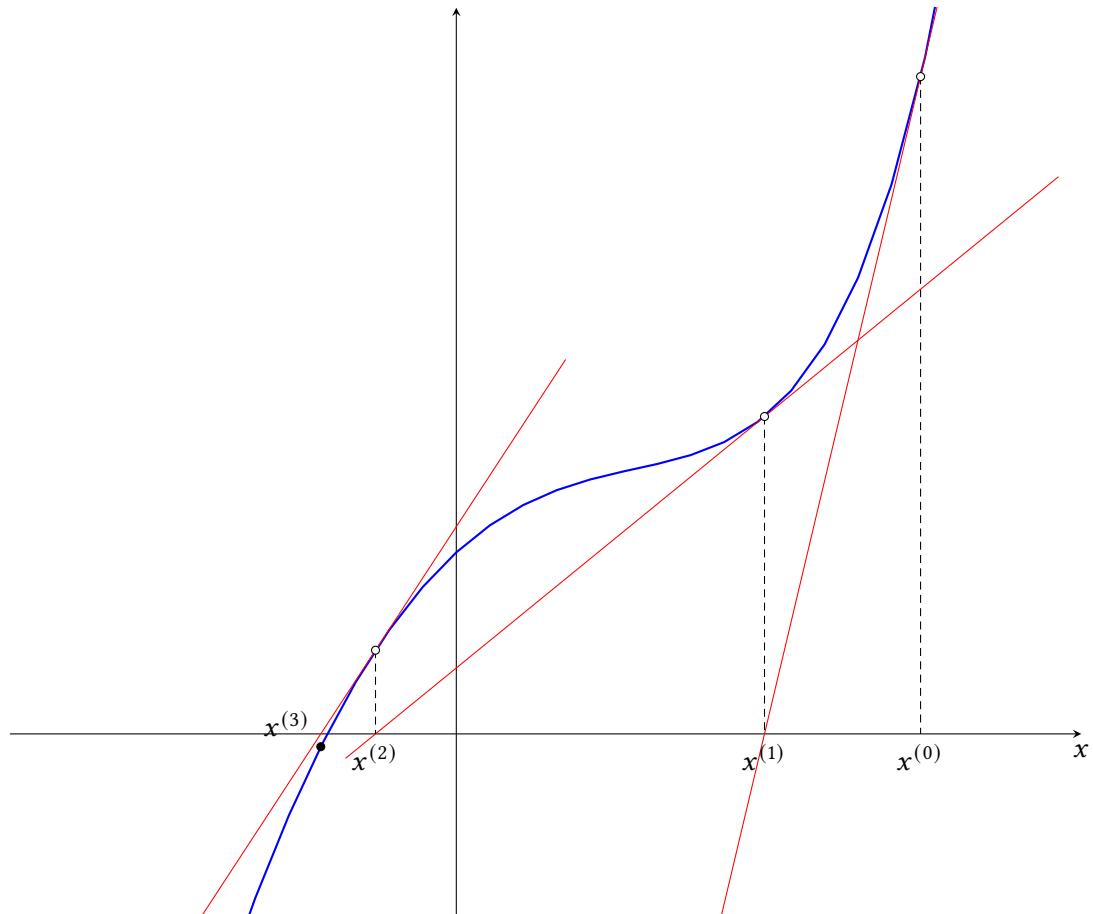


Abbildung 5.1: Illustration des Newton-Verfahrens zur Suche einer Nullstelle der Funktion  $F(x) = \exp(0.9x) - x^2$ .

Der Vektor  $F(x^{(k)})$  heißt dabei das **Residuum** zur Iterierten  $x^{(k)}$ , und  $F'(x^{(k)})$  ist die zugehörige

**Jacobimatrix:**

$$F'(x) = \begin{pmatrix} \frac{\partial F_1(x)}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial F_1(x)}{\partial x_n} \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial F_n(x)}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial F_n(x)}{\partial x_n} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{n \times n}.$$

**Algorithmus 5.1** (Lokales Newton-Verfahren).

**Eingabe:** Startschätzung  $x^{(0)} \in \mathbb{R}^n$

- 1: Setze  $k := 0$
- 2: **while** Abbruchkriterium nicht erfüllt **do**
- 3:   Löse das lineare Gleichungssystem  $F'(x^{(k)}) d^{(k)} := -F(x^{(k)})$  für die **Newton-Richtung**  $d^{(k)}$
- 4:   Setze  $x^{(k+1)} := x^{(k)} + d^{(k)}$
- 5:   Setze  $k := k + 1$
- 6: **end while**

## § 5.1 EINIGE HILFSRESULTATE

**Literatur:** Geiger, Kanzow, 1999, Kapitel 7, Lemma B.7 und B.8

**Definition 5.2** (Matrixnorm).

Es sei  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ . Wir definieren die durch die Euklidischen Normen im  $\mathbb{R}^n$  und  $\mathbb{R}^m$  induzierte **Matrixnorm**

$$\|A\| = \max_{x \neq 0} \frac{\|Ax\|}{\|x\|} = \max_{\|x\|=1} \|Ax\|.$$

$\|A\|$  wird auch als **Spektralnorm** von  $A$  bezeichnet, und es gilt der Zusammenhang

$$\|A\| = \sigma_{\max}(A) = \sqrt{\lambda_{\max}(A^T A)}$$

mit dem größten Singulärwert  $\sigma_{\max}$  von  $A$  und dem größten Eigenwert  $\lambda_{\max}$  von  $A^T A$ . Weiter gilt  $\|Ax\| \leq \|A\| \|x\|$  und  $\|AB\| \leq \|A\| \|B\|$  für alle Matrizen  $A, B$  und Vektoren  $x$  passender Größe.

