MATTHIAS GERDTS

NICHTDIFFERENZIERBARE OPTIMIERUNG

Address of the Author:

Matthias Gerdts

Mathematisches Institut
Universität Bayreuth

D-95440 Bayreuth

E-Mail: Matthias.Gerdts@uni-bayreuth.de

WWW: www.staff.uni-bayreuth.de/∼btm505

Preliminary Version: 26. Januar 2007

Copyright © 2003 by Matthias Gerdts

Gerdts, M.:	**Nichtdifferenzierbare Optimierung**
Zeit und Ort:	Vorlesung: 2st, Di 11.30–13.00, H 12 Übungen: 2st, Di 14–15.30, S 82
Credit Points:	V 3 + Ü 3
Beginn:	
Inhalt:	Technische und wirtschaftswissenschaftliche Aufgabenstellungen, wie z.B. Standortprobleme oder (diskretisierte) Optimalsteuerungsprobleme, führen häufig auf nichtdifferenzierbare, nichtlineare Optimierungsprobleme. In der Vorlesung werden Algorithmen zur Lösung derartiger Optimierungsprobleme (konvex oder nichtkonvex; restringiert oder unrestringiert) vorgestellt, analysiert und getestet. Behandelt werden u.a. das Verfahren von Nelder-Mead, Bundle-Methoden und Subgradientenverfahren.
für:	Studenten der Mathematik, Technomathematik und Wirtschaftsmathematik
Vorkenntnisse:	Nichtlineare Optimierung oder Operations Research
Schein:	ja
Literatur:	Clarke, F. H.: Optimization and Nonsmooth Analysis, John Wiley & Sons, 1983 Geiger, C./Kanzow, C.: Theorie und Numerik restringierter Optimierungsaufgaben, Springer, 2002. Mäkelä, M. M./Neittaanmäki, P.: Nonsmooth Optimization: Analysis and Algorithms with Applications to Optimal Control, World Scientific, 1992.

Termine

Vorlesungsbeginn	7.4.2003
Vorlesungsende	11.7.2003
Osterferien	17.4.-22.4.2003
Pfingstferien	10.6.2003

Vorlesungsplan

Datum	Stunden	Seite
08.04.2003	2V	1-7
15.04.2003	4V	7-16,16-21
22.04.2003	–	Osterferien
29.04.2003	2V,2Ü	21-27
06.05.2003	4V	27-31,31-35
13.05.2003	2V,2Ü	36-39
20.05.2003	4V	39-43,43-48
27.05.2003	2V,2Ü	48-51
03.06.2003	4V	52-58,58-66
10.06.2003	–	Pfingstferien
17.06.2003	2V,2Ü	66-71
24.06.2003	4V	72-77,78-85
01.07.2003	2V,2Ü	86-96
08.07.2003	4V	97-122

Inhaltsverzeichnis

1 Problemstellungen und Klassifikation **1**

2 Beispiele für nichtdifferenzierbare Problemstellungen **5**

2.1 Exakte L1-Penaltyfunktion 5

2.2 Minimalwertfunktion 7

2.3 Minimaxprobleme 7

2.4 Wirtschaftswissenschaftliche oder ingenieurwissenschaftliche Aufgabenstellungen 7

2.4.1 Angebotsauswertung 7

2.4.2 Designprobleme 8

2.4.3 Ausgleichsprobleme 8

2.5 Dekomposition von linearen Optimierungsproblemen 8

2.6 Klassifikationsprobleme und Support-Vector-Machine 9

2.7 Diskretisierte Optimalsteuerungsprobleme 11

3 Theorie **13**

3.1 Existenz von Minima 13

3.2 Stetigkeitsbegriffe 15

3.3 Richtungsableitungen 16

3.4 Subdifferentiale 24

3.4.1 Rechenregeln 29

3.5 Geometrie und Tangentialkegel 30

3.6 Notwendige Bedingungen für unrestringierte Optimierungsprobleme 33

3.7 Notwendige Bedingungen für restringierte Optimierungsprobleme 36

3.7.1 Verallgemeinerte Fritz-John- und KKT-Bedingungen 41

3.8 Dualität 44

4 Verfahren zur unrestringierten Optimierung **56**

4.1 Das Verfahren von Nelder und Mead 56

4.2 Subgradientenverfahren 63

4.2.1 Das Gradientenverfahren (Verfahren des steilsten Abstiegs) 63

4.2.2 Das Subgradientenverfahren (für konvexe Funktionen) 65

4.2.3 Numerische Berechnung von Subgradienten 73

4.3 ε-Subgradientenverfahren . . . 74
4.3.1 Bestimmung einer Abstiegsrichtung . . . 74
4.3.2 Algorithmus des ε-Subgradientenverfahrens . . . 75
4.3.3 Konvergenz des ε-Subgradientenverfahrens . . . 78
4.4 Bundle-Methode . . . 79
4.4.1 Innere Approximation des ε-Subdifferentials . . . 80
4.4.2 Bestimmung der Suchrichtung . . . 82
4.4.3 Alternative Methoden zur Berechnung einer Suchrichtung . . . 83
4.4.4 Implementierung . . . 87
4.4.5 Konvergenz der Bundle-Methode . . . 91
4.4.6 Erweiterung auf nichtkonvexe Problemstellungen . . . 99

5 Verfahren zur restringierten Optimierung 100
5.1 Penalty-Verfahren . . . 100
5.1.1 Schätzung der Lagrange-Multiplikatoren . . . 102
5.2 Schnittebenenverfahren . . . 104
5.3 Ein sequentielles Linearisierungsverfahren . . . 108
5.3.1 Bestimmung einer Suchrichtung . . . 109
5.3.2 Schrittweitenbestimmung . . . 111
5.3.3 Algorithmus . . . 112

A Anwendungsbeispiele 116
A.1 Ein einfaches Fahrzeugmodell: Differentialgleichungen, Stabilität und Eigenwerte . . . 116

B Definitionen 121
B.1 Trennungssatz . . . 122

C Sonstiges 125
C.1 Linearisierung lokal lipschitzstetiger Funktionen . . . 125
C.2 Abstiegsrichtungen . . . 126
C.3 Linearisierung von restringierten Optimierungsproblemen . . . 127
C.4 Improvement-Funktion . . . 128

Literaturverzeichnis 131

Kapitel 1

Problemstellungen und Klassifikation

Wir beschränken uns in der Klassifikation von Optimierungsproblemen o.B.d.A. auf Minimierungsprobleme.

Allgemeines Optimierungsproblem (OP):

$$\min f(x) \quad \text{unter} \quad x \in X.$$

Darin sei $X \subseteq \mathbb{R}^n$ eine beliebige nichtleere Menge und $f : X \to \mathbb{R}$ eine beliebige Funktion.

Bezeichnungen:

Definition 1.1

- *f wird auch als* **Zielfunktion** *bezeichnet.*
- *Ein Vektor x heißt* **zulässig** *für (OP), falls $x \in X$ gilt. X heißt* **zulässige Menge** *von (OP).*
- *$\hat{x} \in X$ heißt* **globales Minimum** *von (OP), falls*

$$f(\hat{x}) \leq f(x) \quad \forall x \in X. \tag{1.1}$$

  $\hat{x} \in X$ heißt **striktes globales Minimum** *von (OP), falls in (1.1) „$<$“ für alle $x \in X$, $x \neq \hat{x}$ gilt.*

- *$\hat{x} \in X$ heißt* **lokales Minimum** *von (OP), falls es eine Umgebung*

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

  gibt mit

$$f(\hat{x}) \leq f(x) \quad \forall x \in X \cap U_\varepsilon(\hat{x}). \tag{1.2}$$

  $\hat{x} \in X$ heißt **striktes lokales Minimum** *von (OP), falls in (1.2) „$<$“ für alle $x \in X \cap U_\varepsilon(\hat{x})$, $x \neq \hat{x}$ gilt.*

Spezialfälle:

Ein unrestringiertes Problem liegt vor, falls $X = \mathbb{R}^n$ gilt:

Unrestringiertes Optimierungsproblem (UOP):

$$\min f(x) \quad \text{unter} \quad x \in \mathbb{R}^n.$$

Darin sei $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ eine beliebige Funktion.

Häufig treten konvexe Problem auf:

Konvexes Optimierungsproblem (KOP):

$$\min f(x) \quad \text{unter} \quad x \in X.$$

Darin sei $X \subseteq \mathbb{R}^n$ eine nichtleere konvexe Menge und $f : X \to \mathbb{R}$ eine konvexe Funktion.

Lineare Optimierungsprobleme stellen einen wichtigen Spezialfall konvexer Problem dar:

Lineares Optimierungsproblem (LOP) **in Normalform**:

$$\min c^\top x \quad \text{unter} \quad Ax = b,\ x \geq 0.$$

Darin seien $x, c \in \mathbb{R}^n$ und $b \in \mathbb{R}^m$ Vektoren und $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ eine Matrix.

Häufig wird die Menge X in (OP) durch endlich viele Gleichungen und Ungleichungen beschrieben:

Standard Optimierungsproblem (SOP):

$$\min f(x) \quad \text{unter} \quad x \in X$$

mit

$$X = \{x \in \mathbb{R}^n \mid g_i(x) \leq 0,\ i = 1, \ldots, m,\ h_j(x) = 0,\ j = 1, \ldots, p\}.$$

Darin seien $f : D \to \mathbb{R}$, $g_i : D \to \mathbb{R}$, $i = 1, \ldots, m$ und $h_j : D \to \mathbb{R}$, $j = 1, \ldots, p$ mit $X \subseteq D$ beliebige Funktionen.

In der Praxis spielen differenzierbare Problemstellungen eine grosse Rolle:

© 2003 by M. Gerdts

Differenzierbares Optimierungsproblem (DOP):

$$\min f(x) \quad \text{unter} \quad x \in X$$

mit

$$X = \{x \in \mathbb{R}^n \mid g_i(x) \leq 0,\ i = 1, \ldots, m,\ h_j(x) = 0,\ j = 1, \ldots, p\}.$$

Darin seien $f : D \to \mathbb{R}$, $g_i : D \to \mathbb{R}$, $i = 1, \ldots, m$ und $h_j : D \to \mathbb{R}$, $j = 1, \ldots, p$ mit $X \subseteq D$ und einer offenen Menge D **differenzierbare** Funktionen.

Es treten auch Probleme mit diskreten Optimierungsvariablen auf.

Ganzzahliges Optimierungsproblem (GOP):

$$\min f(x) \quad \text{unter} \quad x \in X$$

mit

$$X = \{x \in \mathbb{Z}^n \mid g_i(x) \leq 0,\ i = 1, \ldots, m,\ h_j(x) = 0,\ j = 1, \ldots, p\}.$$

Darin seien $f : \mathbb{Z} \to \mathbb{R}$, $g_i : \mathbb{Z} \to \mathbb{R}$, $i = 1, \ldots, m$ und $h_j : \mathbb{Z} \to \mathbb{R}$, $j = 1, \ldots, p$ Funktionen.

Bemerkung 1.1

- *Mit Ausnahme der Formulierung (LOP) sind alle Problemstellungen formal nichtlinear.*
- *Sind die Funktionen f und g_i, $i = 1, \ldots, m$ konvex und h_j, $j = 1, \ldots, p$ affin linear in (SOP), so ist (SOP) ein konvexes Optimierungsproblem.*
- *Sind die Funktionen f, g_i, $i = 1, \ldots, m$ und h_j, $j = 1, \ldots, p$ in (SOP) affin linear, so liegt ein lineares Optimierungsproblem vor (nicht notwendig in Normalform).*
- *Die Darstellung der verschiedenen Optimierungsprobleme ist nicht vollständig. So gibt es beispielsweise auch unendlichdimensionale Optimierungsprobleme, Vektoroptimierungsprobleme sowie Mischformen der oben dargestellten Problemformen.*

In dieser Vorlesung beschäftigen wir uns mit **unrestringierten Optimierungsproblemen** (UOP) und **Optimierungsproblemen in Standardform** (SOP), wobei die auftretenden Funtionen nichtdifferenzierbar sind. Allerdings werden bei Bedarf gewisse Zu-

© 2003 by M. Gerdts

satzforderungen – etwa Stetigkeit oder Lipschitzstetigkeit – an die auftretenden Funktionen gestellt.

© 2003 by M. Gerdts

Kapitel 2

Beispiele für nichtdifferenzierbare Problemstellungen

2.1 Exakte L1-Penaltyfunktion

Ein Ansatz zur Lösung von Optimierungsproblemen in Standardform (SOP) besteht darin, das Problem (SOP) auf ein unrestringiertes Optimierungsproblem (UOP) zurückzuführen. Dazu wird eine geeignete Hilfsfunktion definiert:

$$l_1(x;\alpha) = f(x) + \alpha \sum_{i=1}^{m} \max\{0, g_i(x)\} + \alpha \sum_{j=1}^{p} |h_j(x)|. \tag{2.1}$$

Die Funktion $l_1(x;\alpha)$ heißt **exakte l_1-Penaltyfunktion**. Sie bestraft das Verlassen des zulässigen Bereichs. Die Bezeichnung exakt folgt aus der Tatsache, daß für alle hinreichend großen $\alpha > 0$ und unter geeigneten Bedingungen an die Restriktionen g_i und h_j die lokalen Minimalstellen von (SOP) auch lokale Minimalstellen von l_1 bzgl. x sind.
Anstatt das Problem (SOP) zu lösen, wird daher die Funktion l_1 bzgl. $x \in \mathbb{R}^n$ mit einem geeigneten Parameter $\alpha > 0$ minimiert. Allerdings ist $l_1(x;\alpha)$ i.a. **nicht differenzierbar bzgl.** x, selbst wenn g_i und h_j differenzierbar sind.

Beispiel 2.1

Die Abbildung 2.1 zeigt die l_1-Penaltyfunktion für das Problem

$$\begin{aligned} f(x,y) &= (x-2)^2 + (y-3)^2, \\ h(x,y) &= y + \frac{x}{2} - \frac{1}{2}, \\ g_1(x,y) &= y + 2x^2 - 2, \\ g_2(x,y) &= x^2 - y - 1, \end{aligned}$$

für verschiedene Werte von α.

