

# VORLESUNGSSKRIPT

## GRUNDLAGEN DER OPTIMIERUNG

WINTERSEMESTER 2021

Roland Herzog\*

2021-10-22

\*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	9
1 Unrestriktierte Optimierung	12
§ 3 Optimalitätsbedingungen der unrestrictierten Optimierung	12
§ 4 Das Gradientenverfahren	15
§ 4.1 Vorstellung des Verfahrens	15
§ 4.2 Das Gradientenverfahren in einem alternativen Skalarprodukt	20
§ 4.3 Konvergenz bei quadratischer Zielfunktion und exakter Liniensuche	23
§ 5 Das Newton-Verfahren	25
§ 5.1 Einige Hilfsresultate	27
§ 5.2 Das lokale Newton-Verfahren für $F(x) = 0$	30
§ 5.3 Das lokale Newton-Verfahren in der Optimierung	31
§ 5.4 Ein globalisiertes Newton-Verfahren in der Optimierung	33
2 Lineare Optimierung	36
3 Konvexe Optimierung	37



# Kapitel 0 Einführung

## § 1 GRUNDBEGRIFFE UND KLASIFIKATION VON OPTIMIERUNGSAUFGABEN

Die mathematische Optimierung beschäftigt sich mit Aufgaben der Form

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

$\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$  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**.

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

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

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

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

**Beachte:** Eine Maximierungsaufgabe „Maximiere  $f(x)$  über  $x \in F$ “ kann durch Übergang zu „Minimiere  $-f(x)$  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?
- (2) Wie erkennt man sie? ( $\leadsto$  Optimalitätsbedingungen)

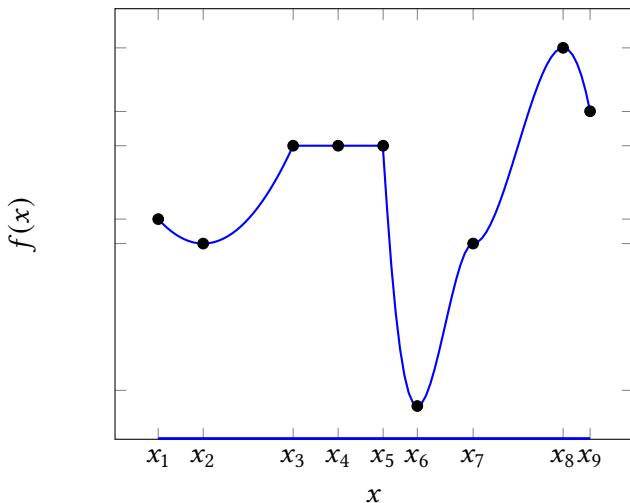


Abbildung 1.1: Illustration der Begriffe aus [Definition 1.1](#) anhand einer Zielfunktion  $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ . Die zulässige Menge ist das auf der  $x$ -Achse markierte Intervall.

(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 **-restriktiert** (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**.

(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**), also z. B.

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

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

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

- (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 quadratisches 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. Man kann aber unter recht allgemeinen Annahmen die Existenz eines globalen Minimierers beweisen, wie der folgende Existenzsatz zeigt:

**Satz 1.4** (Existenz eines globalen Minimierers).

Die zulässige Menge  $F \subseteq \mathbb{R}^n$  sei nichtleer. Weiter sei  $f: F \rightarrow \mathbb{R}$  **unterhalbstetig** auf  $F$ , d. h.,

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

Für irgendein  $m \in \mathbb{R}$  sei die Sub-Levelmenge

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

kompakt in  $\mathbb{R}^n$  und nichtleer. Dann besitzt die Aufgabe

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

mehrdeutig 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. Aufgrund der Unterhalbstetigkeit von  $f$  folgt  $f(x^*) \leq \liminf_{\ell \rightarrow \infty} f(x^{(k(\ell))})$ . Demnach wäre  $(f(x^{(k(\ell))}))$  nach unten durch  $f(x^*)$  beschränkt, Widerspruch.