**Lemma 5.3** (Banach-Lemma).

- (i) Es sei  $M \in \mathbb{R}^{n \times n}$  mit  $\|M\| < 1$ . Dann ist  $\text{Id} - M$  regulär (invertierbar), und es gilt

$$\|(\text{Id} - M)^{-1}\| \leq \frac{1}{1 - \|M\|}.$$

- (ii) Es seien  $A, B \in \mathbb{R}^{n \times n}$  mit  $\|\text{Id} - BA\| < 1$ . Dann sind  $A$  und  $B$  regulär, und es gilt

$$\|B^{-1}\| \leq \frac{\|A\|}{1 - \|\text{Id} - BA\|} \quad \text{und} \quad \|A^{-1}\| \leq \frac{\|B\|}{1 - \|\text{Id} - BA\|}.$$

**Aussage (i)** besagt, Matrizen „in der Nähe“ der Einheitsmatrix invertierbar sind. **Aussage (ii)** besagt, dass wenn  $\text{Id} - BA$  klein ist, also  $B \approx A^{-1}$  gilt, notwendig  $A$  und  $B$  invertierbar sind.

*Beweis.* **Aussage (i):** Für  $x \in \mathbb{R}^n$  gilt

$$\|(\text{Id} - M)x\| = \|x - Mx\| \geq \|x\| - \|Mx\| \geq \underbrace{(1 - \|M\|)}_{>0} \|x\|.$$

Es folgt  $(\text{Id} - M)x \neq 0$  für  $x \neq 0$ , d. h.,  $\text{Id} - M$  ist injektiv und damit regulär.

Es sei nun  $y \in \mathbb{R}^n$  beliebig und  $x := (\text{Id} - M)^{-1}y$ . Für eine Abschätzung der Norm von  $(\text{Id} - M)^{-1}$  müssen wir  $\|x\|$  durch  $\|y\|$  abschätzen. Die Abschätzung oben zeigt

$$\begin{aligned} \|y\| &\geq (1 - \|M\|) \|x\| \\ \Rightarrow \|(\text{Id} - M)^{-1}\| &= \max_{y \neq 0} \frac{\|(\text{Id} - M)^{-1}y\|}{\|y\|} \leq \frac{1}{1 - \|M\|}. \end{aligned}$$

**Aussage (ii):** Es sei  $M = \text{Id} - BA$ , also  $\|M\| < 1$ . Wegen **Aussage (i)** ist  $\text{Id} - M = \text{Id} - (\text{Id} - BA) = BA$  regulär, d. h.,  $A$  und  $B$  sind beide regulär. Weiter gilt

$$\begin{aligned} (\text{Id} - M)^{-1} &= (BA)^{-1} = A^{-1}B^{-1} \\ \Rightarrow B^{-1} &= A(\text{Id} - M)^{-1} \\ \Rightarrow \|B^{-1}\| &\leq \|A\| \|(\text{Id} - M)^{-1}\| \stackrel{(i)}{\leq} \frac{\|A\|}{1 - \|M\|} = \frac{\|A\|}{1 - \|\text{Id} - BA\|}. \end{aligned}$$

Die andere Ungleichung folgt analog. □

**Lemma 5.4.** Es sei  $F$  eine  $C^1$ -Funktion,  $x^* \in \mathbb{R}^n$  und die Jacobimatrix  $F'(x^*)$  regulär. Dann existieren eine offene Kugel  $B_\delta(x^*)$  und eine Konstante  $c > 0$ , sodass  $F'(x)$  für alle  $x \in B_\delta(x^*)$  regulär ist, und es gilt:

$$\|F'(x)^{-1}\| \leq c := 2 \|F'(x^*)^{-1}\| \quad \text{für alle } x \in B_\delta(x^*).$$

*Beweis.* Da  $F'$  im Punkt  $x^*$  stetig ist, existiert ein  $\delta > 0$  mit

$$\|F'(x^*) - F'(x)\| \leq \varepsilon = \frac{1}{2 \|F'(x^*)^{-1}\|}$$

für alle  $x \in B_\delta(x^*)$ , also auch

$$\begin{aligned} \|\text{Id} - F'(x^*)^{-1} F'(x)\| &= \|F'(x^*)^{-1} (F'(x^*) - F'(x))\| \\ &\leq \|F'(x^*)^{-1}\| \|F'(x^*) - F'(x)\| \\ &\leq 1/2 < 1. \end{aligned}$$