Bemerkung 2.1

Alternativ können auch die exakte l_∞-Penaltyfunktion

$$l_\infty(x;\alpha) = f(x) + \alpha \max\{0, g_1(x), \ldots, g_m(x), |h_1(x)|, \ldots, |h_p(x)|\},$$

die exakte l_2-Penaltyfunktion

$$l_2(x;\alpha) = f(x) + \alpha \left(\sum_{i=1}^{m} (\max\{0, g_i(x)\})^2 + \sum_{j=1}^{p} h_j(x)^2 \right)^{1/2}$$

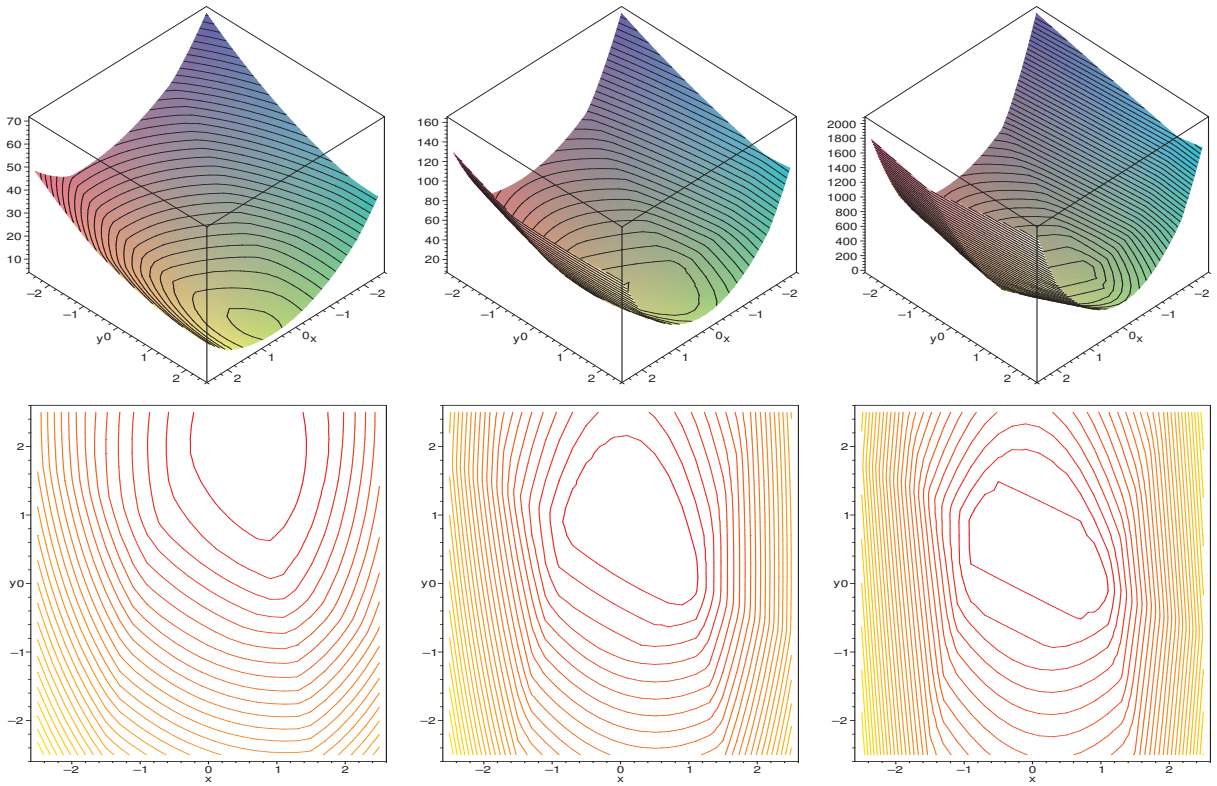


Abbildung 2.1: 3D-Darstellung (oben) und Kontourlinienen (untern) der l_1-Penaltyfunktion für $\alpha = 1$ (links), $\alpha = 28/5$ (mitte) und $\alpha = 100$ (rechts).

oder allgemein die exakte l_q-Penaltyfunktion

$$l_q(x;\alpha) = f(x) + \alpha \left(\sum_{i=1}^{m} (\max\{0, g_i(x)\})^q + \sum_{j=1}^{p} h_j(x)^q \right)^{1/q}$$

für $1 \leq q < \infty$ verwendet werden.

Bei den sogenannten **Penalty-Verfahren** kommen auch nicht exakte Penaltyfunktionen zum Einsatz, etwa

$$l(x;\alpha) = f(x) + \frac{\alpha}{2}\|h(x)\|^2 + \frac{\alpha}{2} \sum_{i=1}^{m} (\max\{0, g_i(x)\})^2 .$$

Diese Verfahren setzen lediglich die Stetigkeit von f, g_i und h_j voraus und benötigen keine Restriktionsqualifikationen. Im allgemeinen ist l dann nicht differenzierbar, so daß Verfahren der nichtdifferenzierbaren Optimierung zur Minimierung von l bzgl. x benötigt werden.

© 2003 by M. Gerdts

2.2 Minimalwertfunktion

Die Minimalwertfunktion für lineare Optimierungsprobleme (LOP) ist definiert als

$$w(\delta) := \inf\{c^\top x \mid Ax = b + \delta,\ x \geq 0\}.$$

Sie ist i.a. nicht differenzierbar bzgl. δ.

2.3 Minimaxprobleme

Oft gilt es, das Minimum

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

zu berechnen, wobei

$$f(x) = \max\{f_1(x), f_2(x), \ldots, f_s(x)\}$$

durch das Maximum von differenzierbaren Funktionen f_i, $i = 1, 2, \ldots, s$ gegeben ist. Hierbei ist $f(x)$ i.a. nicht mehr differenzierbar.
Allerdings kann dieses Problem auf das äquivalente differenzierbare Problem

$$\min_{\alpha \in \mathbb{R}, x \in \mathbb{R}^n} \alpha \quad \text{unter} \quad f_i(x) \leq \alpha,\ i = 1, 2, \ldots, s$$

transformiert werden.

2.4 Wirtschaftswissenschaftliche oder ingenieurwissenschaftliche Aufgabenstellungen

2.4.1 Angebotsauswertung

(siehe [BM68])

Es soll eine bestimmte Menge M eines Gutes gekauft werden. Dazu werden Angebote von n Lieferanten eingeholt, wobei kein Lieferant die gewünschte Menge alleine liefern kann, sondern höchstens M_i Einheiten des Gutes. Die Preise $f_i(x_i)$ des i-ten Lieferanten sind i.a. abhängig von der Liefermenge x_i und beinhalten Mengenrabatte. Oft sind die Funktionen f_i lediglich monoton wachsend und nichtlinear, aber nicht differenzierbar. Die Aufgabe des Käufers ist, die Gesamtkosten zu minimieren:

$$\begin{array}{ll} \min_x & \sum_{i=1}^n f_i(x_i) \\ \text{unter} & \sum_{i=1}^n x_i = M, \\ & 0 \leq x_i \leq M_i,\ i = 1, 2, \ldots, n. \end{array}$$

© 2003 by M. Gerdts

2.4.2 Designprobleme

Sei $A(x)$ eine symmetrische $n \times n$-Matrix, die von Designparametern x abhängt. Bei technischen Designproblemen ist die Matrix A z.B. mit der Festigkeit von Materialien verknüpft. Oft besteht die Aufgabe darin, den maximalen Eigenwert von $A(x)$ in Abhängigkeit von x zu minimieren, d.h.

$$\min_x \lambda_{max}(A(x)).$$

Selbst wenn A bzgl. x differenzierbar ist, ist der maximale Eigenwert $\lambda_{max}(A(x))$ im allgemeinen nicht differenzierbar bzgl. x.
Ein ausführlicheres Beispiel findet sich in Anhang A.1.

2.4.3 Ausgleichsprobleme

Sei $f(t, x)$ eine stetig differenzierbare Funktion, die von den n Parametern $x \in \mathbb{R}^n$ abhängt. Es seien $k > n$ Meßwerte gegeben:

t	:	t_1	t_2	$\cdots$	t_k
$f(t,x)$	:	y_1	y_2	$\cdots$	y_k

Nichtdifferenzierbares Ausgleichsproblem zur Bestimmung der Parameter x:

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \max_{i=1,\ldots,k} |y_i - f(t_i, x)|$$

Diese Aufgabenstellung läßt sich zwar als differenzierbares Problem

$$\min_{v \in \mathbb{R}, x \in \mathbb{R}^n} v \quad \text{unter} \quad -v \leq y_i - f(t_i, x) \leq v, \; i = 1, \ldots, k$$

formulieren, jedoch kann es in der Praxis sinnvoller sein, das nichtdifferenzierbare Problem mit geeigneten Methoden zu lösen. Hat man sehr viele Meßwerte (einige Millionen?) so hat das differenzierbare Problem sehr viele Nebenbedingungen (einige Millionen!) und kann daher praktisch als unlösbar bezeichnet werden.

2.5 Dekomposition von linearen Optimierungsproblemen

(siehe [Sho85])

Betrachte das lineare Optimierungsproblem

$$\begin{array}{ll} \text{Minimiere} & c^\top x + d^\top y \\ \text{unter} & Ax + By \leq b, \\ & x \geq 0, \; y \geq 0. \end{array}$$

Hierin sind x, y, c, d und b Vektoren und A und B Matrizen entsprechender Dimensionen.

© 2003 by M. Gerdts

Für ein **festes** x betrachtet man nun das **Teilproblem**

$$\begin{array}{ll} \text{Minimiere} & d^\top y \\ \text{unter} & By \leq b - Ax, \\ & y \geq 0. \end{array}$$

Die Lösung hängt von x ab, etwa

$$g(x) := \min\{d^\top y \mid By \leq b - Ax,\ y \geq 0\}.$$

g ist der Minimalwertfunktion des Teilproblems ähnlich und i.a. nicht differenzierbar. Einsetzen in das ursprüngliche Problem liefert das nichtlineare und i.a. nicht differenzierbare Problem

$$\begin{array}{ll} \text{Minimiere} & c^\top x + g(x) \\ \text{unter} & x \geq 0. \end{array}$$

Analog kann man für allgemeinere Probleme verfahren:

$$\begin{array}{ll} \text{Minimiere} & f(x,y) \\ \text{unter} & g_i(x,y) \leq 0, \quad i = 1,2,\ldots,m. \end{array}$$

Teilproblem für festes x:

$$w(x) := \min_{\{y \mid g_i(x,y) \leq 0, i=1,\ldots,m\}} f(x,y)$$

Einsetzen in Ausgangsproblem:

$$\min_x w(x).$$

2.6 Klassifikationsprobleme und Support-Vector-Machine

(siehe O. Mangasarian: A Finite Newton Method for Classification Problems, Report 01-11, Optimization Methods and Software 17, 2002. Weitere Artikel und Details: http://www.cs.wisc.edu/∼olvi)

Gegeben sei das folgende **Klassifikationsproblem**: Es sollen m Punkte $x_i \in \mathbb{R}^n$, $i = 1,\ldots,m$ in die Klassen $+1$ oder -1 klassifiziert werden, siehe Abbildung. Die Punkte werden in der Matrix $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ zusammengefaßt, d.h. die i-te Zeile von A entspricht dem Punkt x_i.
Die Klassifikation erfolgt mit Hilfe einer Diagonalmatrix $D \in \mathbb{R}^{m\times m}$, die auf ihrer Diagonalen nur die Werte $+1$ oder -1 annimmt. Dabei bedeutet $d_{ii} = +1$, daß Vektor x_i zur Klasse $+1$ gehört. Entsprechend bedeutet $d_{ii} = -1$, daß Vektor x_i zur Klasse -1 gehört.
Das Klassifikationsproblem wird mit Hilfe der **Support-Vector-Machine** gelöst. Diese bestimmt eine trennende Hyperebene

$$w^\top x = \gamma$$

© 2003 by M. Gerdts

und sogenannte Randhyperebenen

$$\begin{aligned} w^\top x &= \gamma + 1, \\ w^\top x &= \gamma - 1, \end{aligned}$$

mit Abstand $2/\|(w,\gamma)\|$, vgl. Abbildung, die die Vektoren der jeweiligen Klassen (zumindest theoretisch) trennen. Diese Randhyperebenen sollen die Vektoren der jeweiligen Klassen trennen, d.h.

$$\begin{aligned} w^\top x_i - \gamma &\geq +1, \text{ falls } x_i \text{ zur Klasse } d_{ii} = +1 \text{ gehört}, \\ w^\top x_i - \gamma &\leq -1, \text{ falls } x_i \text{ zur Klasse } d_{ii} = -1 \text{ gehört}. \end{aligned}$$

In der Praxis wird es i.a. nicht möglich sein, die Punkte tatsächlich zu trennen. Daher werden Fehler $y_i \geq 0$ zugelassen:

$$\begin{aligned} w^\top x_i - \gamma + y_i &\geq +1, \text{ falls } d_{ii} = +1, \\ w^\top x_i - \gamma - y_i &\leq -1, \text{ falls } d_{ii} = -1. \end{aligned}$$

Insgesamt läßt sich das Problem als quadratisches Optimierungsproblem formulieren, in dem der Abstand der Randhyperebenen maximiert bzw. $\|(w,\gamma)\|$ minimiert wird:

$$\begin{array}{ll} \min_{(w,\gamma,y)\in\mathbb{R}^{n+1+m}} & \frac{\nu}{2} y^\top y + \frac{1}{2}(w^\top w + \gamma^2), \\ \text{unter} & D\,(Aw - e\gamma) + y \geq e,\ y \geq 0, \end{array}$$

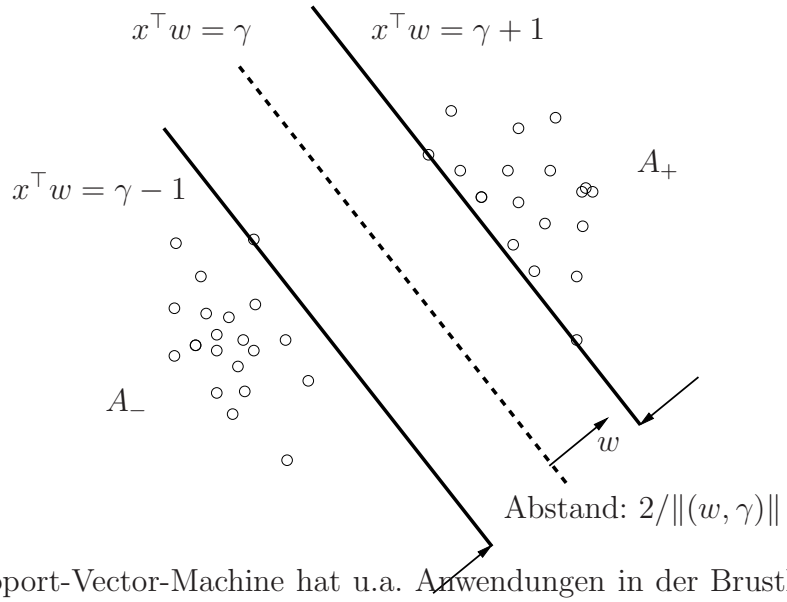
wobei ν einen festen Gewichtungsparameter bezeichnet und $e = (1,\ldots,1)^\top$ ist.

Da m in der Praxis durchaus Werte jenseits der Million annehmen kann (der Autor O. Mangasarian hat sogar einen Test mit einer Milliarde Punkten durchgeführt), wird alternativ das äquivalente einmal stetig differenzierbare Problem

$$\min_{(w,\gamma)\in\mathbb{R}^{n+1}} \frac{\nu}{2} \| \max\{0, e - D\,(Aw - e\gamma)\} \|^2 + \frac{1}{2}(w^\top w + \gamma^2)$$

betrachtet und mit Hilfe eines nichtglatten Newtonverfahrens gelöst.

© 2003 by M. Gerdts



Die Support-Vector-Machine hat u.a. Anwendungen in der Brustkrebstherapie (Klassifizierung der Patienten in solche, die von einer Behandlung mit Chemotherapie profitieren würden bzw. in solche, die nicht profitieren würden.).