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

Es sei nun  $f^* := \inf_{x \in F} f(x) \in \mathbb{R}$  der Optimalwert. Dann gibt es eine Folge  $(x^{(k)}) \subseteq F$  mit der Eigenschaft<sup>4</sup>  $f(x^{(k)}) \searrow f^*$ . Für hinreichend große  $k \in \mathbb{N}$  gehört die Folge zur Sub-Levelmenge  $L$ , 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.  $\square$

### Bemerkung 1.5.

Wenn  $f$  sogar stetig auf  $F$  ist, dann folgt die Aussage von Satz 1.4 aus dem Satz von Weierstraß: Stetige reellwertige Funktionen nehmen auf kompakten Mengen ihr Minimum (und Maximum) an.

## § 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 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 mit  $x_1, x_2$  etc. bezeichnet.
- 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>4</sup>Für eine reelle Zahlenfolge  $(y^{(k)})$  bedeutet  $y^{(k)} \searrow y$ , dass  $y^{(k)} \geq y$  gilt und  $y^{(k)} \rightarrow y$ . Die Monotonie der Folge ist damit nicht gemeint.

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

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

- 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  $d \neq 0$ , 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  $d \neq 0$ , 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 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.

- Die Matrix

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

bestehend aus den zweiten partiellen Ableitungen der Funktion  $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  an der Stelle  $x$  heißt die **Hessematrix**.

- 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 in  $f''(x)$  als Funktionen von der Stelle  $x$  stetig sind. In diesem Fall ist  $f''(x)$  nach dem Satz von Schwarz symmetrisch.

Schließlich benötigen wir häufig den Satz von Taylor:

**Satz 2.1** (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:

$$\begin{aligned} \text{im Fall } k = 0: \quad & f(x_0 + d) = f(x_0) + f'(x_0 + \xi d) d \quad (\text{Mittelwertsatz}), \\ \text{im Fall } k = 1: \quad & f(x_0 + d) = f(x_0) + f'(x_0) d + \frac{1}{2} d^\top f''(x_0 + \xi d) d. \end{aligned}$$

Für vektorwertige Funktionen  $F: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$  heißt die Matrix der partiellen Ableitungen aller Komponentenfunktionen  $F_1, \dots, F_m$ , also

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

die **Jacobimatrix** von  $F$  an der Stelle  $x$ .  $F$  heißt **diffbar**, wenn alle Komponentenfunktionen diffbar sind.  $F$  heißt **stetig partiell diffbar**, wenn alle Einträge der Jacobimatrix als Funktionen von der Stelle  $x$  stetig sind.  $C^1$ -Funktionen sind überall diffbar.

# 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.

Im gesamten [Kapitel 1](#) sei  $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  mindestens einmal stetig partiell diffbar, kurz:  $C^1$ . Es gilt also für die (beidseitige) Richtungsableitung

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

## § 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  $C^1$  in einer Umgebung  $U(x^*)$ . Dann ist die Ableitung  $f'(x^*) = 0$ .

*Beweis.* Es sei  $d \in \mathbb{R}^n$  beliebig. Dann gilt für hinreichend kleine  $t > 0$  aufgrund der lokalen Optimalität von  $x^*$  die Ungleichung  $f(x^*) \leq f(x^* + t d)$ . Nach dem [Satz von Taylor 2.1](#) existiert weiter für jedes hinreichend kleine  $t > 0$  (sodass  $x^* + t d$  in  $U(x^*)$  bleibt) jeweils ein  $\xi_t \in (0, 1)$ , sodass gilt:

$$f(x^* + t d) = f(x^*) + f'(x^* + \xi_t t d) (t d).$$

Aus beiden Aussagen zusammen folgt:

$$0 \leq \frac{f(x^* + t d) - f(x^*)}{t} = \frac{1}{t} f'(x^* + \xi_t t d) (t d) = f'(x^* + \xi_t t d) d$$

für hinreichend kleine  $t > 0$ . Der Grenzübergang<sup>1</sup>  $t \searrow 0$  liefert wegen der  $C^1$ -Eigenschaft von  $f$  nun  $f'(x^*) d \geq 0$ . Analog erhält man unter Verwendung von  $-d$  die Folgerung  $f'(x^*) d \leq 0$ , zusammen also  $f'(x^*) d = 0$  für alle  $d \in \mathbb{R}^n$ .  $\square$

<sup>1</sup>Wie üblich bedeutet dies:  $t > 0$  und  $t \rightarrow 0$ , nicht notwendigerweise monoton.