Nach dem **Banach-Lemma 5.3**, **Aussage (ii)** [mit  $A = F'(x)$  und  $B = F'(x^*)^{-1}$ ] folgt, dass  $F'(x)$  für  $x \in B_\delta(x^*)$  regulär ist, und es gilt

$$\|F'(x)^{-1}\| \leq \frac{\|F'(x^*)^{-1}\|}{1 - \|\text{Id} - F'(x^*)^{-1} F'(x)\|} \leq 2 \|F'(x^*)^{-1}\| =: c.$$

□

**Bemerkung 5.5** (Einordnung von Lemma 5.4).

Lemma 5.4 korrespondiert zu einem allgemeineren Ergebnis der Funktionalanalysis: Die Menge aller stetig invertierbaren linearen Operatoren zwischen Banachräumen ist offen.

**Lemma 5.6.** Es sei  $F$  eine  $C^1$ -Funktion und  $x^* \in \mathbb{R}^n$ . Für alle  $\varepsilon > 0$  existiert  $\delta > 0$  mit

$$\|F(x) - F(x^*) - F'(\textcolor{red}{x})(x - x^*)\| \leq \varepsilon \|x - x^*\|$$

für alle  $\|x - x^*\| \leq \delta$ .

**Quizfrage 5.1:** Was würde die Aussage des Satzes bedeuten, wenn an Stelle von  $\textcolor{red}{x}$  der Punkt  $x^*$  stehen würde?

*Beweis.* Es sei  $\varepsilon > 0$  gegeben. Aus der Dreiecksungleichung ergibt sich

$$\begin{aligned} & \|F(x) - F(x^*) - F'(\textcolor{red}{x})(x - x^*)\| \\ & \leq \|F(x) - F(x^*) - F'(\textcolor{red}{x}^*)(x - x^*)\| + \|F'(\textcolor{red}{x}^*) - F'(\textcolor{red}{x})\| \|x - x^*\|. \end{aligned}$$

Da  $F$  nach Voraussetzung in  $x^*$  diffbar ist, existiert  $\delta_1 > 0$  mit

$$\|F(x) - F(x^*) - F'(\textcolor{red}{x}^*)(x - x^*)\| \leq \frac{\varepsilon}{2} \|x - x^*\|$$

für alle  $\|x - x^*\| < \delta_1$ . Andererseits ist  $F'$  stetig in  $x^*$ , sodass  $\delta_2 > 0$  existiert mit

$$\|F'(\textcolor{red}{x}^*) - F'(\textcolor{red}{x})\| \leq \frac{\varepsilon}{2}$$

für alle  $\|x - x^*\| < \delta_2$ . Mit  $\delta := \min\{\delta_1, \delta_2\}$  folgt die Behauptung.  $\square$

Zur Charakterisierung der Konvergenzgeschwindigkeit von Algorithmen führen wir folgende Begriffe ein:

**Definition 5.7** ( $Q$ -Konvergenzraten).

Es sei  $x^{(k)} \subseteq \mathbb{R}^n$  eine Folge und  $x^* \in \mathbb{R}^n$ .

(i)  $x^{(k)}$  konvergiert gegen  $x^*$  (mindestens)  **$Q$ -linear**, falls ein  $c \in (0, 1)$  existiert mit

$$\|x^{(k+1)} - x^*\| \leq c \|x^{(k)} - x^*\| \quad \text{für alle } k \in \mathbb{N} \text{ hinreichend groß.}$$

(ii)  $x^{(k)}$  konvergiert gegen  $x^*$  (mindestens)  **$Q$ -superlinear**, falls es eine Nullfolge  $\varepsilon^{(k)}$  gibt mit

$$\|x^{(k+1)} - x^*\| \leq \varepsilon^{(k)} \|x^{(k)} - x^*\| \quad \text{für alle } k \in \mathbb{N}.$$

(iii) Es gelte  $x^{(k)} \rightarrow x^*$ .  $x^{(k)}$  konvergiert gegen  $x^*$  (mindestens)  **$Q$ -quadratisch**, falls ein  $C > 0$  existiert mit

$$\|x^{(k+1)} - x^*\| \leq C \|x^{(k)} - x^*\|^2 \quad \text{für alle } k \in \mathbb{N}.$$

Abschätzung (4.25a) zeigt beispielsweise die Q-lineare Konvergenz des Gradientenverfahrens bei quadratischer Zielfunktion.

**Quizfrage 5.2:** Angenommen, eine Folge konvergiere Q-superlinear wie oben definiert. Konvergiert sie dann auch noch Q-superlinear, wenn man die in der Definition verwendete Euklidische Norm durch die Norm  $\|x\|_M$  mit einer s. p. d. Matrix  $M$  austauscht? Wie ist das bei Q-quadratischer Konvergenz? Und bei Q-linearer Konvergenz?