2.7 Diskretisierte Optimalsteuerungsprobleme

Betrachte das Optimalsteuerungsproblem

$$\begin{array}{ll} \text{Minimiere} & \int_0^T |u(t)|dt \\ \text{bezüglich} & u, T, \\ \text{unter} & \dot{x}(t) = v(t), \quad x(0) = x_0, x(T) = x_T, \\ & \dot{v}(t) = u(t), \quad v(0) = v_0, v(T) = v_T, \\ & -1 \le u(t) \le 1. \end{array}$$

Dieses Problem ist ein Modell für die zeitminimale Steuerung eines Fahrzeugs bei minimalem Kraftstoffverbrauch u.
Diskretisierung der Differentialgleichungen auf einem Gitter

$$t_i = ih, \quad i = 0, 1, \ldots, N, \; h = \frac{T}{N}$$

mit dem Eulerverfahren gemäß

$$\begin{aligned} x_{i+1} &= x_i + hv_i, \quad i = 0, 1, \ldots, N-1 \\ v_{i+1} &= v_i + hu_i, \quad i = 0, 1, \ldots, N-1, \end{aligned}$$

wobei $x_i \approx x(t_i)$, $v_i \approx v(t_i)$ und $u_i \approx u(t_i)$ Approximationen des Zustands bzw. der Steuerung darstellen und Approximation der Zielfunktion gemäß

$$\int_0^T |u(t)|dt \approx h \sum_{i=0}^{N-1} |u_i|$$

© 2003 by M. Gerdts

liefert das endlichdimensionale, nichtdifferenzierbare Optimierungsproblem

$$
\begin{array}{ll}
\text{Minimiere} & h \sum_{i=0}^{N-1} |u_i| \\
\text{bezüglich} & u_i, i = 0, 1, \ldots, N-1, \\
& x_i, i = 1, 2, \ldots, N, \\
& v_i, i = 1, 2, \ldots, N, \\
& T \\
\text{unter} & \begin{array}{rcll}
x_{i+1} - x_i - hv_i & = & 0, & i = 0, 1, \ldots, N-1, \\
v_{i+1} - v_i - hu_i & = & 0, & i = 0, 1, \ldots, N-1, \\
x_N & = & x_T, & \\
v_N & = & v_T, & \\
u_i & \in & [-1, 1], & i = 0, 1, \ldots, N-1.
\end{array}
\end{array}
$$

© 2003 by M. Gerdts

Kapitel 3

Theorie

3.1 Existenz von Minima

Die Existenz einer Lösung des Minimierungsproblems

$$\min f(x) \quad \text{unter} \quad x \in X$$

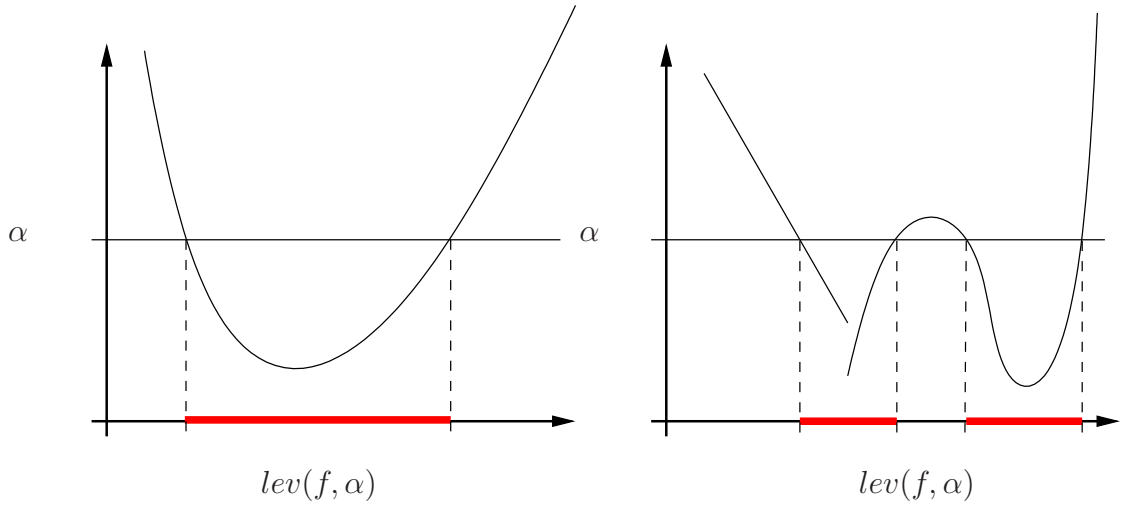
mit kompakter Menge $X \subseteq \mathbb{R}^n$ und stetiger Funktion f ist durch den folgenden aus der Analysis bekannten Satz gesichert.

Satz 3.1 **(Weierstraß)**
Jede stetige Funktion $f : D \to \mathbb{R}$, $D \subseteq \mathbb{R}^n$ nimmt auf einer kompakten Menge $X \subseteq D$ ihr Supremum und ihr Infimum an.

Dieser Satz läßt sich wie folgt verallgemeinern. Dazu benötigen wir den Begriff der Levelmenge oder Niveaumenge.

Definition 3.1 **(Levelmenge, Niveaumenge)**
Die **Levelmenge** *oder* **Niveaumenge** *von $f : D \to \mathbb{R}$, $D \subseteq \mathbb{R}^n$ zum Niveau $\alpha \in \mathbb{R}$ ist definiert als*

$$lev(f, \alpha) = \{x \in D \mid (x, \alpha) \in epi(f)\} = \{x \in D \mid f(x) \leq \alpha\}.$$

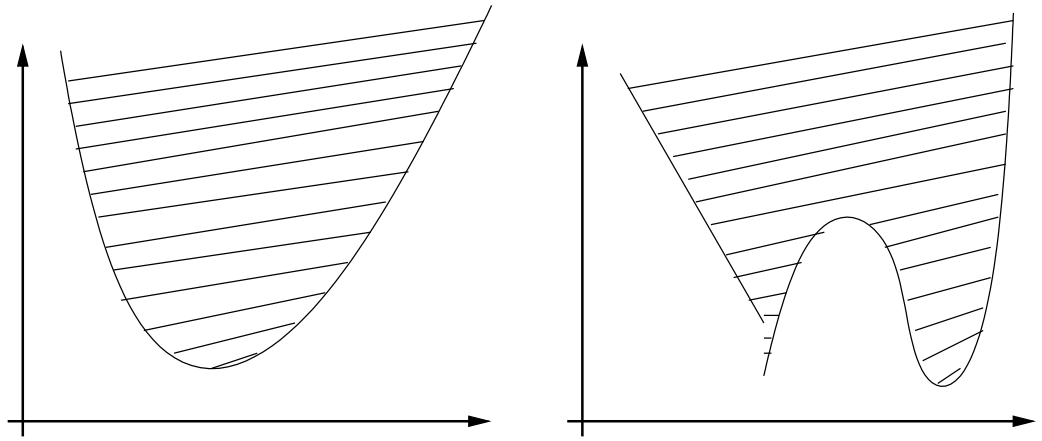


Der Epigraph ist wie üblich definiert:

Definition 3.2 **(Epigraph)**

Der **Epigraph** *einer Funktion* $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ *ist die Menge*

$$epi(f) = \{(x, r) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R} \mid f(x) \leq r\}.$$



Dann gilt:

Satz 3.2

Sei $X \subseteq D \subseteq \mathbb{R}^n$ *und* $f : D \to \mathbb{R}$ *sei stetig auf* X*. Für ein* $w \in X$ *sei die Menge*

$$lev(f, f(w)) \cap X = \{x \in X \mid f(x) \leq f(w)\}$$

nichtleer und kompakt. Dann gibt es mindestens ein globales Minimum von f *auf* X*.*

Beweis: (siehe [Alt02])

Nach dem Satz von Weierstraß gibt es ein $\hat{x} \in lev(f, f(w)) \cap X$ mit $f(\hat{x}) \leq f(x)$ für alle $x \in lev(f, f(w)) \cap X$. Für $x \in X \backslash (lev(f, f(w)) \cap X) = X \backslash lev(f, f(w))$ gilt $f(x) > f(w) \geq f(\hat{x})$. Damit ist $\hat{x}$ Minimum von f auf X. $\square$

© 2003 by M. Gerdts

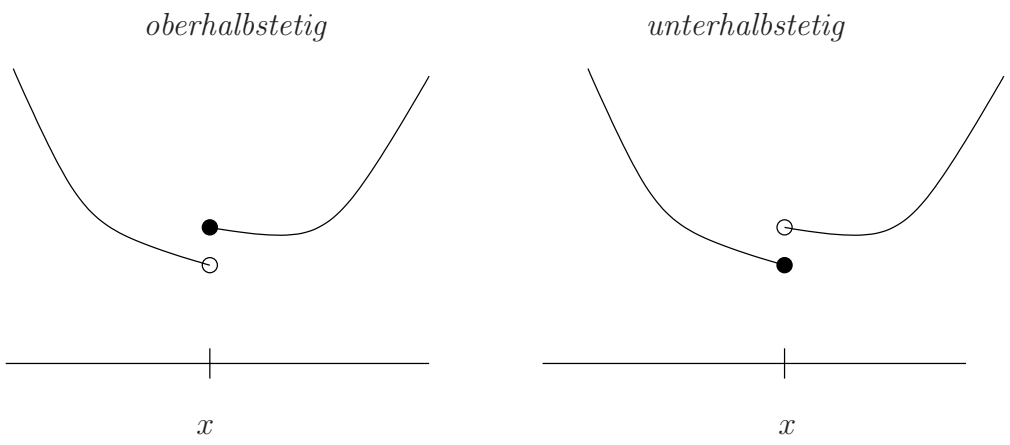
3.2 Stetigkeitsbegriffe

Definition 3.3 **(Ober- und Unterhalbstetigkeit)**
Eine Funktion $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ *heißt* **oberhalbstetig in** x, *falls für jede Folge* $\{x_i\}$ *mit* $x_i \to x$ *gilt*

$$\limsup_{i\to\infty} f(x_i) \le f(x).$$

Eine Funktion $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ *heißt* **unterhalbstetig in** x, *falls für jede Folge* $\{x_i\}$ *mit* $x_i \to x$ *gilt*

$$f(x) \le \liminf_{i\to\infty} f(x_i).$$



In den folgenden Abschnitten werden wir uns hauptsächlich mit lokal lipschitzstetigen Funktionen beschäftigen.

Definition 3.4 **(lokale Lipschitzstetigkeit)**
Sei $D \subseteq \mathbb{R}^n$ *offen. Eine Funktion* $f : D \to \mathbb{R}$ *heißt* **lokal lipschitzstetig in** x **mit Konstante** L, *falls es ein* $\varepsilon > 0$ *gibt mit*

$$|f(y) - f(z)| \le L\|y - z\| \qquad \forall y, z \in U_\varepsilon(x).$$

f *heißt* **lipschitzstetig in** D **mit Konstante** L, *falls*

$$|f(y) - f(z)| \le L\|y - z\| \qquad \forall y, z \in D.$$

Beispiel 3.1
siehe Übung 1

Lipschitzstetige Funktionen sind fast so gut wie differenzierbare Funktionen:

© 2003 by M. Gerdts

Satz 3.3 **(Rademacher)**
Sei $D \subseteq \mathbb{R}^n$ eine offene Menge und $f : D \to \mathbb{R}$ lipschitzstetig in D mit Konstante L. Dann ist f fast überall differenzierbar (d.h. f ist differenzierbar mit Ausnahme in einer Nullmenge).

Der Beweis in [MN92], S. 49, basiert auf dem folgenden Satz.

Satz 3.4
Sei $D \subseteq \mathbb{R}^n$ eine offene Menge und $f : D \to \mathbb{R}$. Falls

$$\limsup_{t \downarrow 0} \left| \frac{f(x+th) - f(x)}{t} \right| < \infty$$

für alle $x \in D$ und $h \in \mathbb{R}^n$, dann ist f fast überall differenzierbar.

Beweis: L. V. Kantorovich: On the method of steepest descent, Dokl. Akad. Nauk SSSR 56 (1947), 233-236.

Eine wichtige Klasse von lokal lipschitzstetigen Funktionen stellen die konvexen Funktionen dar.

Satz 3.5
Seien $D \subseteq \mathbb{R}^n$ konvex und $f : D \to \mathbb{R}$ konvex. Dann ist f für alle $x \in int(D)$ lokal lipschitzstetig.

Beweis: [GK02], S. 327

3.3 Richtungsableitungen

Die gewöhnliche Richtungsableitung ist wie folgt definiert.

Definition 3.5 **(Richtungsdifferenzierbarkeit)**
$f : D \to \mathbb{R}$ mit offener Menge $D \subseteq \mathbb{R}^n$ heißt **richtungsdifferenzierbar** *in x in Richtung $h \in \mathbb{R}^n$, wobei $x + th \in D$ für alle $t \in [0, t_0]$ mit gewissem $t_0 > 0$ sei, falls*

$$f'(x;h) := \lim_{t \downarrow 0} \frac{f(x+th) - f(x)}{t}$$

existiert. $f'(x;h)$ heißt **Richtungsableitung von f in x in Richtung h.**

Ist f stetig differenzierbar in x, so gilt

$$f'(x;h) = \nabla f(x)^\top h, \qquad \nabla f(x) = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}(x), \ldots, \frac{\partial f}{\partial x_n}(x) \right)^\top.$$

© 2003 by M. Gerdts

Für konvexe Funktionen existiert die Richtungsableitung ebenfalls im Inneren des Definitionsbereichs.

Satz 3.6

Seien $D \subseteq \mathbb{R}^n$ offen und konvex und $f : D \to \mathbb{R}$ konvex mit Lipschitzkonstante L in $x \in D$. Dann gelten:

(i) Sei $h \in \mathbb{R}^n$. Der Differenzenquotient

$$\varphi(t) = \frac{f(x+th) - f(x)}{t}$$

ist monoton fallend für $t \downarrow 0$, d.h. es gilt $\varphi(t_1) \leq \varphi(t_2)$ für alle $0 < t_1 < t_2$ mit $x + t_2 h \in D$, vgl. Abbildung 3.1.

(ii) Die Richtungsableitung von f in x existiert in jeder Richtung $h \in \mathbb{R}^n$ und erfüllt

$$f'(x;h) = \inf_{t>0} \frac{f(x+th) - f(x)}{t}.$$

(iii) Die Abbildung $h \mapsto f'(x;h)$ ist **positiv homogen**, *d.h. es gilt*

$$f'(x;\lambda h) = \lambda f'(x;h) \qquad \forall \lambda \geq 0,$$

und **subadditiv**, *d.h. es gilt*

$$f'(x;h_1+h_2) \leq f'(x;h_1) + f'(x;h_2) \qquad \forall h_1, h_2 \in \mathbb{R}^n,$$

und es gilt

$$|f'(x;h)| \leq L\|h\|.$$

(iv) Für $h \in \mathbb{R}^n$ gilt $-f'(x;-h) \leq f'(x;h)$.

(v) $f'(x;h)$ ist oberhalbstetig als Funktion von $(x;h)$ und lipschitzstetig mit Konstante L als Funktion von h auf $\mathbb{R}^n$.