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

**Quizfrage:** 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  $C^2$  in einer Umgebung  $U(x^*)$ . Dann ist die Hessematrix  $f''(x^*)$  positiv semidefinit.<sup>2</sup>

*Beweis.* Wir nehmen an, dass  $f''(x^*)$  nicht positiv semidefinit ist. Dann existiert  $d \in \mathbb{R}^n$  mit

$$d^\top f''(x^*) d < 0.$$

Nach dem **Satz von Taylor 2.1** existiert für alle hinreichend kleinen  $t > 0$  (sodass  $x^* + t d$  in  $U(x^*)$  bleibt) jeweils ein  $\xi_t \in (0, 1)$ , sodass gilt:

$$\begin{aligned} f(x^* + t d) &= f(x^*) + t \underbrace{f'(x^*) d}_{=0 \text{ nach Satz 3.1}} + \frac{1}{2} t^2 d^\top f''(x^* + \xi_t t d) d. \end{aligned}$$

Der Term  $d^\top f''(x) d$  hängt nach Voraussetzung in der Umgebung  $U(x^*)$  stetig vom Punkt  $x$  ab. Nach Annahme ist also  $d^\top f''(x) d < 0$  für alle  $x$  hinreichend nahe bei  $x^*$ . Folglich gibt es ein  $t_0 > 0$ , sodass  $d^\top f''(x^* + \xi_t t d) d < 0$  für alle  $t \in (0, t_0)$  gilt. Daraus folgt

$$f(x^* + t d) < f(x^*) \quad \text{für alle } t \in (0, t_0),$$

im Widerspruch zur Voraussetzung, dass  $x^*$  ein lokaler Minimierer von  $f$  ist.  $\square$

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

**Quizfrage:** Kann man den **Satz 3.2** auch konstruktiv, also ohne Widerspruchsbeweis, zeigen?

**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  $f$  eine  $C^2$ -Funktion in einer Umgebung  $U(x^*)$ , und es gelte

$$(i) \quad f'(x^*) = 0 \text{ und}$$

$$(ii) \quad f''(x^*) \text{ ist positiv definit.}$$

---

<sup>2</sup>Aufgrund der Symmetrie von  $f''(x^*)$  ist dies äquivalent dazu, dass alle Eigenwerte von  $f''(x^*)$  nicht-negativ sind.

Dann gilt: Zu jedem  $\beta \in (0, \mu)$ , wobei  $\mu > 0$  der kleinste Eigenwert von  $f''(x^*)$  ist, 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  $f$ .

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 **gleichmäßig konvex** (siehe Kapitel 3).

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

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

*Beweis.* 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:

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

Nach dem **Satz von Taylor 2.1** existiert für jedes  $d \in \mathbb{R}^n$  mit  $\|d\|$  hinreichend klein (sodass  $x^* + d \in U(x^*)$  liegt) jeweils ein  $\xi_d \in (0, 1)$ , sodass gilt:

$$f(x^* + d) = f(x^*) + \underbrace{f'(x^*) d}_{=0 \text{ nach Annahme (i)}} + \frac{1}{2} d^\top f''(x^* + \xi_d d) d. \quad (3.2)$$

Da die Hessematrix  $f''(x)$  und damit auch ihre Eigenwerte nach Voraussetzung stetig von  $x$  abhängen (**Quizfrage:** Warum ist das eigentlich so?), gibt es für jedes  $\beta \in (0, \mu)$  eine Umgebung  $U_\beta(x^*)$ , sodass der kleinste Eigenwert von  $f''(x)$  für jedes  $x \in U_\beta(x^*)$  nicht kleiner als  $\beta$  ist. Wie oben folgt daraus:

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

für alle  $x \in U_\beta(x^*) \subseteq U(x^*)$ . Für ein solches  $x$  und  $d := x - x^*$  erhalten wir also aus (3.2):

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

□

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.