## § 5.2 DAS LOKALE NEWTON-VERFAHREN FÜR DIE NULLSTELLENBESTIMMUNG $F(x) = 0$

Wir können nun einen lokalen Konvergenzsatz für Algorithmus 5.1 (ohne Abbruchbedingung) beweisen:

**Satz 5.8** (Lokaler Konvergenzsatz für das Newton-Verfahren).

Es sei  $F$  eine  $C^1$ -Funktion und  $x^* \in \mathbb{R}^n$  ein Punkt mit  $F(x^*) = 0$  und  $F'(x^*)$  regulär. Dann existiert eine offene Kugel  $B_\delta(x^*)$  von  $x^*$ , sodass für jedes  $x^{(0)} \in B_\delta(x^*)$  gilt:

- (i) Das lokale Newton-Verfahren ist wohldefiniert und erzeugt eine Folge  $x^{(k)}$ , die gegen  $x^*$  konvergiert.
- (ii) Die Konvergenzrate ist Q-superlinear.
- (iii) Ist  $F'$  Lipschitz-stetig in  $B_\delta(x^*)$ , so ist die Konvergenzrate sogar Q-quadratisch.

*Beweis.* Aussage (i): Nach Lemma 5.4 existieren  $\delta_1 > 0$  und  $c > 0$ , sodass  $F'(x)$  für alle  $x \in B_{\delta_1}(x^*)$  regulär ist mit

$$\|F'(x)^{-1}\| \leq c = 2 \|F(x^*)^{-1}\|. \quad (5.1)$$

Nach Lemma 5.6 existiert zu  $\varepsilon = 1/(2c)$  ein  $\delta_2 > 0$  mit

$$\|F(x) - F(x^*) - F'(x)(x - x^*)\| \leq \frac{1}{2c} \|x - x^*\| \quad (5.2)$$

für alle  $x \in B_{\delta_2}(x^*)$ . Setze  $\delta := \min\{\delta_1, \delta_2\}$  und wähle  $x^{(0)} \in B_\delta(x^*)$ . Dann ist der Schritt  $x^{(1)} := x^{(0)} - F'(x^{(0)})^{-1}F(x^{(0)})$  wohldefiniert, und es gilt

$$\begin{aligned} \|x^{(1)} - x^*\| &= \|x^{(0)} - x^* - F'(x^{(0)})^{-1}F(x^{(0)})\| \\ &= \|F'(x^{(0)})^{-1}[F'(x^{(0)})(x^{(0)} - x^*) - F(x^{(0)}) + \underbrace{F(x^{(0)}) - F(x^*)}_{=0}]\|\| \\ &\leq \|F'(x^{(0)})^{-1}\| \|F(x^{(0)}) - F(x^*) - F'(x^{(0)})(x^{(0)} - x^*)\| \\ &\leq c \frac{1}{2c} \|x^{(0)} - x^*\| = \frac{1}{2} \|x^{(0)} - x^*\|, \end{aligned}$$

also liegt auch  $x^{(1)}$  wieder in  $B_\delta(x^*)$ . Per Induktion ist  $x^{(k)}$  wohldefiniert, gehört zu  $B_\delta(x^*)$ , und  $x^{(k)} \rightarrow x^*$  Q-linear.

**Aussage (ii):** Wir stellen zunächst eine Gleichung für den Fehler auf:<sup>9</sup>

$$\begin{aligned} x^{(k+1)} - x^* &= x^{(k)} - x^* - F'(x^{(k)})^{-1}(F(x^{(k)}) - F(x^*)) \\ &= F'(x^{(k)})^{-1}[F'(x^{(k)})(x^{(k)} - x^*) - (F(x^{(k)}) - F(x^*))] \\ &= F'(x^{(k)})^{-1}\left[F'(x^{(k)})(x^{(k)} - x^*) - \int_0^1 F'(x^{(k)} + t(x^* - x^{(k)}))(x^{(k)} - x^*) dt\right] \\ &= F'(x^{(k)})^{-1}\left[\int_0^1 F'(x^{(k)}) - F'(x^{(k)} + t(x^* - x^{(k)})) dt\right](x^{(k)} - x^*). \end{aligned}$$

Daraus erhalten wir folgende wichtige Abschätzung:

$$\|x^{(k+1)} - x^*\| \leq \|F'(x^{(k)})^{-1}\| \overbrace{\int_0^1 \|F'(x^{(k)}) - F'(x^{(k)} + t(x^* - x^{(k)}))\| dt}^{=:D^{(k)}(t)} \|x^{(k)} - x^*\|. \quad (5.3)$$

Wegen  $x^{(k)} \rightarrow x^*$  gilt  $x^{(k)} + t(x^* - x^{(k)}) \rightarrow x^*$  gleichmäßig auf  $t \in [0, 1]$ . Außerdem ist  $F'$  stetig. Zu jedem  $\varepsilon > 0$  existiert also ein Index  $k_0 \in \mathbb{N}$  mit

$$\begin{aligned} \|D^{(k)}(t)\| &\leq \varepsilon \quad \text{für alle } k \geq k_0 \text{ und alle } t \in [0, 1]. \\ \Rightarrow 0 \leq \int_0^1 \|D^{(k)}(t)\| dt &\leq \varepsilon \quad \text{für alle } k \geq k_0. \end{aligned}$$

Das bedeutet aber:  $\int_0^1 \|D^{(k)}(t)\| dt \rightarrow 0$ . Jetzt liefern (5.1) und (5.3):

$$\|x^{(k+1)} - x^*\| \leq c \int_0^1 \|D^{(k)}(t)\| dt \|x^{(k)} - x^*\|,$$

also die Q-superlineare Konvergenz.