Beweis: (vgl. [GK02], S.329, und [MN92], S. 11)

(i) Es sei $0 < t_1 < t_2$, $x + t_2 h \in D$. Aus der Konvexität von f folgt

$$\begin{aligned} f(x+t_1h) &= f\left(\frac{t_1}{t_2}(x+t_2h) + \left(1 - \frac{t_1}{t_2}\right)x\right) \\ &\leq \frac{t_1}{t_2} f(x+t_2h) + \left(1 - \frac{t_1}{t_2}\right) f(x). \end{aligned}$$

Es folgt

$$\varphi(t_1) = \frac{f(x+t_1h) - f(x)}{t_1} \leq \frac{f(x+t_2h) - f(x)}{t_2} = \varphi(t_2).$$

© 2003 by M. Gerdts

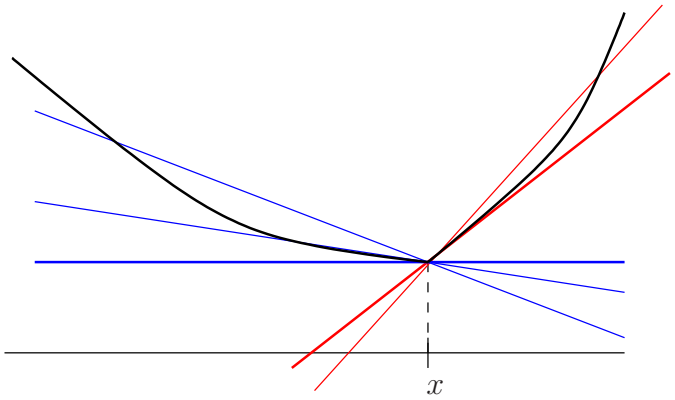


Abbildung 3.1: Monotonie der Differenzenquotienten für konvexe Funktion

(ii) Seien $h \in \mathbb{R}^n$ und $t, \tau > 0$ mit $x - \tau h \in D$ und $x + th \in D$ gegeben. Aus der Konvexität von f folgt

$$\begin{aligned} f(x) &= f\left(\frac{t}{t+\tau}(x-\tau h) + \frac{\tau}{t+\tau}(x+th)\right) \\ &\leq \frac{t}{t+\tau} f(x-\tau h) + \frac{\tau}{t+\tau} f(x+th) \end{aligned}$$

Es folgt

$$\varphi(t) = \frac{f(x+th) - f(x)}{t} \geq \frac{f(x) - f(x-\tau h)}{\tau} =: C.$$

Damit ist $\varphi(t)$ nach unten durch C beschränkt und nach (i) monoton fallend für $t \downarrow 0$. Es folgt die Existenz von $f'(x;h) = \lim_{t\downarrow 0} \varphi(t)$. Da q monoton fallend ist, gilt $f'(x;h) = \inf_{t>0} \varphi(t)$.

(iii) Die letzte Behauptung folgt aus der lokalen Lipschitzstetigkeit von f:

$$|f'(x;h)| \leq \lim_{t\downarrow 0} \frac{|f(x+th) - f(x)|}{t} \leq \lim_{t\downarrow 0} \frac{L\|x+th-x\|}{t} = L\|h\|.$$

Positive Homogenität: Sei $\lambda > 0$.

$$\begin{aligned} f'(x;\lambda h) &= \lim_{t\downarrow 0} \frac{f(x+t\lambda h) - f(x)}{t} \\ &= \lim_{t\downarrow 0} \lambda \frac{f(x+t\lambda h) - f(x)}{\lambda t} \\ &= \lambda \cdot \lim_{t\downarrow 0} \frac{f(x+t\lambda h) - f(x)}{\lambda t} \\ &= \lambda f'(x;h). \end{aligned}$$

Subadditivität: Seien $h_1, h_2 \in \mathbb{R}^n$ gegeben.

$$f'(x;h_1+h_2) = \lim_{t\downarrow 0} \frac{f(x+t(h_1+h_2)) - f(x)}{t}$$

© 2003 by M. Gerdts

$$
\begin{aligned}
&= \lim_{t\downarrow 0} \frac{f(\frac{1}{2}(x+2th_1)+\frac{1}{2}(x+2th_2))-f(x)}{t} \\
&\leq \lim_{t\downarrow 0} \frac{f(x+2th_1)-f(x)}{2t} + \lim_{t\downarrow 0} \frac{f(x+2th_2)-f(x)}{2t} \\
&= f'(x;h_1)+f'(x;h_2).
\end{aligned}
$$

(iv) Gemäß (iii) gilt

$$\frac{1}{2}f'(x;h)+\frac{1}{2}f'(x;-h) \geq f'(x;\frac{1}{2}h-\frac{1}{2}h) = 0.$$

Es folgt $-f'(x;-h) \leq f'(x;h)$.

(v) siehe [MN92] □

Für lipschitzstetige Funktionen, muß die Richtungsableitung nicht notwendig existieren.

Beispiel 3.2

siehe Übung 1.

Für lokal lipschitzstetige Funktionen hat sich die folgende Clarke'sche Definition einer Richtungsableitung als sinnvoll erwiesen:

Definition 3.6 **(verallgemeinerte Richtungsableitung nach Clarke)**

Sei f lokal lipschitzstetig in $x \in \mathbb{R}^n$ mit Lipschitzkonstante L. Die **verallgemeinerte Richtungsableitung von f in x in Richtung $h \in \mathbb{R}^n$** *ist definiert als*

$$f^o(x;h) = \limsup_{\substack{y\to x\\ t\downarrow 0}} \frac{f(y+th)-f(y)}{t}.$$

Mit der lokalen Lipschitzstetigkeit von f in x gilt in einer Umgebung von x

$$\left|\frac{f(y+th)-f(y)}{t}\right| \leq \frac{L\|y+th-y\|}{|t|} = L\|h\|. \tag{3.1}$$

Damit ist die verallgemeinerte Richtungsableitung wohldefiniert.

Beispiel 3.3

Die verallgemeinerte Richtungsableitung von $f(x) = -|x|$ in $x = 0$ lautet

$$f^o(x;h) = |h|$$

und nicht etwa $-|h|$, welches die gewöhnliche Richtungsableitung darstellt. Für $f(x) = |x|$ ergibt sich ebenfalls $f^o(x;h) = |h|$. In diesem Fall stimmt sie mit der gewöhnlichen Richtungsableitung überein.

Eigenschaften der verallgemeinerten Richtungsableitung:

Satz 3.7

Sei f lokal lipschitzstetig in $x \in \mathbb{R}^n$ mit Konstante L. Dann gelten:

© 2003 by M. Gerdts

(i) Die Abbildung $h \mapsto f^o(x;h)$ ist für alle $h \in \mathbb{R}^n$ positiv homogen, d.h. es gilt

$$f^o(x;\lambda h) = \lambda f^o(x;h) \qquad \forall \lambda \geq 0,$$

und subadditiv, d.h. es gilt

$$f^o(x;h_1+h_2) \leq f^o(x;h_1) + f^o(x;h_2) \qquad \forall h_1, h_2 \in \mathbb{R}^n$$

und es gilt

$$|f^o(x;h)| \leq L\|h\|$$

(ii) $f^o(x;h)$ ist oberhalbstetig als Funktion von $(x;h)$ und lipschitzstetig mit Konstante L als Funktion von h.

(iii) $f^o(x;-h) = (-f)^o(x;h)$.

Beweis: ([Cla83], S. 26, [MN92], S. 30)
Gemäß (3.1) ist die Richtungsableitung wohldefiniert.

(i) Positive Homogenität: Sei $\lambda > 0$.

$$\begin{aligned} f^o(x;\lambda h) &= \limsup_{y\to x, t\downarrow 0} \frac{f(y+t\lambda h) - f(y)}{t} \\ &= \limsup_{y\to x, t\downarrow 0} \lambda \frac{f(x+t\lambda h) - f(x)}{\lambda t} \\ &= \lambda \cdot \limsup_{y\to x, t\downarrow 0} \frac{f(x+t\lambda h) - f(x)}{\lambda t} \\ &= \lambda f^o(x;h). \end{aligned}$$

Subadditivität: Seien $h_1, h_2 \in \mathbb{R}^n$ gegeben.

$$\begin{aligned} f^o(x;h_1+h_2) &= \limsup_{y\to x, t\downarrow 0} \frac{f(y+t(h_1+h_2)) - f(y)}{t} \\ &\leq \underbrace{\limsup_{y\to x, t\downarrow 0} \frac{f(y+th_1+th_2) - f(y+th_2)}{t}}_{=f^o(x;h_1)} + \underbrace{\limsup_{y\to x, t\downarrow 0} \frac{f(y+th_2) - f(y)}{t}}_{=f^o(x;h_2)} \\ &= f^o(x;h_1) + f^o(x;h_2). \end{aligned}$$

(ii) Seien $\{x_i\}$ und $\{h_i\}$ Folgen mit mit $x_i \to x$ und $h_i \to h$. Für jedes i gibt es $y_i \in \mathbb{R}^n$ und $t_i > 0$ mit

$$\|y_i - x_i\| + t_i < \frac{1}{i},$$

© 2003 by M. Gerdts

so daß per Definition des lim sup gilt

$$\begin{aligned} f^o(x_i;h_i) - \frac{1}{i} &\leq \frac{f(y_i+t_ih_i)-f(y_i)}{t_i} \\ &= \frac{f(y_i+t_ih)-f(y_i)}{t_i} + \frac{f(y_i+t_ih_i)-f(y_i+t_ih)}{t_i}. \end{aligned}$$

Der letzte Term ist wegen der lokalen Lipschitzstetigkeit durch $L\|h_i - h\|$ beschränkt. Grenzübergang liefert

$$\limsup_{i\to\infty} f^o(x_i;h_i) \leq f^o(x;h)$$

und somit die Oberhalbstetigkeit.

Seien nun $h_1, h_2 \in \mathbb{R}^n$ gegeben. Dann folgt aus der lokalen Lipschitzstetigkeit von f die Beziehung

$$f(y+th_1) - f(y) \leq f(y+th_2) - f(y) + L\|h_1 - h_2\|t$$

für y in einer Umgebung von x und t nahe 0. Division durch t und Grenzübergang liefert

$$f^o(x;h_1) - f^o(x;h_2) \leq L\|h_1 - h_2\|.$$

Vertauscht man h_1 und h_2, folgt daraus die Lipschitzstetigkeit von $f^o(x;h)$ bzgl. h.

(iii) Es ist

$$\begin{aligned} f^o(x;-h) &= \limsup_{y\to x, t\downarrow 0} \frac{f(y-th)-f(y)}{t} \\ &\overset{v:=y-th}{=} \limsup_{v\to x, t\downarrow 0} \frac{(-f)(v+th)-(-f)(v)}{t} \\ &= (-f)^o(x;h). \end{aligned}$$

□

Es zeigt sich, daß die Clarke'sche Richtungsableitung und die gewöhnliche Richtungsableitung für konvexe Funktionen übereinstimmen:

Satz 3.8

Sei $D \subseteq \mathbb{R}^n$ eine offene und konvexe Menge, $x \in D$ und $f : D \to \mathbb{R}$ konvex. Dann gilt

$$f'(x;h) = f^o(x;h) \qquad \forall h \in \mathbb{R}^n.$$

Beweis: (siehe [Cla83], S. 36, [MN92], S.35)

Sei $x \in D$. Die Richtungsableitung $f'(x;h)$ existiert gemäß Satz 3.6, da f konvex ist. Aus der Definition der Clarke'schen Richtungsableitung folgt sofort

$$f^o(x;h) \geq f'(x;h) \qquad \forall h \in \mathbb{R}^n.$$

© 2003 by M. Gerdts

Andererseits gilt für festes $\delta > 0$ die Beziehung

$$\begin{aligned} f^o(x;h) &= \limsup_{y\to x, t\downarrow 0} \frac{f(y+th)-f(y)}{t} \\ &= \lim_{\varepsilon\downarrow 0} \sup_{\|y-x\|<\varepsilon\delta} \sup_{0<t<\varepsilon} \frac{f(y+th)-f(y)}{t}. \end{aligned}$$

Gemäß Satz 3.6 (i) ist der Differenzenquotient als Funktion von t monoton wachsend, d.h. das innerste Supremum ist durch $t = \varepsilon$ gegeben. Damit folgt

$$f^o(x;h) = \lim_{\varepsilon\downarrow 0} \sup_{\|y-x\|<\varepsilon\delta} \frac{f(y+\varepsilon h)-f(y)}{\varepsilon}.$$

Aus der Lipschitzstetigkeit von f folgt für $y \in U_{\varepsilon\delta}(x)$ die Beziehung

$$\begin{aligned} \left|\frac{f(y+\varepsilon h)-f(y)}{\varepsilon} - \frac{f(x+\varepsilon h)-f(x)}{\varepsilon}\right| &\le \left|\frac{f(y+\varepsilon h)-f(x+\varepsilon h)}{\varepsilon}\right| + \left|\frac{f(x)-f(y)}{\varepsilon}\right| \\ &\le \frac{2L}{\varepsilon}\|y-x\| \\ &\le 2L\delta. \end{aligned}$$

Also

$$f^o(x;h) \le \lim_{\varepsilon\downarrow 0} \frac{f(x+\varepsilon h)-f(x)}{\varepsilon} + 2L\delta = f'(x;h) + 2L\delta.$$

Da $\delta > 0$ beliebig war, folgt damit

$$f^o(x;h) \le f'(x;h).$$

□

Im Hinblick auf Bundle-Methoden benötigen wir eine Abschwächung der Richtungsableitung für konvexe Funktionen:

Definition 3.7 **(ε-Richtungsableitung für konvexe Funktionen)**
Sei $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ konvex. Die **ε-Richtungsableitung von f in x in Richtung h** *ist definiert als*

$$f'_\varepsilon(x;h) = \inf_{t>0} \frac{f(x+th)-f(x)+\varepsilon}{t}.$$

Eigenschaften der ε-Richtungsableitung für konvexe Funktionen:

Satz 3.9
Sei $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ konvex. Dann gelten für alle x:

© 2003 by M. Gerdts

(i) Die Abbildung $h \mapsto f'_\varepsilon(x;h)$ ist positiv homogen und subadditiv mit

$$|f'_\varepsilon(x;h)| \leq L\|h\|,$$

wobei L die Lipschitzkonstante der konvexen und damit lokal lipschitzstetigen Funktion f bezeichnet.

(ii) $f'_\varepsilon(x;h)$ ist oberhalbstetig als Funktion von $(x;h)$ und lipschitzstetig mit Konstante L als Funktion von h in $\mathbb{R}^n$.

(iii) $-f'_\varepsilon(x;-h) \leq f'_\varepsilon(x;h)$.

(iv) Es gilt $f'(x;h) \leq f'_\varepsilon(x;h)$ für jedes $\varepsilon \geq 0$.

Beweis: (i)-(iii): analog zum Beweis von Satz 3.7 (vgl. [MN92], S. 53, [GK02], S. 375 ff.)
(iv) folgt mit Satz 3.6 (i) aus

$$f'(x;h) \leq \frac{f(x+th)-f(x)}{t} \leq \frac{f(x+th)-f(x)+\varepsilon}{t}.$$

□

Bemerkung 3.1

Es gibt auch alternative Definitionen von Richtungsableitungen für lipschitzstetige Funktionen.

- **Richtungsableitungen nach Dini:**
  Sei f lokal lipschitzstetig in $x \in \mathbb{R}^n$. Die **obere Richtungsableitung von f in x in Richtung $h \in \mathbb{R}^n$ nach Dini** *ist definiert als*

  $$f^+(x;h) = \limsup_{t\downarrow 0} \frac{f(x+th)-f(x)}{t}.$$

  Die **untere Richtungsableitung von f in x in Richtung $h \in \mathbb{R}^n$ nach Dini** *ist definiert als*

  $$f^-(x;h) = \liminf_{t\downarrow 0} \frac{f(x+th)-f(x)}{t}.$$

  Allerdings haben die Dini-Richtungsableitungen keine schönen Eigenschaften. So gelten für die Richtungsableitungen nach Dini i.a.

  $$\begin{aligned} f^\pm(x;h) &\neq \max\{\lambda^\top h \mid \lambda \in \partial_\pm f(x)\}, \\ \partial_\pm(f+g) &\not\subseteq \partial_\pm f(x) + \partial_\pm g(x). \end{aligned}$$

  Hierin bezeichnen $\partial_\pm f$ bzw. $\partial_\pm g$ die Dini-Subdifferentiale (eine formale Definition von Subdifferentialen erfolgt im nächsten Abschnitt). Gegenbeispiele sind die Funktionen $f(x) = -|x|$ und $g(x) = |x|$.