## § 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  $f(x^{(k)} + t^{(k)} d^{(k)}) < f(x^{(k)})$  gilt.<sup>3</sup>
- (3) Aufdatieren durch  $x^{(k+1)} := x^{(k)} + t^{(k)} d^{(k)}$ .
- (4) Erhöhen des Iterationszählers  $k \rightsquigarrow k + 1$ .

**Definition 4.1** (Abstiegsrichtung).

Ein Vektor  $d \in \mathbb{R}^n$  heißt **Abstiegsrichtung** 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** von  $f$  im Punkt  $x$ . Er ist immer eine Abstiegsrichtung, außer in einem stationären Punkt. Wir können (4.1) auch schreiben als  $\nabla f(x)^T d < 0$ . 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.

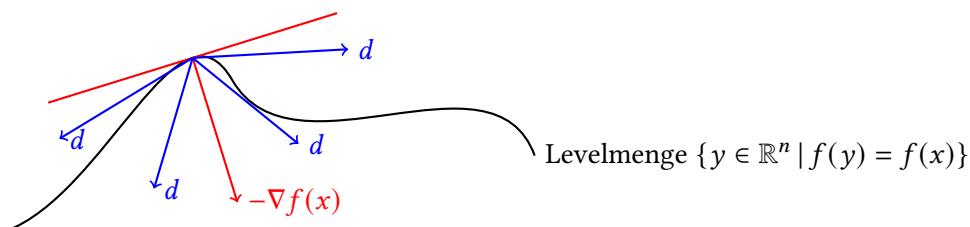


Abbildung 4.1: Verschiedene Abstiegsrichtungen  $d$  für  $f$  im Punkt  $x$ .

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

### § 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

<sup>3</sup>Der neue Funktionswert ist also geringer als der aktuelle, daher der Name „Abstiegsverfahren“.

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**, 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:** 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**

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

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

**Quizfrage:** Welche weitere Schwierigkeit kann sich beim Versuch, die Schrittweite nach (4.2) zu wählen, außerdem noch 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** 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:** Welche anschauliche Bedeutung hat der Parameter  $\sigma$ ?

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 Differenzierbarkeitseigenschaften 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  $\varphi'(0) = f'(x) d = -\|\nabla f(x)\|^2$ .