**Quizfrage 5.3:** Welche Norm ist im Ausdruck  $\|D^{(k)}(t)\|$  eigentlich gemeint?

**Aussage (iii):** Da  $x^{(k)}$  und  $x^{(k)} + t(x^* - x^{(k)})$  für alle  $t \in [0, 1]$  in  $B_\delta(x^*)$  liegen, können wir das Integral unter den stärkeren Voraussetzungen besser abschätzen:

$$\int_0^1 \|F'(x^{(k)}) - F'(x^{(k)} + t(x^* - x^{(k)}))\| dt \leq \int_0^1 L t \|x^* - x^{(k)}\| dt = \frac{L}{2} \|x^{(k)} - x^*\|.$$

Aus (5.3) erhalten wir nun:

$$\|x^{(k+1)} - x^*\| \leq c \frac{L}{2} \|x^{(k)} - x^*\|^2.$$

□

**Bemerkung 5.9** (Zum lokalen Newton-Verfahren).

- (i) Das lokale Newton-Verfahren (Algorithmus 5.1) kann scheitern, denn  $F'(x^{(k)})$  muss nicht regulär sein, falls man außerhalb der (unbekannten) garantierten Konvergenzumgebung  $B_\delta(x^*)$  startet.
- (ii) Das sogenannte vereinfachte Newton-Verfahren, bei dem in Zeile 3 von Algorithmus 5.1 statt  $F'(x^{(k)})$  die feste (invertierbare) Matrix  $F'(x^{(0)})$  verwendet wird, konvergiert noch lokal Q-linear.

<sup>9</sup>**Beachte:** Unter dem Integral stehen Matrizen.

### § 5.3 DAS LOKALE NEWTON-VERFAHREN IN DER OPTIMIERUNG

**Literatur:** Geiger, Kanzow, 1999, Kapitel 9

Für den Rest von § 5 wird  $f$  als zweimal stetig partiell diffbar ( $C^2$ -Funktion) angenommen. Wir betrachten wieder die unrestringierte Aufgabe

$$\text{Minimiere } f(x) \text{ über } x \in \mathbb{R}^n. \quad (5.4)$$

Das Newton-Verfahren in der Optimierung lässt sich auf zwei verschiedene Weisen motivieren:

- (i) Die notwendige Optimalitätsbedingung 1. Ordnung für (5.4) lautet

$$f'(x) = 0 \quad \text{oder äquivalent} \quad \nabla f(x) = 0,$$

siehe Satz 3.1. Wenden wir zur Lösung dieser i. A. nichtlinearen Gleichung (Nullstellensuche) das Newton-Verfahren mit  $F(x) = \nabla f(x)$  und  $F'(x) = f''(x)$  an, so erhalten wir die Iterationsvorschrift

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - f''(x^{(k)})^{-1} \nabla f(x^{(k)}). \quad (5.5)$$

- (ii) Im aktuellen Iterationspunkt  $x^{(k)}$  ersetzen wir (5.4) durch die Minimierung des **quadratischen Ersatzmodells** (Taylorpolynoms)

$$m^{(k)}(x) := f(x^{(k)}) + \nabla f(x^{(k)})^\top (x - x^{(k)}) + \frac{1}{2}(x - x^{(k)})^\top f''(x^{(k)})(x - x^{(k)}). \quad (5.6)$$

Falls die Hessematrix  $f''(x^{(k)})$  positiv definit ist, so ist der eindeutige Minimierer durch

$$0 = \nabla m^{(k)}(x) = \nabla f(x^{(k)}) + f''(x^{(k)})(x - x^{(k)})$$

charakterisiert, vgl. (4.15). Wir wählen die Lösung dieses linearen Gleichungssystems als nächste Iterierte  $x^{(k+1)}$  und erhalten wiederum die Iterationsvorschrift

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

**Bemerkung 5.10** (Zum lokalen Newton-Verfahren).

- (i) Satz 5.8 liefert die lokal  $Q$ -superlineare bzw.  $Q$ -quadratische Konvergenz von Algorithmus 5.1 mit  $F(x) = \nabla f(x)$  gegen einen stationären Punkt  $x^*$  von  $f$ . Dieser kann auch ein lokaler Maximierer oder ein Sattelpunkt von  $f$  sein, da wir  $f''(x^*)$  nur als regulär und nichts über die Definitheit voraussetzen.