© 2003 by M. Gerdts

Die Dini-Subdifferentiale sind kompakt und konvex, können aber leer sein, betrachte z.B. $f(x) = -|x|$.

- **Richtungsableitung nach Michel-Penot**:

$$f^{\square}(x;h) = \sup_{u\in\mathbb{R}^n} \limsup_{t\downarrow 0} \frac{f(x+th+tu) - f(x+tu)}{t}.$$

Diese Richtungsableitung besitzt ähnliche Eigenschaften wie die Clarke'sche Richtungsableitung, vgl. [BL00].

Es gelten $f^-(x;\cdot) \le f^+(x;\cdot) \le f^{\square}(x;\cdot) \le f^o(x;\cdot) \le L\|\cdot\|$ *und* $\partial_- f(x) \subseteq \partial_+ f(x) \subseteq \partial_{\square} f(x) \subseteq \partial_o f(x)$.

3.4 Subdifferentiale

Jeder Richtungsableitung $f^*(x;h)$ kann die Menge

$$\partial_* f(x) := \{\lambda \in \mathbb{R}^n \mid f^*(x;h) \ge \lambda^\top h \ \forall h \in \mathbb{R}^n\}$$

zugeordnet werden. Diese Menge wird als **Subdifferential** oder **verallgemeinerter Gradient** bezeichnet. Speziell hat man

Definition 3.8 **(Subdifferential (verallgemeinerter Gradient) nach Clarke)**
Sei $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ *lokal lipschitzstetig in* $x \in \mathbb{R}^n$. *Das* **Subdifferential von** f **in** x *ist definiert als die Menge*

$$\partial_o f(x) = \{\lambda \in \mathbb{R}^n \mid f^o(x;h) \ge \lambda^\top h \text{ für alle } h \in \mathbb{R}^n\}.$$

Jedes Element $\lambda \in \partial_o f(x)$ *heißt* **Subgradient von** f **in** x.

Beispiel 3.4
Betrachte $f(x) = |x|$. *Das Subdifferential von* f *in* 0 *ist*

$$\partial_o f(0) = [-1, 1].$$

Denn es gilt $f^o(0;h) = |h|$ *und somit ist die Bedingung* $f^o(0;h) = |h| \ge \lambda h$ *für alle* h *nur für* $-1 \le \lambda \le 1$ *erfüllt.*
Für die Funktion $g(x) = -|x|$ *ergibt sich ebenfalls das Subdifferential*

$$\partial_o g(0) = [-1, 1].$$

Denn es gilt wiederum $g^o(0;h) = |h|$ *und somit ist die Bedingung* $g^o(0;h) = |h| \ge \lambda h$ *für alle* h *nur für* $-1 \le \lambda \le 1$ *erfüllt.*

© 2003 by M. Gerdts

Würde man in der Definition des Subdifferentials anstatt der Clarkeschen Richtungsableitung beispielsweise die untere Dini-Ableitung verwenden, so wäre das entsprechende Subdifferential von g in 0 leer, denn für die untere Dini-Ableitung ergibt sich $g^-(0;h) = -|h|$ und die Bedingung $g^-(0;h) = -|h| \geq \lambda h$ ist durch kein λ für alle $h \in \mathbb{R}$ erfüllt.

Eigenschaften des Subdifferentials:

Satz 3.10

Sei $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ lokal lipschitzstetig in x mit Konstante L. Dann gelten:

(i) $\partial_o f(x)$ ist eine nichtleere, konvexe und kompakte Menge mit $\partial_o f(x) \subseteq U_L(0)$.

(ii) $f^o(x;h) = \max\{\lambda^\top h \mid \lambda \in \partial_o f(x)\}$ für alle $h \in \mathbb{R}^n$.

(iii) Die Abbildung $\partial_o f(\cdot) : \mathbb{R}^n \to \mathcal{P}(\mathbb{R}^n)$ ist oberhalbstetig.

Beweis: siehe [MN92], S. 33.

Bemerkung 3.2

Man kann zeigen, vgl. [Cla83], daß das Subdifferential auch als

$$\partial_o f(x) = conv\{\lim \nabla f(x_i) \mid x_i \to x,\ x_i \notin S,\ x_i \notin \Omega_f\}$$

dargestellt werden kann, wobei $S \subseteq \mathbb{R}^n$ eine beliebige Nullmenge und Ω_f die Menge der Nichtdifferenzierbarkeitspunkte von f bezeichnen. Beachte, daß lipschitzstetige Funktionen fast überall differenzierbar sind (Satz von Rademacher). Daher ist Ω_f ebenfalls eine Nullmenge.

Für stetig differenzierbare Funktionen, besteht der Subgradient nur aus einem Element – dem Gradienten von f. Daher ist auch die Bezeichnung als verallgemeinerter Gradient gerechtfertigt.

Satz 3.11

Sei $D \subseteq \mathbb{R}^n$ offen und $f : D \to \mathbb{R}$ stetig differenzierbar in x. Dann gilt

$$\partial_o f(x) = \{\nabla f(x)\}$$

Beweis: (vgl. [MN92], S. 35)
Aus der stetigen Differenzierbarkeit folgt, daß die Richtungsableitung von f in x existiert und stetig ist und es gilt $f^o(x;h) = f'(x;h) = \nabla f(x)^\top h$. Die Bedingung $f^o(x;h) = \nabla f(x)^\top h \geq \lambda h$ für alle $h \in \mathbb{R}^n$ ist nur für $\lambda = \nabla f(x)$ erfüllt. □

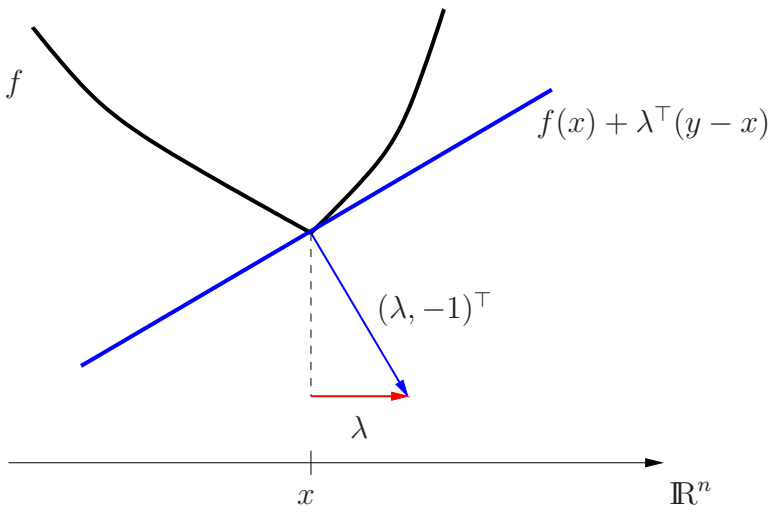
Für konvexe Funktionen wird der Subgradient i.a. wie folgt definiert.

© 2003 by M. Gerdts

Definition 3.9 **(Subdifferential für konvexe Funktionen)**
Sei $D \subseteq \mathbb{R}^n$ eine konvexe und offene Menge und $f : D \to \mathbb{R}$ konvex. Das **Subdifferential für die konvexe Funktion f in x** *ist definiert als die Menge*

$$\partial_c f(x) = \{\lambda \in \mathbb{R}^n \mid f(y) \geq f(x) + \lambda^\top (y - x) \text{ für alle } y \in D\}.$$

Jedes Element $\lambda \in \partial_c f(x)$ heißt **Subgradient von f in x.**



Es zeigt sich wiederum, daß das Clarke'sche Subdifferential und das Subdifferential für konvexe Funktionen für konvexe Funktionen identisch sind.

Satz 3.12
Sei $D \subseteq \mathbb{R}^n$ eine offene und konvexe Menge, $x \in D$ und $f : D \to \mathbb{R}$ konvex. Dann gilt

$$\partial_c f(x) = \{\lambda \in \mathbb{R}^n \mid f'(x; h) \geq \lambda^\top h,\ \forall h \in \mathbb{R}^n\} = \partial_o f(x).$$

Beweis: (siehe [GK02], S. 331)
Die Beziehung

$$\{\lambda \in \mathbb{R}^n \mid f'(x; h) \geq \lambda^\top h,\ \forall h \in \mathbb{R}^n\} = \partial_o f(x)$$

ist wegen Satz 3.8 klar, da für konvexe Funktionen $f^o(x; h) = f'(x; h)$ gilt. Insbesondere existiert die Richtungsableitung nach Satz 3.6. Es ist $\lambda \in \partial_c f(x)$, falls

$$f(y) \geq f(x) + \lambda^\top (y - x) \qquad \forall y \in D.$$

Mit $y = x + th$ ist dies gleichbedeutend mit

$$\frac{f(x + th) - f(x)}{t} \geq \lambda^\top h \qquad \forall h \in \mathbb{R}^n,\ x + th \in D.$$

© 2003 by M. Gerdts

Wegen $f'(x;h) = \inf_{t>0} \frac{f(x+th)-f(x)}{t}$ (vgl. Satz 3.6 (ii)) ist dies äquivalent mit

$$f'(x;h) \geq \lambda^\top h \qquad \forall h \in \mathbb{R}^n.$$

□

Da das Clarke'sche Subdifferential und das Subdifferential für konvexe Funktionen im konvexen Fall identisch sind, vererben sich auch die Eigenschaften des Clarke'schen Subdifferentials:

Hilfssatz 3.1

Sei $D \subseteq \mathbb{R}^n$ eine konvexe und offene Menge, $x \in D$ und $f : D \to \mathbb{R}$ konvex. Dann gelten für alle x:

(i) $f'(x;h) = \max\{\lambda^\top h \mid \lambda \in \partial_c f(x)\}$ *für alle* $h \in \mathbb{R}^n$.

(ii) $\partial_c f(x) = \{\lambda \in \mathbb{R}^n \mid f'(x;h) \geq \lambda^\top h$ *für alle* $h \in \mathbb{R}^n\}$

(iii) $\partial_c f(x)$ *ist eine nichtleere, konvexe und kompakte Menge mit* $\partial_c f(x) \subseteq U_L(0)$, *wobei* L *die Lipschitzkonstante von* f *in* x *bezeichnet.*

(iv) Die Abbildung $\partial_c(\cdot) : \mathbb{R}^n \to \mathcal{P}(\mathbb{R}^n)$ *ist oberhalbstetig, d.h. für* $y_i \to x$ *und* $\lambda_i \in \partial_c f(y_i)$, *folgt, daß jeder Häufungspunkt* λ *von* $\{\lambda_i\}$ *in* $\partial_c f(x)$ *ist.*

Beweis: folgt aus Satz 3.10

Definition 3.10 **(ε-Subdifferential für konvexe Funktionen)**

Sei $\varepsilon \geq 0$ *und* $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ *konvex. Das* **ε-Subdifferential von f in x** *ist definiert als die Menge*

$$\partial_\varepsilon f(x) = \left\{\lambda \in \mathbb{R}^n \mid f(y) \geq f(x) + \lambda^\top(y-x) - \varepsilon \text{ für alle } y \in \mathbb{R}^n\right\}.$$

Jedes Element $\lambda \in \partial_\varepsilon f(x)$ *heißt* **ε-Subgradient von f in x.**

Eigenschaften des ε-Subdifferentials für konvexe Funktionen:

Satz 3.13

Sei $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ *konvex. Dann gelten:*

(i) $\partial_0 f(x) = \partial_c f(x)$.

(ii) $\varepsilon_1 \leq \varepsilon_2 \qquad \Rightarrow \qquad \partial_{\varepsilon_1} f(x) \subseteq \partial_{\varepsilon_2} f(x)$

(iii) $f'_\varepsilon(x;h) = \max\{\lambda^\top h \mid \lambda \in \partial_\varepsilon f(x)\} \qquad \forall h \in \mathbb{R}^n$.

(iv) $\partial_\varepsilon f(x) = \{\lambda \in \mathbb{R}^n \mid f'_\varepsilon(x;h) \geq \lambda^\top h$ *für alle* $h \in \mathbb{R}^n\}$.

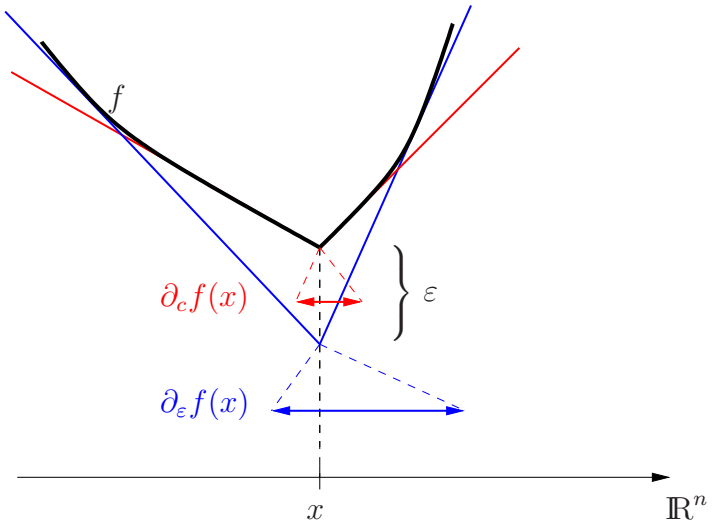
© 2003 by M. Gerdts

(v) $\partial_\varepsilon f(x)$ *ist nichtleer, konvex und kompakt mit* $\|\lambda\| \leq L$ *für alle* $\lambda \in \partial_\varepsilon f(x)$.

(vi) Die Abbildung $\partial_\varepsilon f(\cdot) : \mathbb{R}^n \to \mathcal{P}(\mathbb{R}^n)$ *ist oberhalbstetig.*

Beweis: (siehe [MN92], S. 54)

Vergleich des Subdifferentials und des ε-Subdifferentials:



Das ε-Subdifferential enthält Informationen über die Subgradienten in einer gewissen Umgebung von x:

Satz 3.14

Sei $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ *konvex mit Lipschitzkonstante* L *in* x. *Sei* $\varepsilon \geq 0$. *Dann gilt*

$$\partial_c f(y) \subseteq \partial_\varepsilon f(x) \qquad \forall y \in U_{\frac{\varepsilon}{2L}}(x).$$

Beweis: (vgl. [MN92], S. 54)
Sei $\lambda \in \partial_c f(y)$ und $y \in U_{\frac{\varepsilon}{2L}}(x)$. Dann gilt für alle $z \in \mathbb{R}^n$:

$$\begin{aligned} f(z) &\geq f(y) + \lambda^\top (z-y) \\ &= f(x) + \lambda^\top (z-x) - (f(x) - f(y) + \lambda^\top (z-x) - \lambda^\top (z-y)). \end{aligned}$$

Weiter folgt mit Hilfssatz 3.1 (iii):

$$\begin{aligned} |f(x) - f(y) + \lambda^\top (z-x) - \lambda^\top (z-y)| &\leq |f(x) - f(y)| + |\lambda^\top (z-x) - \lambda^\top (z-y)| \\ &\leq L\|x-y\| + \underbrace{\|\lambda\|}_{\leq L} \cdot \|x-y\| \\ &\leq 2L\|x-y\| \leq \varepsilon. \end{aligned}$$

Also: $f(z) \geq f(x) + \lambda^\top (z-x) - \varepsilon$. □

© 2003 by M. Gerdts

3.4.1 Rechenregeln

Ohne Beweis werden hier einige nützliche Rechenregeln für Subdifferentiale zusammengefaßt.