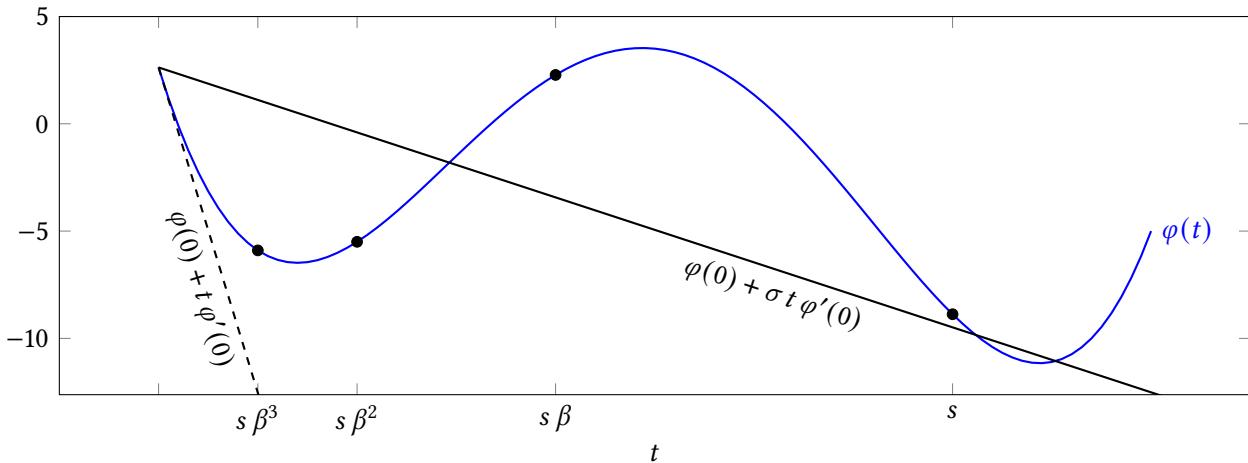


Abbildung 4.2: Darstellung der Armijo-Bedingung (4.5) und einigen Test-Schrittweiten beim Backtracking. Der Armijo-Parameter ist hier als  $\sigma = 0.1$  und der Backtracking-Parameter als  $\beta = 0.5$  gewählt.

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 Schrittweiten der Form  $t = s\beta^\ell$  für endliches  $\ell \in \mathbb{N}_0$  immer im Intervall  $[0, T]$  landen.

*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-Schrittweitenabschätzung).

**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 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:** Angenommen, für die Funktion  $f$  liegt eine Routine vor, die zu einer gegebenen Stelle  $x$  und 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

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

*Beweis.* Wegen des Mittelwertsatzes 2.1 existiert zu jedem  $k \in \mathbb{N}$  ein  $\xi^{(k)} \in (0, 1)$  mit

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

□

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  $f'(x^*) = 0$ .  $\square$

**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

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

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

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

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

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

**Quizfrage:** 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 Startschrittweite bei der Armijo-Liniensuche).

In der praktischen Durchführung verwendet man beim Gradientenverfahren oft eine iterationsabhängige Startschrittweite  $s^{(k)} > 0$ . 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 Startschrittweite 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 Startschrittweite.

Auch unter Verwendung dieser Startschrittweiten kann man Satz 4.6 beweisen.

## § 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 üblichen (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 Matrix (s. p. d.)  $M$  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.

Aufgabe (4.9) ist eine restriktierte 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).

Die eindeutige Lösung  $d^*$  von (4.9) ist, falls  $f'(x) \neq 0$  gilt, 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.)

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

$$M d^* = -\nabla f(x). \tag{4.11}$$

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** 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):

$$f'(x) d^* = -\nabla f(x)^\top M^{-1} \nabla f(x) = -\|\nabla f(x)\|_{M^{-1}}^2 = -\|\nabla_M f(x)\|_M^2 < 0, \tag{4.12}$$

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

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)  $\|\nabla_M f(x^{(k)})\|_M \leq \text{ATOL}_{\nabla f(x)} + \text{RTOL}_{\nabla f(x)} \|\nabla f(x^{(0)})\|_M$ .

**Quizfrage:** 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**. 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 Startschriftweite  $s$ , 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 gleichmäßig konvexes quadratisches Polynom:

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

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.

**Quizfrage:** Welche Rolle spielt die Symmetrie der Matrix  $Q$  in (4.14)?

Natürlich wird man das Gradientenverfahren zur Lösung von (4.14) 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.

**Beachte:** Das Gradientenverfahren (Algorithmus 4.10) kommt bereits mit Matrix-Vektor-Produkten  $Q x$  aus. Diese werden bei der Berechnung des Gradienten  $\nabla f(x) = Q x + c$  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  $t_{\min}$ .

Im Folgenden seien  $\lambda_{\min}(Q; M) > 0$  und  $\lambda_{\max}(Q; M) > 0$  der kleinste und größte Eigenwert des **verallgemeinerten Eigenwertproblems**

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

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

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

die verallgemeinerte (spektrale) **Konditionszahl** von  $Q$  bzgl.  $M$ .