- (ii) Ist  $f''(x^{(k)})$  s. p. d., so ist die aus dem linearen Gleichungssystem

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

erhaltene Newton-Richtung  $d^{(k)}$  eine Abstiegsrichtung für  $f$ , vergleiche (4.12):

$$f'(x^{(k)}) d^{(k)} = \nabla f(x^{(k)})^\top d^{(k)} = -\nabla f(x^{(k)})^\top \underbrace{f''(x^{(k)})^{-1} \nabla f(x^{(k)})}_{\text{positiv definit}} < 0, \quad \text{falls } \nabla f(x^{(k)}) \neq 0.$$

Wegen der festen Schrittweite  $t^{(k)} = 1$  im lokalen Newton-Verfahren ist jedoch i. A. kein Abstieg in  $f$  garantiert, wenn  $x^{(k)}$  „weit“ von einem lokalen Minimierer  $x^*$  entfernt ist.

- (iii) Das Newton-Verfahren ist invariant gegenüber affin-linearen Transformationen in der Grundmenge und in der Wertemenge. Das bedeutet, dass das Verfahren, angewendet auf die Aufgaben

$$\text{Minimiere } f(x) \text{ über } x \in \mathbb{R}^n \quad \text{und} \quad \text{Minimiere } c f(Ay + b) + d \text{ über } y \in \mathbb{R}^n$$

mit regulärer Matrix  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ,  $b \in \mathbb{R}^n$ ,  $c > 0$  und  $d \in \mathbb{R}$  folgende Eigenschaft besitzt: Gelten für die Startschätzungen  $x^{(0)} = Ay^{(0)} + b$ , dann gilt auch  $x^{(k)} = Ay^{(k)} + b$  für alle  $k \in \mathbb{N}$ .

**Quizfrage 5.4:** Gilt diese Eigenschaft auch für Gradientenverfahren?

## § 5.4 EIN GLOBALISIERTES NEWTON-VERFAHREN IN DER OPTIMIERUNG

**Idee:** Kombiniere die globalen Konvergenzeigenschaften des Gradientenverfahrens (Algorithmus 4.10) mit der schnellen lokalen Konvergenz des Newton-Verfahrens (Algorithmus 5.1).

**Algorithmus 5.11** (Globalisiertes Newton-Verfahren in der Optimierung).

**Eingabe:** Startschätzung  $x^{(0)} \in \mathbb{R}^n$

**Eingabe:** Armijo-Parameter  $\sigma \in (0, 1/2)$ , Backtracking-Parameter  $\beta \in (0, 1)$

**Eingabe:** Globalisierungs-Parameter  $\varrho_1 > 0$ ,  $\varrho_2 > 0$  und  $p > 0$

**Eingabe:** s. p. d. Matrix  $M \in \mathbb{R}^{n \times n}$

1: Setze  $k := 0$

2: **while** Abbruchkriterium nicht erfüllt **do**

3:   Löse, wenn möglich, das lineare Gleichungssystem  $f''(x^{(k)}) d^{(k)} := -\nabla f(x^{(k)})$  nach der Newton-Richtung  $d^{(k)}$

4:   Ist dieses System nicht oder nicht eindeutig lösbar oder gilt

$$-f'(x^{(k)}) d^{(k)} \leq \min\{\varrho_1, \varrho_2 \|d^{(k)}\|_M^p\} \|d^{(k)}\|_M^2, \quad (5.7)$$

so setze  $d^{(k)} := -\nabla_M f(x^{(k)})$  // Fallback auf Gradientenrichtung

5:   Bestimme eine Schrittweite  $t^{(k)}$  mit der Armijo-Backtracking-Strategie zur Startschrittweite  $s = 1$ , sodass (4.3) erfüllt ist, also:

$$f(x^{(k)} + t^{(k)} d^{(k)}) \leq f(x^{(k)}) + \sigma t^{(k)} f'(x^{(k)}) d^{(k)}$$

6:   Setze  $x^{(k+1)} := x^{(k)} + t^{(k)} d^{(k)}$

7:   Setze  $k := k + 1$

8: **end while**

Zur Durchführung des globalisierten Newton-Verfahrens werden folgende problemspezifische Routinen benötigt:

- (1) Routine zur Auswertung der Zielfunktion  $f(x)$ .

- (2) Routine zur Auswertung der Ableitung  $f'(x)$  bzw. des Gradienten  $\nabla f(x)$ .
- (3) Routine zur Auswertung der Hessematrix  $f''(x)$ .

**Bemerkung 5.12** (Zum globalisierten Newton-Verfahren).

- (i) Bei unbrauchbarer Newton-Richtung weichen wir also auf einen Gradientenschritt aus. Entweder die nicht erfüllte Bedingung (5.7) oder aber die Wahl  $d^{(k)} = -\nabla_M f(x^{(k)})$  sichert  $f''(x^{(k)}) d^{(k)} < 0$ . Die Armijo-Backtracking-Strategie liefert also immer eine Schrittweite (Satz 4.3), und der Algorithmus ist wohldefiniert.
- (ii) Als Abbruchbedingungen kommen wiederum diejenigen aus Bemerkung 4.7 zum Einsatz.
- (iii) Die Vorgabe  $\sigma < 1/2$  und die Wahl der Startschrittweite  $s = 1$  sind wesentlich, damit für hinreichend große  $k \in \mathbb{N}$  tatsächlich volle Newton-Schritte ( $t^{(k)} = 1$ ) gegangen werden können.
- (iv) Im praktischen Einsatz kommt in Algorithmus 5.11 auch die nicht-monotone Armijo-Regel zum Einsatz, bei der hinreichender Abstieg nur im Vergleich zum Maximum der letzten Funktionswerte gefordert wird, siehe Geiger, Kanzow, 1999, Ende Abschnitt 9.3, S.96.