Definition 3.11

Die Funktion $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ heißt **regulär in** *$x \in \mathbb{R}^n$, falls die Richtungsableitung $f'(x;h)$ für alle $h \in \mathbb{R}^n$ existiert und*

$$f'(x;h) = f^o(x;h)$$

erfüllt.

Hinreichende Bedingungen für Regularität:

Satz 3.15

Sei f lipschitzstetig in x. Dann ist f regulär in x, falls

(i) f ist stetig differenzierbar in x.

(ii) f ist konvex.

(iii) $f = \sum_{i=1}^m \lambda_i f_i$, wobei $\lambda_i > 0$ und f_i regulär in x für alle $i = 1, \ldots, m$.

Beweis: [MN92], S. 37

Satz 3.16

Sei f lokal lipschitzstetig in x. Dann gilt

$$\partial_o(\lambda f)(x) = \lambda \partial_o f(x) \qquad \forall \lambda \in \mathbb{R}.$$

Beweis: [MN92], S. 38

Satz 3.17

Die Funktionen $f_i : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, $i = 1, \ldots, m$ seien lokal lipschitzstetig in x. Dann gilt

$$\partial_o \left(\sum_{i=1}^m \lambda_i f_i \right)(x) \subseteq \sum_{i=1}^m \lambda_i \partial_o f_i(x)$$

für beliebige Skalare $\lambda_i \in \mathbb{R}$, $i = 1, \ldots, m$. Gleichheit gilt, falls alle f_i zusätzlich regulär sind und $\lambda_i > 0$ für alle $i = 1, \ldots, m$ gilt.

Beweis: [MN92], S. 39

Satz 3.18

Die Funktionen $f_i : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, $i = 1, \ldots, m$ seien lokal lipschitzstetig in x. Dann ist auch

$$f(x) := \max\{f_i(x) \mid i = 1, \ldots, m\}$$

© 2003 by M. Gerdts

lokal lipschitzstetig in x und es gilt

$$\partial_o f(x) \subseteq conv\{\partial_o f_i(x) \mid i \in I(x)\}, \qquad I(x) := \{i \mid f_i(x) = f(x),\ 1 \le i \le m\}.$$

Gleichheit gilt, falls alle f_i zusätzlich regulär sind.

Beweis: [MN92], S. 47

Hilfssatz 3.2

Für $i = 1, 2, \ldots, m$ seien $f_i : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ stetig differenzierbare Funktionen in x und $g_i : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ konvexe Funktionen. Dann gelten für die Funktionen

$$\begin{aligned} f(x) &= \max_{i=1,\ldots,m} f_i(x), \\ g(x) &= \max_{i=1,\ldots,m} g_i(x) \end{aligned}$$

die Beziehungen

$$\begin{aligned} \partial_o f(x) &= conv\{\nabla f_i(x) \mid i \in I(x)\}, \\ \partial_o g(x) &= conv\{\partial_c g_i(x) \mid i \in J(x)\}, \end{aligned}$$

wobei $I(x) := \{i \mid f(x) = f_i(x)\}$ und $J(x) := \{i \mid g(x) = g_i(x)\}$.

Beweis: (siehe [MN92], S. 49, oder Shor [Sho85], S. 14)

3.5 Geometrie und Tangentialkegel

Im Hinblick auf die Formulierung notwendiger Bedingungen für restringierte Optimierungsprobleme spielen Tangential- und Normalkegel eine grosse Rolle. Anschaulich beschreibt der Tangentialkegel (im Grenzübergang) zulässige Richtungen.

Definition 3.12 (Kegel)

Eine Menge K heißt **Kegel**, *falls*

$$x \in K \qquad \Rightarrow \qquad \lambda x \in K \quad \forall \lambda > 0.$$

Eine Menge K heißt **Kegel mit Spitze** 0, *falls zusätzlich $0 \in K$ gilt.*

Für konvexe Mengen wird der Tangentialkegel wie folgt definiert.

Definition 3.13 (Tangential- und Normalkegel einer konvexen Menge)

- *Sei $X \subseteq \mathbb{R}^n$ eine konvexe Menge. Der* **Tangentialkegel an X in $x \in X$** *ist definiert als*

  $$T_X(x) = \{h \in \mathbb{R}^n \mid \exists t_i \downarrow 0,\ h_i \to h\ :\ x + t_i h_i \in X\}.$$

  Die Elemente von $T_X(x)$ heißen **tangentiale Richtungen an X in x**.

© 2003 by M. Gerdts

- *Der* **Normalkegel an** X **in** $x \in X$ *ist definiert als*

$$N_X(x) = \{z \in \mathbb{R}^n \mid h^\top z \leq 0 \quad \forall h \in T_X(x)\}.$$

Die Elemente von $N_X(x)$ *heißen* **normale Richtungen an** X **in** x

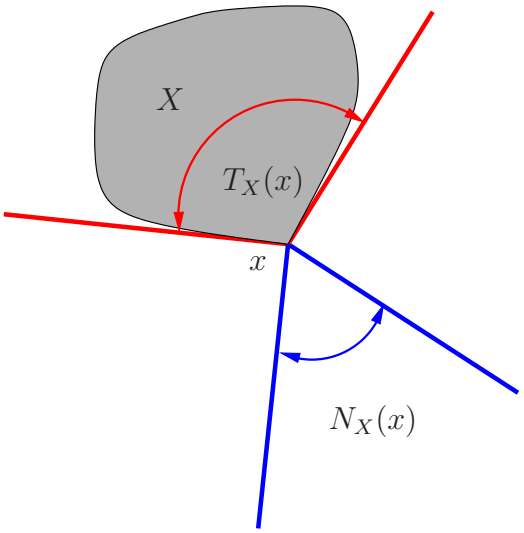


Abbildung 3.2: Tangentialkegel (rot) und Normalkegel (blau) an die Menge X

Bemerkung 3.3

Alternative Darstellung:

$$\begin{aligned} T_X(x) &= \overline{\{h \in \mathbb{R}^n \mid \exists t > 0 \ : \ x + th \in X\}}, \\ N_X(x) &= \{z \in \mathbb{R}^n \mid (y - x)^\top z \leq 0 \quad \forall y \in X\}. \end{aligned}$$

Für nichtkonvexe Mengen gibt es verschiedene Definitionsmöglichkeiten für Tangentialkegel. Wir entscheiden uns für die Definition von Clarke. Dabei wird die sogenannte Distanzfunktion einer Menge benötigt, die anschaulich den Abstand eines Punktes von einer Menge beschreibt.

Definition 3.14 **(Distanzfunktion)**

Sei $X \subseteq \mathbb{R}^n$ *nichtleer. Die Funktion* $d_X : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ *gemäß*

$$d_X(x) = \inf\{\|x - y\| \mid y \in X\}$$

© 2003 by M. Gerdts

heißt **Distanzfunktion**.

Bemerkung 3.4

Die Distanzfunktion ist lipschitzstetig auf $\mathbb{R}^n$ *mit Lipschitzkonstante* 1. *Sie ist genau dann konvex, falls der Abschluß* $cl(X)$ *von* X *konvex ist.*

Mit ihrer Hilfe läßt sich der Tangentialkegel für allgemeine Mengen definieren.

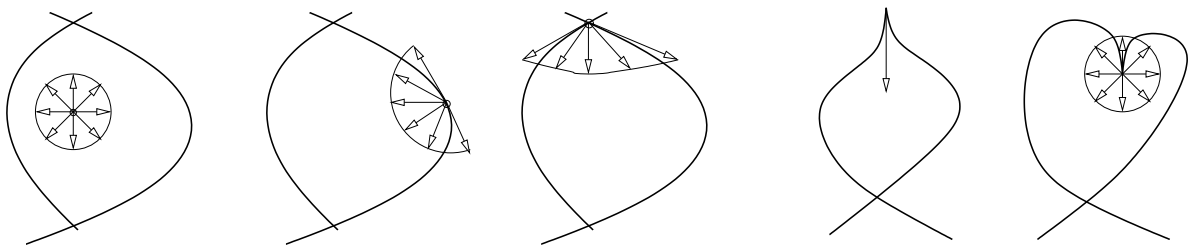
Definition 3.15 **(Tangentialkegel einer beliebigen Menge)**

Sei $X \subseteq \mathbb{R}^n$ *eine nichtleere Menge. Der* **Tangentialkegel an** X **in** $x \in X$ *ist definiert als*

$$T_X(x) = \{h \in \mathbb{R}^n \mid d_X^o(x;h) = 0\}$$

Die Elemente von $T_X(x)$ *heißen* **tangentiale Richtungen an** X **in** x.

Anschaulich bedeutet diese Definition, daß der Abstand von der Menge X in Richtung $h \in T_X(x)$ konstant bleibt, da für die Richtungsableitung $d^o(x;h) = 0$ gilt. Wegen $x \in X$ gilt $d_X(x) = 0$. Somit bleibt der Abstand von X in Richtung h Null (zumindest im Grenzübergang). Also: Entlang aller Richtungen aus $T_X(x)$ bleibt man (zumindest im Grenzübergang) in X.



Der so definierte Tangentialkegel hat schöne Eigenschaften, insbesondere ist er konvex:

Satz 3.19

Der Tangentialkegel $T_X(x)$ *der nichtleeren Menge* X *ist ein abgeschlossener und konvexer Kegel mit* $0 \in T_X(x)$.

Beweis: Folgt aus Satz 3.7 (i) und (ii). □

Bemerkung 3.5

Die Definition des Tangentialkegels ist unabhängig von der in der Distanzfunktion gewählten Norm, denn man kann zeigen, daß

$$T_X(x) = \{h \in \mathbb{R}^n \mid \text{für jede Folge } \{t_j\} \subseteq \mathbb{R}^+,\ t_j \downarrow 0 \text{ und jede Folge } \{x_j\} \subseteq X,\ x_j \to x \text{ gibt es } h_j \to h \text{ mit } x_j + t_j h_j \in X\}$$

© 2003 by M. Gerdts

eine äquivalente Definition des Tangentialkegels ist.

Bemerkung 3.6

Häufig findet man auch die Definition

$$T_X^-(x) = \{h \in \mathbb{R}^n \mid \exists\{x_k\} \subseteq X,\ \exists\{t_k\} \subseteq \mathbb{R}^+ \ :\ x_k \to x,\ t_k \downarrow 0,\ (x_k - x)/t_k \to h\}.$$

Dies ist **nicht** *der obige Tangentialkegel, sondern der sogenannte* **Kontingentkegel**. *Der Kontingentkegel ist i.a. nicht konvex, betrachte z.B.* $X = \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 \mid x = 0$ *oder* $y = 0\}$. *Der Tangentialkegel* $T_X(x)$ *ist im Kontingentkegel* $T_X^-(x)$ *enthalten. Man kann den Kontingentkegel auch mit Hilfe der unteren Dini-Richtungsableitung der Distanzfunktion definieren: Es gilt*

$$T_X^-(x) = \{h \in \mathbb{R}^n \mid d_X^-(x; h) = 0\}.$$

Der Normalkegel ist analog zum konvexen Fall definiert:

Definition 3.16 **(Normalkegel)**

Sei $X \subseteq \mathbb{R}^n$ *eine nichtleere Menge. Der* **Normalkegel an** X **in** $x \in X$ *ist definiert als*

$$N_X(x) = \{z \in \mathbb{R}^n \mid h^\top z \leq 0 \quad \forall h \in T_X(x)\}.$$

Die Elemente von $N_X(x)$ *heißen* **normale Richtungen an** X **in** x.

Er hat ähnliche Eigenschaften wie der Tangentialkegel.

Satz 3.20

Der Normalkegel $N_X(x)$ *der Menge* X *ist ein abgeschlossener und konvexer Kegel mit* $0 \in N_X(x)$.

Beweis: Folgt aus der Definition des Normalkegels. □

Für innere Punkte $x \in int(X)$ gilt $T_X(x) = \mathbb{R}^n$ und $N_X(x) = \{0\}$. Ist die Menge X konvex, so kann man zeigen, daß die in den Definitionen 3.13 und 3.15 definierten Tangentialkegel identisch sind, siehe [MN92], S. 61.

3.6 Notwendige Bedingungen für unrestringierte Optimierungsprobleme

Die aus der differenzierbaren Optimierung bekannte notwendige Bedingung „$\nabla f(x) = 0$“ für ein unrestringiertes, lokales Minimum läßt sich auf den nichtdifferenzierbaren Fall verallgemeinern. Es gilt

© 2003 by M. Gerdts

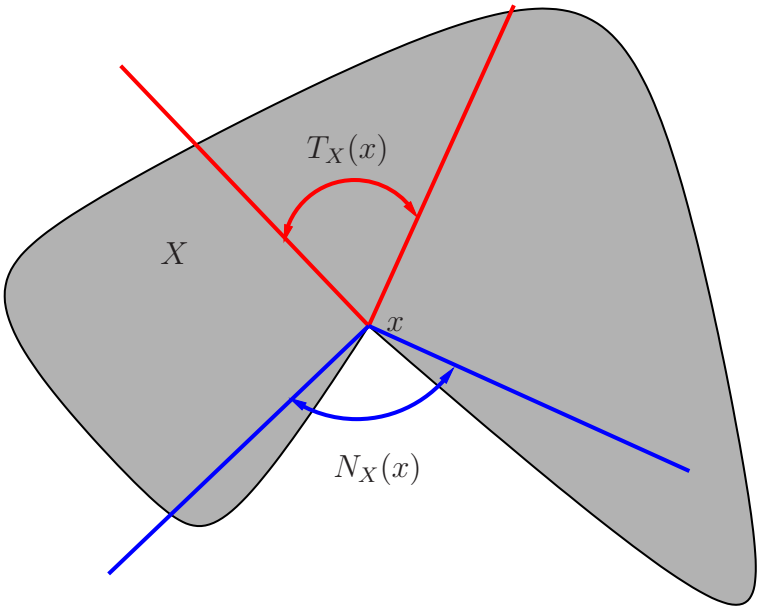


Abbildung 3.3: Tangentialkegel (rot) und Normalkegel (blau) an die Menge X in x.

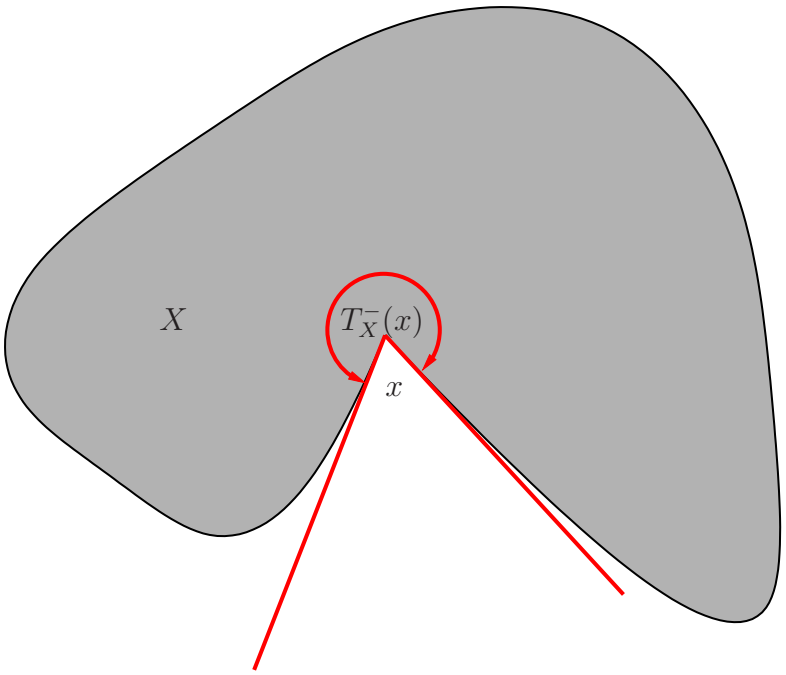


Abbildung 3.4: Kontingentkegel (rot) an die Menge X in x.