**Satz 4.11** (Globaler Konvergenzsatz für quadratische Zielfunktionen).

Es seien  $Q$  und  $M$  s. p. d. Matrizen. 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

$$f(x^{(k+1)}) - f(x^*) \leq \left(\frac{\kappa - 1}{\kappa + 1}\right)^2 (f(x^{(k)}) - f(x^*)) \quad (4.17)$$

und deswegen auch

$$\|x^{(k+1)} - x^*\|_Q \leq \left(\frac{\kappa - 1}{\kappa + 1}\right) \|x^{(k)} - x^*\|_Q, \quad (4.18a)$$

$$\|x^{(k)} - x^*\|_Q \leq \left(\frac{\kappa - 1}{\kappa + 1}\right)^k \|x^{(0)} - x^*\|_Q. \quad (4.18b)$$

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

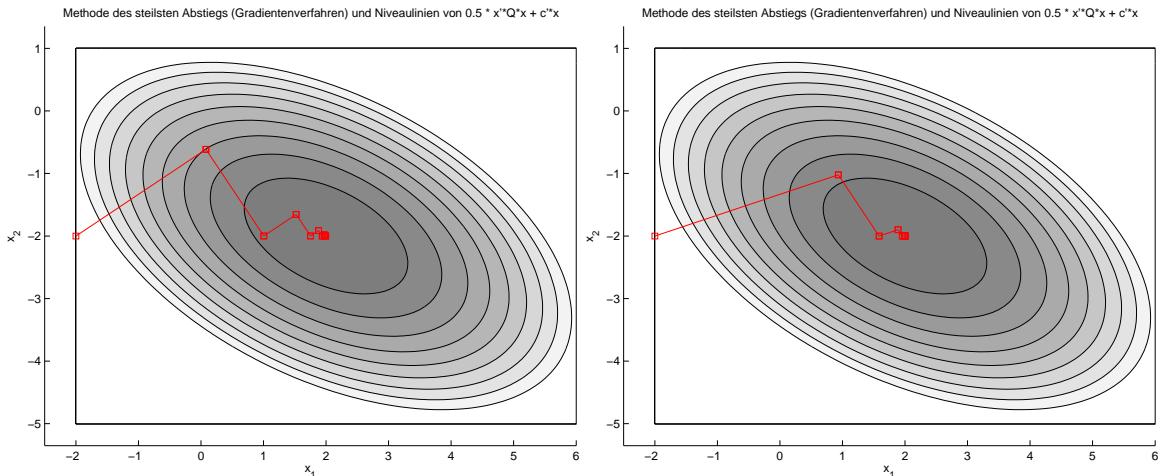


Abbildung 4.3: Illustration des Gradientenverfahrens (Algorithmus 4.10) mit Startpunkt  $x^{(0)} = (-2, -2)^T$  und exakter Schrittweite (4.16) für die Minimierung von (4.14) mit  $Q = \begin{pmatrix} 3 & 2 \\ 2 & 6 \end{pmatrix}$  und  $c = \begin{pmatrix} -2 \\ 8 \end{pmatrix}$ . Die exakte Lösung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

**Bemerkung 4.12** (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.
- (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

$$f(x) = f(x^*) + \nabla f(x^*)^\top (x - x^*) + \frac{1}{2} (x - x^*)^\top f''(x^* + \xi(x - x^*)) (x - x^*)$$

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 (4.18b) 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:

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

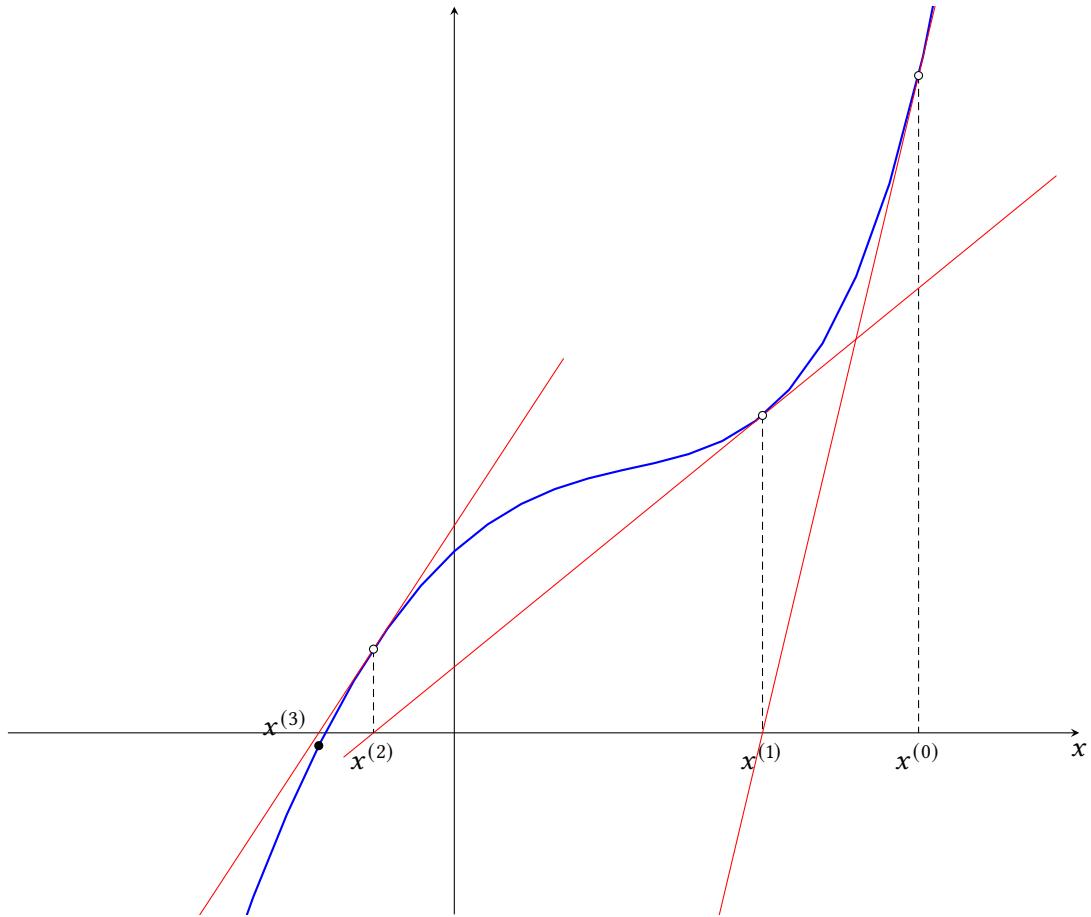


Abbildung 5.1: Illustration des Newton-Verfahrens zur Suche einer Nullstelle der Funktion  $F(x) = \exp(0.9x) - x^2$ .

Diese Nullstelle dient als nächste Iterierte usw.

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.  $\square$

**Lemma 5.4.** Es sei  $F$  eine  $C^1$ -Funktion,  $x^* \in \mathbb{R}^n$  und die Jacobimatrix  $F'(x^*)$  regulär. Dann existieren eine Umgebung  $B_\delta(x^*)$  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

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

$\square$

**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:** 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 (4.18a) zeigt beispielsweise die q-lineare Konvergenz des Gradientenverfahrens bei quadratischer Zielfunktion.

**Quizfrage:** 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 $F(x) = 0$

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

**Satz 5.8** (Lokaler Konvergenzsatz für 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 Umgebung  $B_\delta(x^*)$  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

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

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>6</sup>

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

<sup>6</sup>Beachte: Unter dem Integral stehen Matrizen.

Daraus erhalten wir folgende wichtige Abschätzung:

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

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:** 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 sog. vereinfachte Newton-Verfahren, bei dem in Schritt 3 statt  $F'(x^{(k)})$  die feste (invertierbare) Matrix  $F'(x^{(0)})$  verwendet wird, konvergiert noch lokal q-linear.

### § 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 lokale 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 lokales Maximum 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*

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

*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: 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:

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

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 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

$$q^{(k)}(d) := f(x^{(k)}) + f'(x^{(k)}) d + \frac{1}{2} d^T B^{(k)} d$$

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
work. 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 in der Vorlesung *Nichtlineare Optimierung*.