Wir geben Konvergenzaussagen für Algorithmus 5.11 ohne Abbruchbedingung, sodass eine unendliche Folge  $x^{(k)}$  entsteht, an.

**Satz 5.13** (Globaler Konvergenzsatz für das globalisierte Newton-Verfahren).  
Es sei  $x^{(k)}$  eine durch Algorithmus 5.11 erzeugte Folge. Dann gilt:

- (i) Jeder Häufungspunkt  $x^*$  von  $x^{(k)}$  ist ein stationärer Punkt von  $f$ , erfüllt also  $f'(x^*) = 0$ .
- (ii) Ist  $x^*$  ein isolierter Häufungspunkt von  $x^{(k)}$ , dann konvergiert bereits die gesamte Folge  $x^{(k)} \rightarrow x^*$ .

*Beweis.* Siehe Geiger, Kanzow, 1999, Satz 9.5 und Satz 9.7 □

**Satz 5.14** (Lokaler Konvergenzsatz für das globalisierte Newton-Verfahren).

Es seien  $x^{(k)}, d^{(k)}$  durch den Algorithmus 5.11 erzeugte Folgen. Ist  $x^*$  ein Häufungspunkt von  $x^{(k)}$  und ist  $f''(x^*)$  s. p. d., so gilt:

- (i) Die gesamte Folge  $x^{(k)}$  konvergiert gegen den strikten lokalen Minimierer  $x^*$ .
- (ii) Für alle hinreichend großen  $k \in \mathbb{N}$  ist die verwendete Suchrichtung  $d^{(k)}$  immer die Newton-Richtung, und es wird die volle Schrittweite  $t^{(k)} = 1$  akzeptiert.
- (iii)  $x^{(k)}$  konvergiert  $Q$ -superlinear gegen  $x^*$ .
- (iv) Ist  $f''$  Lipschitz-stetig in einer Umgebung von  $x^*$ , so konvergiert  $x^{(k)}$   $Q$ -quadratisch gegen  $x^*$ .

*Beweis.* Siehe Geiger, Kanzow, 1999, Satz 9.10 □

Alle hier besprochenen Basis-Algorithmen zur Lösung freier Optimierungsaufgaben sind **Liniensuchverfahren** (englisch: *line search methods*), die in jeder Iteration

- (1) eine Suchrichtung  $d^{(k)}$
- (2) und anschließend eine geeignete Schrittänge  $t^{(k)}$

bestimmen. Als Alternative sind auch **Trust-Region-Verfahren** (englisch: *trust-region methods*) etabliert, die beide Schritte gemeinsam durchführen, siehe Vorlesung *Nichtlineare Optimierung* und Geiger, Kanzow, 1999, Abschnitt 14.

Allen hier besprochenen Verfahren ist gemeinsam, dass sie die Suchrichtung  $d^{(k)}$  durch Minimierung eines lokalen quadratischen Ersatzmodells

$$q^{(k)}(d) := f(x^{(k)}) + f'(x^{(k)}) d + \frac{1}{2} d^\top B^{(k)} d$$

gewinnen, d. h. (bei s. p. d. Matrix  $B^{(k)}$ ) aus dem linearen Gleichungssystem

$$B^{(k)} d^{(k)} = -\nabla f(x^{(k)}).$$

Folgende Tabelle fasst typische Eigenschaften dieser Verfahren zusammen:

Gradientenverfahren	$B^{(k)} = \text{Id}$	Q-linear, einfaches Verfahren
vork. Gradientenverf.	$B^{(k)} = M$	Q-linear, einfaches Verfahren
Quasi-Newton-Verf.	$B^{(k)}$ variiert	bis Q-superlinear, oft guter Kompromiss
Newton-Verfahren	$B^{(k)} = f''(x^{(k)})$	Q-superlinear oder besser, aber aufwändig

Mehr insbesondere zu Quasi-Newton-Verfahren folgt in der Vorlesung *Nichtlineare Optimierung*.