Satz 3.21

Sei $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ lokal lipschitzstetig in x und x sei lokales Minimum von f. Dann gelten:

(i) $0 \in \partial_o f(x)$

(ii) $f^o(x; h) \geq 0$ *für alle* $h \in \mathbb{R}^n$.

© 2003 by M. Gerdts

Beweis: (vgl. [MN92], S. 70, S.38)
Sei x lokale Minimalstelle von f. Aus der Definition eines lokalen Minimums folgt, daß es ein $\varepsilon > 0$ gibt mit $f(x+th) - f(x) \geq 0$ für alle $0 < t < \varepsilon$ und $h \in \mathbb{R}^n$. Damit folgt

$$f^o(x;h) = \limsup_{y \to x, t \downarrow 0} \frac{f(y+th) - f(y)}{t} \geq \limsup_{t \downarrow 0} \frac{f(x+th) - f(x)}{t} \geq 0.$$

Damit folgt $f^o(x;h) \geq 0 = 0^\top h$ für alle $h \in \mathbb{R}^n$. D.h. 0 ist ein Subgradient von f in x und somit $0 \in \partial_o f(x)$. □

Bemerkung 3.7
Es gilt allgemeiner: Ist f lokal lipschitzstetig in x und x ein lokales Minimum oder Maximum von f, dann gilt $0 \in \partial_o f(x)$ (vgl. [MN92], S. 38). Bedingung (ii) ist ebenfalls nur notwendig und nicht hinreichend wie das Beispiel $f(x) = -|x|$ zeigt.

Im konvexen Fall sind die notwendigen Bedingungen auch hinreichend für die Minimalität von x:

Satz 3.22
Sei $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ konvex. Dann sind folgende Aussagen äquivalent:

(i) f hat in x ein globales Minimum.

(ii) $0 \in \partial_c f(x)$

(iii) $f'(x;h) \geq 0$ für alle $h \in \mathbb{R}^n$.

Beweis: (vgl. [MN92], S. 71)
Aussage (ii) folgt aus (i) mit Satz 3.21 und der Tatsache, daß $\partial_o f(x) = \partial_c f(x)$ für konvexe Funktionen gilt, vgl. Satz 3.12.
<u>*(ii) ⇒ (iii)*:</u>
Mit Hilfssatz 3.1 und $0 \in \partial_c f(x)$ folgt

$$f'(x;h) = \max\{\lambda^\top h \mid \lambda \in \partial_c f(x)\} \geq 0^\top h = 0.$$

<u>*(iii) ⇒ (i)*:</u>
Sei $y \in \mathbb{R}^n$. Es gilt nach Hilfssatz 3.1

$$f'(x; y-x) = \max\{\lambda^\top (y-x) \mid \lambda \in \partial_c f(x)\}.$$

Daher existiert ein $\lambda_y \in \partial_c f(x)$ mit

$$0 \leq f'(x; y-x) = \lambda_y^\top (y-x).$$

© 2003 by M. Gerdts

Daraus folgt

$$f(y) \geq f(x) + \lambda_y^\top (y - x) \geq f(x),$$

d.h. f nimmt in x das globale Minimum an. □

Satz 3.23

Sei $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ konvex. Dann sind folgende Aussagen äquivalent:

(i) $0 \in \partial_\varepsilon f(x)$.

(ii) Es gilt $f(x) \leq f(y) + \varepsilon$ für alle $y \in \mathbb{R}^n$.

Beweis: (vgl. [MN92], S. 71)
Sei $0 \in \partial_\varepsilon f(x)$. Per Definition des ε-Subdifferentials ist dies äquivalent mit

$$f(y) \geq f(x) + 0^\top (y - x) - \varepsilon = f(x) - \varepsilon$$

für alle $y \in \mathbb{R}^n$. □

3.7 Notwendige Bedingungen für restringierte Optimierungsprobleme

Wir betrachten:

Allgemeines Optimierungsproblem (OP):

$$\min f(x) \quad \text{unter} \quad x \in X.$$

Darin sei $X \subseteq \mathbb{R}^n$ eine beliebige nichtleere Menge und $f : X \to \mathbb{R}$ eine lokal lipschitzstetige Funktion.

Ähnlich wie bei der Einführung von exakten Penaltyfunktionen, versuchen wir auch hier, das restringierte Problem durch Ankopplung eines Strafterms an die Zielfunktion in ein äquivalentes unrestringiertes Problem zu überführen. Wir benötigen hierfür eine geeignete Straffunktion, die unzulässige Punkte $x \notin X$ bestraft. Ein Maß hierfür ist die **Distanzfunktion** aus Definition 3.14

$$d_X(x) = \inf\{\|y - x\| \mid y \in X\}.$$

Durch Ankoppeln der Distanzfunktion mit einem hinreichend großen Faktor an die Zielfunktion, erhält man eine (exakte) Penaltyfunktion

$$l(x; \alpha) = f(x) + \alpha d_X(x)$$

© 2003 by M. Gerdts

und es gilt folgender Satz:

Satz 3.24

Sei $f : D \to \mathbb{R}$ lipschitzstetig auf $D \subseteq \mathbb{R}^n$ mit Lipschitzkonstante L. Sei $x \in X \subseteq D$ lokales Minimum von f auf X. Dann hat die Funktion $l(\cdot;\alpha)$ für alle $\alpha \geq L$ ein lokales Minimum in x auf D.
Ist X abgeschlossen und $\alpha > L$, dann liegt jede Minimalstelle von $l(\cdot;\alpha)$ über D in X.

Beweis: (vgl. [BL00], S. 137, [MN92], S. 72)
Annahme: l habe kein lokales Minimum in x auf D.
Dann gibt es einen Punkt $y \in D$ und ein $\varepsilon > 0$ mit $l(y;\alpha) < l(x;\alpha) - \alpha\varepsilon$, d.h.

$$l(y;\alpha) = f(y) + \alpha d_X(y) < f(x) + \alpha \underbrace{d_X(x)}_{=0} - \alpha\varepsilon = f(x) - \alpha\varepsilon.$$

Sei $z \in X$ ein Punkt mit $\|y - z\| \leq d_X(y) + \varepsilon$. Dann folgt aus der Lipschitzstetigkeit von f, daß $|f(z) - f(y)| \leq L\|y - z\|$ gilt. Damit folgt

$$\begin{aligned} f(z) &\leq f(y) + L\|y - z\| \\ &\leq f(y) + \alpha\|y - z\| \\ &\leq f(y) + \alpha(d_X(y) + \varepsilon) \\ &< f(x) + \alpha\varepsilon - \alpha\varepsilon \\ &= f(x). \end{aligned}$$

Dies ist ein Widerspruch zur Minimalität von x auf X.
Sei nun X abgeschlossen und $\alpha > L$. Sei y ebenfalls Minimalstelle von l auf D. Dann kann die erste Aussage des Satzes mit der Konstanten $(\alpha + L)/2 > L$ angewendet werden:

$$f(y) + \alpha d_X(y) = f(x) = f(x) + \frac{\alpha + L}{2} d_X(x) \leq f(y) + \frac{\alpha + L}{2} d_X(y).$$

Daraus folgt $\alpha d_X(y) \leq \underbrace{\frac{\alpha + L}{2}}_{<\alpha} d_X(y)$. Hieraus folgt $d_X(y) = 0$. Da X abgeschlossen ist, folgt $y \in X$. □

Im Beweis wurde folgender Sachverhalt verwendet:

Hilfssatz 3.3

Sei $X \in \mathbb{R}^n$ abgeschlossen. Dann gilt: $x \in X \Leftrightarrow d_X(x) = 0$.

Beweis: „$\Rightarrow$“: Sei $x \in X$. Dann $0 \leq d_X(x) \leq \|x - x\| = 0$.
„$\Leftarrow$“: Sei $d_X(x) = 0$. Dann existiert eine Folge $\{x_i\} \subseteq X$ mit $\|x - x_i\| < 1/i \to 0$. Also $x_i \to x$ und $x \in cl(X) = X$. □

© 2003 by M. Gerdts

Die exakte Penaltyfunktion ermöglicht den Beweis für die folgende notwendige Bedingung:

Satz 3.25

Sei $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ lokal lipschitzstetig und x sei lokales Minimum von f auf der Menge $X \subseteq \mathbb{R}^n$. Dann gilt

$$f^o(x;h) \geq 0 \qquad \forall h \in T_X(x).$$

Beweis: Sei $D \subseteq \mathbb{R}^n$ eine offene Kugel mit $x \in D$. Sei L die Lipschitzkonstante von f auf D. Wegen $X \cap D \subseteq D$ hat f in x ein lokales Minimum in $X \cap D$. Nach Satz 3.24 ist x auch lokales Minimum der Penaltyfunktion $l(x;\alpha)$ für $\alpha \geq L$. Notwendig für die Minimalität der Penaltyfunktion $l(x;\alpha) = f(x) + \alpha d_X(x)$ ist nach Satz 3.21 (ii) $0 \leq l^o(x;\alpha;h) = (f + \alpha d_X)^o(x;h)$ für alle $h \in \mathbb{R}^n$. Wegen $(f + \alpha d_X)^o(x;h) \leq f^o(x;h) + \alpha d_X^o(x;h)$ und $d_X^o(x;h) = 0$ für $h \in T_X(x)$ folgt damit die Behauptung. □

Eine notwendige Bedingung unter Verwendung des Normalkegels ist:

Satz 3.26

Sei $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ lokal lipschitzstetig und x sei lokales Minimum von f auf der Menge $X \subseteq \mathbb{R}^n$. Dann gilt

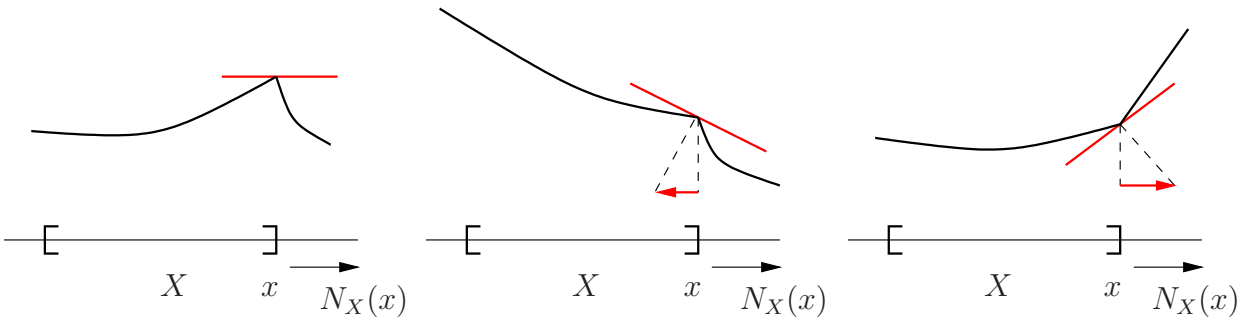
$$0 \in \partial_o f(x) + N_X(x). \tag{3.2}$$

Was bedeutet diese notwendige Bedingung? Sie bedeutet, daß es einen Subgradienten λ und ein Element y aus dem Normalkegel gibt mit $\lambda + y = 0$ bzw. $\lambda = -y$. Wegen $y \in N_X(x)$ folgt $y^\top h \leq 0$ für alle $h \in T_X(x)$ bzw. $\lambda^\top h \geq 0$ für alle $h \in T_X(x)$. Aus der Definition des Subgradienten von f, d.h. $f^o(x;h) \geq \lambda^\top h$ für alle $h \in \mathbb{R}^n$, folgt wiederum $f^o(x;h) \geq 0$ für alle $h \in T_X(x)$.

Beispiel 3.5

Die notwendige Bedingung ist für die beiden linken Fälle in x erfüllt. Im rechten Fall ist sie in x nicht erfüllt.

© 2003 by M. Gerdts



Beweis: (vgl. [MN92], S. 72)
Sei $D \subseteq \mathbb{R}^n$ eine offene Kugel mit $x \in D$. Sei L die Lipschitzkonstante von f auf D. Wegen $X \cap D \subseteq D$ hat f in x ein lokales Minimum in $X \cap D$. Mit Satz 3.24 folgt, daß $f(y) + Ld_{X\cap D}(y)$ in x ein Minimum in D hat. Satz 3.21 liefert

$$0 \in \partial_o \left(f + Ld_{X\cap D}\right)(x).$$

Mit den Rechenregeln und Hilfssatz 3.4 folgt

$$0 \in \partial_o \left(f + Ld_{X\cap D}\right)(x) \subseteq \partial_o f(x) + L\partial_o d_{X\cap D}(x) \subseteq \partial_o f(x) + N_{X\cap D}(x) = \partial_o f(x) + N_X(x).$$

Beachte hierbei, daß $N_{X\cap D}(x) = N_X(x)$ gilt, da D offen, $x \in D$ und somit $N_D(x) = \{0\}$ gilt. □

Im Beweis wurde das folgende Hilfsresultat verwendet:

Hilfssatz 3.4

Sei $M \subseteq \mathbb{R}^n$ eine nichtleere Menge und $x \in M$. Dann gilt

$$\partial_o d_M(x) \subseteq N_M(x).$$

Beweis: Sei $\lambda \in \partial_o d_M(x)$, d.h. es gilt

$$d_M^o(x;h) \geq \lambda^\top h \qquad \forall h \in \mathbb{R}^n.$$

Wegen $\emptyset \neq T_M(x) \subseteq \mathbb{R}^n$, vgl. Satz 3.19, gilt insbesondere

$$d_M^o(x;h) \geq \lambda^\top h \qquad \forall h \in T_M(x).$$

Per Definition des Tangentialkegels gilt $d_M^o(x;h) = 0$ für $h \in T_M(x)$. Es folgt

$$0 \geq \lambda^\top h \qquad \forall h \in T_M(x).$$

© 2003 by M. Gerdts

Aus der Definition des Normalkegels folgt, daß $\lambda \in N_M(x)$. □

Im konvexen Fall ist die notwendige Bedingung auch hinreichend.

Satz 3.27

Seien $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ und X konvex. Dann sind folgende Aussagen äquivalent:

(i) $0 \in \partial_c f(x) + N_X(x)$.

(ii) f hat in x ein globales Minimum auf X.