Ende der Woche 3

## Kapitel 2 Lineare Optimierung

# Kapitel 3 Konvexe Optimierung

# Index

- $C^1$ -Funktion, 11  
 $C^2$ -Funktion, 11
- abgeschlossene  $\varepsilon$ -Kugel, 10  
abgeschlossene  $\varepsilon$ -Umgebung, 10
- Ableitung, 10
- Abstiegsrichtung, 15
- aktive Ungleichung, 5
- Armijo-Bedingung, 16
- Armijo-Parameter, 16
- Backtracking-Parameter, 17
- Backtracking-Strategie, 17
- beidseitige Richtungsableitung, 10
- Box-Beschränkungen, 7
- CG-Verfahren, 25
- differenzierbare Funktion, 10
- diskrete Optimierung, 5
- einseitige Richtungsableitung, 10
- exakte Liniensuche, 16
- freie Optimierungsaufgabe, 7
- gleichungsbeschränkte Optimierungsaufgabe, 7
- Gleichungsnebenbedingungen, 5
- global optimale Lösung, 6
- globale Minimalstelle, 6
- globaler Minimalwert, 6
- globaler Minimierer, 6
- globales Minimum, 6
- Gradient, 10
- Gradientenverfahren, 15
- Grundmenge, 5
- Hessematrix, 11
- inaktive Ungleichung, 5
- Jacobimatrix, 11
- Konditionszahl, 24
- kontinuierliche Optimierung, 5
- konvexe Optimierungsaufgabe, 8
- lineare Optimierungsaufgabe, 7
- lineares Modell, 25
- lineares Programm, 7
- Liniensuche, 16
- Liniensuchfunktion, 16
- Liniensuchverfahren, 34
- lokal optimale Lösung, 6
- lokale Minimalstelle, 6
- lokaler Minimalwert, 6
- lokaler Minimierer, 6
- lokales Minimum, 6
- LP, *siehe* lineares Programm
- lösbarer Optimierungsaufgabe, 6
- Matrixnorm, 27
- Mittelwertsatz, 11
- Newton-Richtung, 26
- nichtlineare Optimierungsaufgabe, 8
- nichtlineares Programm, 8
- NLP, *siehe* nichtlineares Programm 8
- offene  $\varepsilon$ -Kugel, 10
- offene  $\varepsilon$ -Umgebung, 10
- Optimalwert, 5
- Optimierungsvariable, 5
- partielle Ableitung, 10
- q-linear, 29
- q-quadratisch, 29
- q-superlinear, 29
- QP, *siehe* quadratisches Programm
- quadratische Optimierungsaufgabe, 8
- quadratisches Ersatzmodell, 32

quadratisches Programm, 8  
quadratisches Wachstum, 14  
  
Residuum, 26  
Richtung des steilsten Abstiegs, 15  
Richtung des steilsten Abstiegs im  $M$ -Skalarprodukt,  
21  
  
Schnitt, 16  
Spektralnorm, 27  
stationärer Punkt, 13  
strikter globaler Minimierer, 6  
strikter lokaler Minimierer, 6  
Suchrichtung, 16  
  
Teilstufe, 9  
Trust-Region-Verfahren, 35  
  
unbeschränkte Optimierungsaufgabe, 5  
ungleichungsbeschränkte Optimierungsaufga-  
be, 7  
Ungleichungsnebenbedingungen, 5  
unlösbare Optimierungsaufgabe, 6  
unrestriktierte Optimierungsaufgabe, 7  
unterhalbstetige Funktion, 8  
unzulässige Optimierungsaufgabe, 5  
  
verallgemeinertes Eigenwertproblem, 23  
Verfahren der konjugierten Gradienten, 25  
Verfahren des steilsten Abstiegs, 15  
verletzte Ungleichung, 5  
vorkonditioniertes Gradientenverfahren, 22  
Vorkonditionierung, 21  
  
Zielfunktion, 5  
zulässige Menge, 5  
zulässiger Punkt, 5

## Literatur

- 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).