Ende der Woche 3

## Kapitel 2 Lineare Optimierung

# Kapitel 3 Konvexe Optimierung

# Index

- $C^1$ -Funktion, 12
- $C^2$ -Funktion, 12
- abgeschlossene  $\varepsilon$ -Kugel, 11
- abgeschlossene  $\varepsilon$ -Umgebung, 11
- Ableitung, 11
- Abschluss einer Menge, 11
- Abstiegsrichtung, 17
- aktive Ungleichung, 5
- Armijo-Bedingung, 18
- Armijo-Parameter, 18
- Backtracking-Parameter, 19
- Backtracking-Strategie, 19
- beidseitige Richtungsableitung, 11
- Box-Beschränkungen, 7
- CG-Verfahren, 31
- differenzierbare Funktion, 11
- diskrete Optimierung, 5
- einseitige Richtungsableitung, 11
- exakte Liniensuche, 18
- freie Optimierungsaufgabe, 7
- gleichungsbeschränkte Optimierungsaufgabe, 7
- Gleichungsnebenbedingung, 5
- global optimale Lösung, 6
- globale Minimalstelle, 6
- globaler Minimalwert, 6
- globaler Minimierer, 6
- globales Minimum, 6
- Gradient, 11
- Gradientenverfahren, 18
- Grundmenge, 5
- Hessematrix, 12
- inaktive Ungleichung, 5
- Inneres einer Menge, 11
- Jacobimatrix, 12
- Kantorovich-Ungleichung, 27
- kontinuierliche Optimierung, 5
- konvexe Optimierungsaufgabe, 8
- lineare Optimierungsaufgabe, 7
- lineares Modell, 32
- lineares Programm, 7
- Liniensuche, 18
- Liniensuchfunktion, 19
- Liniensuchverfahren, 41
- lokal optimale Lösung, 6
- lokale Minimalstelle, 6
- lokaler Minimalwert, 6
- lokaler Minimierer, 6
- lokales Minimum, 6
- LP, *siehe* lineares Programm
- lösbarer Optimierungsaufgabe, 6
- Matrixnorm, 33
- Mittelwertsatz, 13
- Newton-Richtung, 33
- nichtlineare Optimierungsaufgabe, 8
- nichtlineares Programm, 8
- NLP, *siehe* nichtlineares Programm
- obere Schranke, 7
- offene  $\varepsilon$ -Kugel, 11
- offene  $\varepsilon$ -Umgebung, 11
- Optimalwert, 5
- Optimierungsvariable, 5
- partielle Ableitung, 11
- Q-lineare Konvergenz, 35
- Q-quadratische Konvergenz, 35
- Q-superlineare Konvergenz, 35

QP, *siehe* quadratisches Programm  
quadratische Optimierungsaufgabe, 8  
quadratisches Ersatzmodell, 38  
quadratisches Programm, 8  
quadratisches Wachstum, 16

Residuum, 25, 32  
Richtung des steilsten Abstiegs, 17  
Richtung des steilsten Abstiegs im  $M$ -Skalarprodukt,  
24

Schnitt durch eine Funktion, 19  
Spektralnorm, 33  
stationärer Punkt, 14  
strikter globaler Minimierer, 6  
strikter lokaler Minimierer, 6  
Sublevelmenge, 8  
Suchrichtung, 19

Teilstufe, 10  
Trust-Region-Verfahren, 41

unbeschränkte Optimierungsaufgabe, 5  
ungleichungsbeschränkte Optimierungsaufga-  
be, 7  
Ungleichungsnebenbedingung, 5  
unlösbare Optimierungsaufgabe, 6  
unrestriktierte Optimierungsaufgabe, 7  
untere Schranke, 7  
unterhalbstetige Funktion, 8  
unzulässige Optimierungsaufgabe, 5

verallgemeinerte Konditionszahl, 30  
verallgemeinertes Eigenwertproblem, 29  
Verfahren der konjugierten Gradienten, 31  
Verfahren des steilsten Abstiegs, 18  
verletzte Ungleichung, 5  
von unten halbstetige Funktion, 8  
vorkonditioniertes Gradientenverfahren, 24  
Vorkonditionierung, 24

Zielfunktion, 5  
zulässige Menge, 5  
zulässiger Punkt, 5  
zweimal differenzierbare Funktion, 12

## Literatur

- Alpargu, G. (1996). „The Kantorovich Inequality, with Some Extensions and with Some Statistical Applications“. Magisterarb. Department of Mathematics und Statistics, McGill University, Montreal, Canada.
- Anderson, T. W. (1971). *The Statistical Analysis of Time Series*. John Wiley & Sons, Inc., New York-London-Sydney. doi: [10.1002/9781118186428](https://doi.org/10.1002/9781118186428).
- Armijo, L. (1966). „Minimization of functions having Lipschitz continuous first partial derivatives“. *Pacific Journal of Mathematics* 16.1, S. 1–3. doi: [10.2140/pjm.1966.16.1](https://doi.org/10.2140/pjm.1966.16.1).
- Cartan, H. (1967). *Calcul Différentiel*. Paris: Hermann, S. 178.
- Gass, S. I.; A. A. Assad (2005). *An Annotated Timeline of Operations Research: An Informal History*. Bd. 75. International Series in Operations Research & Management Science. Boston, MA: Kluwer Academic Publishers.
- Geiger, C.; C. Kanzow (1999). *Numerische Verfahren zur Lösung unrestringierter Optimierungsaufgaben*. New York: Springer. doi: [10.1007/978-3-642-58582-1](https://doi.org/10.1007/978-3-642-58582-1).
- Gill, P. E.; W. Murray; M. H. Wright (1981). *Practical Optimization*. London: Academic Press.
- Heuser, H. (2002). *Lehrbuch der Analysis. Teil 2*. 12. Aufl. Stuttgart: B.G.Teubner. doi: [10.1007/978-3-322-96826-5](https://doi.org/10.1007/978-3-322-96826-5).