Beweis: (vgl. [MN92], S. 73)
(i) folgt aus (ii) nach Satz 3.26. Sei nun $0 \in \partial_c f(x) + N_X(x)$. Dann gibt es $\lambda \in \partial_c f(x)$ und $z \in N_X(x)$ mit $\lambda + z = 0$ bzw. $\lambda = -z$. Aus der Definition des Subdifferentials für konvexe Funktionen folgt

$$f(y) \geq f(x) + \lambda^\top (y - x) = f(x) - \underbrace{z^\top (y - x)}_{\leq 0 \ \forall y \in X} \geq f(x). \qquad \forall y \in X.$$

Beachte, daß $z \in N_X(x)$ gilt, d.h. es gilt $z^\top h \leq 0$ für alle $h \in T_X(x)$. Hilfssatz 3.5 liefert $z^\top (y - x) \leq 0$ für alle $y \in X$. □

Im Beweis wurde das folgende Hilfsresultat verwendet:

Hilfssatz 3.5

Sei $X \subseteq \mathbb{R}^n$ eine nichtleere konvexe Menge und $x, y \in X$. Dann gilt

$$y - x \in T_X(x).$$

Beweis: Sei $h = y - x$ mit $y, x \in X$. Z.z.: $h \in T_X(x)$ bzw. es gibt eine Folge $t_i \downarrow 0$ und $h_i \to h$ mit $x + t_i h_i \in X$. Definiere $h_i := h = y - x$ und $0 < t_i < 1$ mit $t_i \downarrow 0$. Dann gilt $x + t_i h_i = x + t_i(y - x) = (1 - t_i)x + t_i y \in X$, da X konvex. □

Ist f stetig differenzierbar, so gilt nach Satz 3.11 $\partial_o f(x) = \{\nabla f(x)\}$ und (3.2) lautet

$$0 \in \nabla f(x) + N_X(x) \qquad \Leftrightarrow \qquad -\nabla f(x) \in N_X(x).$$

Dies besagt anschaulich, daß sich der negative Gradient – also die Richtung des steilsten Abstiegs von f – im Normalkegel befinden muss. Aus der Definition des Normalkegels folgt, daß dann $-\nabla f(x)^\top h \leq 0$ bzw. $\nabla f(x)^\top h \geq 0$ für alle $h \in T_X(x)$ gilt. Mit anderen Worten: Entlang der tangentialen Richtungen $h \in T_X(x)$ ist die Richtungsableitung $\nabla f(x)^\top h$ nicht negativ, d.h. f fällt nicht in Richtung h.

© 2003 by M. Gerdts

3.7.1 Verallgemeinerte Fritz-John- und KKT-Bedingungen

Ist der zulässige Bereich des Optimierungsproblems (OP) durch endlich viele Ungleichungen beschrieben, kann man notwendige Bedingungen herleiten, die die bekannten Fritz-John-Bedingungen bzw. KKT-Bedingungen der differenzierbaren Optimierung verallgemeinern. Wir betrachten nun restringierte Optimierungsprobleme der Form

$$\min f(x) \quad \text{unter} \quad x \in X$$

mit

$$X = \{x \in \mathbb{R}^n \mid g_i(x) \leq 0,\ i = 1, \ldots, m\}.$$

Darin seien $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ und $g_i : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, $i = 1, \ldots, m$ lokal lipschitzstetige Funktionen.

Sei $\hat{x}$ ein lokales Minimum des obigen Optimierungsproblems. Wir wollen die bisher erhaltenen notwendigen Bedingungen ausnutzen und definieren geeignete Hilfsfunktionen, um das restringierte Problem in ein äquivalentes unrestringiertes Problem zu transformieren. Es sei

$$G(x) := \max\{g_i(x) \mid i = 1, \ldots, m\}.$$

Da g_i, $i = 1, \ldots, m$ lokal lipschitzstetig sind, ist auch G lokal lipschitzstetig. Mit den Rechenregeln folgt

$$\partial_o G(x) \subseteq conv\{\partial_o g_i(x) \mid i \in I(x)\}, \qquad I(x) = \{i \mid g_i(x) = G(x)\}. \tag{3.3}$$

Offenbar kann der zulässige Bereich X durch G beschrieben werden. Es gilt

$$X = \{x \in \mathbb{R}^n \mid G(x) \leq 0\}.$$

Definiere die sogenannte **Improvement-Funktion**

$$H(x, \hat{x}) := \max\{f(x) - f(\hat{x}), G(x)\}.$$

Da f und G lokal lipschitzstetig sind, ist auch $H(\cdot, \hat{x})$ lokal lipschitzstetig. Da $\hat{x}$ als lokales Minimum vorausgesetzt war, folgt, daß $H(\cdot, \hat{x})$ in $\hat{x}$ das lokale unrestringierte Minimum $H(\hat{x}, \hat{x}) = 0$ besitzt. Denn gäbe es in einer gewissen Umgebung von $\hat{x}$ ein x mit $H(x, \hat{x}) < 0$, d.h. $\max\{f(x) - f(\hat{x}), G(x)\} < 0$, so wäre x wegen $G(x) < 0$ zulässig und aus $f(x) - f(\hat{x}) < 0$ folgte $f(x) < f(\hat{x})$. Dies wäre ein Widerspruch zur lokalen Minimalität von $\hat{x}$.

Nach Satz 3.21 (i) gilt notwendig

$$0 \in \partial_o H(\hat{x}, \hat{x}), \tag{3.4}$$

© 2003 by M. Gerdts

da $H(\cdot,\hat{x})$ in $\hat{x}$ ein lokales Minimum besitzt. Mit den Rechenregeln folgt

$$0 \in \partial_o H(\hat{x};\hat{x}) \subseteq \begin{cases} \partial_o f(\hat{x}), & \text{falls } G(\hat{x}) < 0, \\ conv\{\partial_o f(\hat{x}) \cup \partial_o G(\hat{x})\}, & \text{falls } G(\hat{x}) = 0. \end{cases} \tag{3.5}$$

Mit (3.3) folgt

$$0 \in \begin{cases} \partial_o f(\hat{x}), & \text{falls } G(\hat{x}) < 0, \\ conv\{\partial_o f(\hat{x}) \cup conv\{\partial_o g_i(\hat{x}) \mid i \in I(\hat{x})\}\}, & \text{falls } G(\hat{x}) = 0. \end{cases} \tag{3.6}$$

Beachtet man noch, daß $\partial_o f(\hat{x})$ und $\partial_o g_i(\hat{x})$, $i = 1,\ldots,m$ nichtleere konvexe Mengen sind und daß für nichtleere konvexe Mengen $C_1,\ldots,C_k$ die Beziehung

$$conv(C_1 \cup C_2 \cup \ldots \cup C_k) = \{\sum_{i=1}^{k} \lambda_i C_i \mid \lambda_i \geq 0,\ i = 1,\ldots,k,\ \sum_{i=1}^{k} \lambda_i = 1\}$$

gilt, ergeben sich aus (3.6) die verallgemeinerten Fritz-John-Bedingungen:

Satz 3.28 **(verallgemeinerte Fritz-John-Bedingungen)**
Die Funktionen f, g_i, $i = 1,2,\ldots,m$ seien lokal lipschitzstetig in $\hat{x}$ und $\hat{x}$ sei lokales Minimum des Optimierungsproblems

$$\min f(x) \quad \textit{unter} \quad g_i(x) \leq 0,\ i = 1,\ldots,m.$$

Dann existieren Multiplikatoren $\eta_i \geq 0$, $i = 0,1,2,\ldots,m$ mit

$$\begin{aligned} 0 &\in \eta_0 \partial_o f(\hat{x}) + \sum_{i=1}^{m} \eta_i \partial_o g_i(\hat{x}), \\ \sum_{i=0}^{m} \eta_i &= 1, \\ \eta_i g_i(\hat{x}) &= 0, \quad i = 1,2,\ldots,m. \end{aligned}$$

Wie in der differenzierbaren Optimierung kann hier auch der Fall $\eta_0 = 0$ eintreten, wodurch die Zielfunktion in den Fritz-John-Bedingungen eliminiert wird. Es stellt sich die Frage, wann $\eta_0 \neq 0$ gewählt werden kann.

Definition 3.17 **(Cottle-Regularitätsbedingung)**
G erfüllt die **Cottle-Regularitätsbedingung in** *x, falls*

$$G(x) < 0 \qquad \textit{oder} \qquad 0 \notin \partial_o G(x).$$

Ist die Cottle-Regularitätsbedingung im lokalen Minimum $\hat{x}$ erfüllt, kann in den Fritz-John-Bedingungen o.B.d.A. $\eta_0 = 1$ gewählt werden und es gelten die KKT-Bedingungen:

© 2003 by M. Gerdts

Satz 3.29 **(verallgemeinerte KKT-Bedingungen)**
Die Funktionen f, g_i, $i = 1, 2, \ldots, m$ seien lokal lipschitzstetig in $\hat{x}$ und $\hat{x}$ sei lokales Minimum des Optimierungsproblems

$$\min f(x) \quad \textit{unter} \quad g_i(x) \leq 0,\ i = 1, \ldots, m.$$

In $\hat{x}$ gelte die Cottle-Regularitätsbedingung.
Dann existieren Multiplikatoren $\eta_i \geq 0$, $i = 1, 2, \ldots, m$ mit

$$\begin{aligned} 0 &\in \partial_o f(\hat{x}) + \sum_{i=1}^{m} \eta_i \partial_o g_i(\hat{x}), \\ \eta_i g_i(\hat{x}) &= 0, \quad i = 1, 2, \ldots, m. \end{aligned}$$

Beweis: Wir beweisen diesen Satz mit Hilfe von (3.5). Im Fall $G(\hat{x}) < 0$ gilt $g_i(\hat{x}) < 0$ für alle $i = 1, \ldots, m$ und es gilt notwendig $0 \in \partial_o f(\hat{x})$ und es kann $\eta_i = 0$, $i = 1, \ldots, m$ gewählt werden. Sei nun $G(\hat{x}) = 0$. Aus (3.5) folgt, daß es einen Multiplikator $0 \leq \mu_0 \leq 1$ gibt mit $0 \in \mu_0 \partial_o f(\hat{x}) + (1 - \mu_0)\partial_o G(\hat{x})$. Wegen $0 \notin \partial_o G(\hat{x})$ kann $\mu_0 = 0$ **nicht** gelten. Es ist also $\mu_0 > 0$. Mit (3.3) folgt weiter, daß

$$0 \in \mu_0 \partial_o f(\hat{x}) + (1 - \mu_0)\partial_o G(\hat{x}) \subseteq \mu_0 \partial_o f(\hat{x}) + (1 - \mu_0) conv\{\partial_o g_i(\hat{x}) \mid i \in I(\hat{x})\}.$$

Damit gibt es Multiplikatoren $\mu_i \geq 0$, $i \in I(\hat{x})$, $\sum_{i \in I(\hat{x})} \mu_i = 1$ mit

$$0 \in \mu_0 \partial_o f(\hat{x}) + (1 - \mu_0) \sum_{i \in I(\hat{x})} \mu_i \partial_o g_i(\hat{x}).$$

Division durch $\mu_0 \neq 0$ und Setzung von $\eta_i := (1 - \mu_0)\mu_i / \mu_0 \geq 0$ für $i \in I(\hat{x})$ bzw. $\eta_i = 0$ für $i \notin I(\hat{x})$ liefert die Behauptung. □

Sind die Funktionen g_i, $i = 1, \ldots, m$ konvex, so ist die Cottle-Regularitätsbedingung äquivalent zur **Slater-Bedingung**

$$\exists y \in \mathbb{R}^n : \quad G(y) < 0.$$

Beweis: Übungsaufgabe

Sind die Funktionen f und g_i, $i = 1, \ldots, m$ konvex, so sind die KKT-Bedingungen auch hinreichend für lokale Optimalität.

Satz 3.30
Die Funktionen f, g_i, $i = 1, 2, \ldots, m$ seien konvex und $\hat{x}$ sei zulässig für

$$\min f(x) \quad \textit{unter} \quad g_i(x) \leq 0,\ i = 1, \ldots, m.$$

© 2003 by M. Gerdts

Desweiteren gebe es Multiplikatoren $\eta_i \geq 0$, $i = 1, 2, \ldots, m$ mit

$$\begin{aligned} 0 &\in \partial_c f(\hat{x}) + \sum_{i=1}^{m} \eta_i \partial_c g_i(\hat{x}), \\ \eta_i g_i(\hat{x}) &= 0, \quad i = 1, 2, \ldots, m. \end{aligned}$$

Dann ist $\hat{x}$ globale Minimalstelle.

Beweis: Aus $0 \in \partial_c f(\hat{x}) + \sum_{i=1}^{m} \eta_i \partial_c g_i(\hat{x})$ folgt die Existenz von Subgradienten $\lambda \in \partial_c f(\hat{x})$ und $\lambda_i \in \partial_c g_i(\hat{x})$ mit

$$0 = \lambda + \sum_{i=1}^{m} \eta_i \lambda_i$$

und

$$\begin{aligned} f(y) &\geq f(\hat{x}) + \lambda^\top (y - \hat{x}), \qquad \forall y \in \mathbb{R}^n, \\ g_i(y) &\geq g_i(\hat{x}) + \lambda_i^\top (y - \hat{x}), \qquad \forall y \in \mathbb{R}^n, i = 1, \ldots, m. \end{aligned}$$

Multiplikation der zweiten Ungleichung mit $\eta_i \geq 0$ und Summation liefert

$$f(y) + \sum_{i=1}^{m} \eta_i g_i(y) \geq f(\hat{x}) + \sum_{i=1}^{m} \underbrace{\eta_i g_i(\hat{x})}_{=0} + (y - \hat{x})^\top \underbrace{\left(\lambda + \sum_{i=1}^{m} \eta_i \lambda_i \right)}_{=0}, \qquad \forall y \in \mathbb{R}^n.$$

Für alle zulässigen $y \in X$ gilt zudem $\eta_i g_i(y) \leq 0$. Insgesamt folgt

$$f(y) \geq f(\hat{x}) \qquad \forall y \in X.$$

□

3.8 Dualität

Wir betrachten das **primale Optimierungsproblem (Primalproblem)**

$$\begin{array}{ll} \text{Minimiere} & f(x) \\ \text{unter} & x \in X, \\ & g_i(x) \leq 0, \quad i = 1, \ldots, m, \\ & h_j(x) = 0, \quad j = 1, \ldots, p. \end{array}$$

Darin sei $X \subseteq \mathbb{R}^n$ eine nichtleere Menge. Wir wollen das sogenannte duale Problem herleiten bzw. motivieren. Dazu betten wir das primale Optimierungsproblem in eine Schar von **gestörten primalen Optimierungsproblemen** ein, indem wir die Ungleichungs-

© 2003 by M. Gerdts

und Gleichungsnebenbedingungen stören:

$$\begin{array}{ll} \text{Minimiere} & f(x) \\ \text{unter} & x \in X, \\ & g_i(x) \leq y_i, \quad i = 1, \ldots, m, \\ & h_j(x) = z_j, \quad j = 1, \ldots, p. \end{array}$$

Hierbei seien $y = (y_1, \ldots, y_m)^\top \in \mathbb{R}^m$ und $z = (z_1, \ldots, z_p)^\top \in \mathbb{R}^p$ beliebige Störungsvektoren. Das Ausgangsproblem ergibt sich für $y = 0$ und $z = 0$.

Definition 3.18 **(Minimalwertfunktion)**
Die Funktion

$$\Phi : \mathbb{R}^{m+p} \to \bar{\mathbb{R}} := \mathbb{R} \cup \{\infty, -\infty\}$$

mit

$$\Phi(y, z) := \inf\{f(x) \mid g_i(x) \leq y_i,\ i = 1, \ldots, m,\ h_j(x) = z_j,\ j = 1, \ldots, p,\ x \in X\}$$

heißt **Minimalwertfunktion** *für das gestörte Problem.*

Das duale Problem ist motiviert durch die Aufgabe, den Graphen der Minimalwertfunktion Φ von unten durch eine Hyperebene

$$\lambda^\top y + \mu^\top z + r = \gamma \tag{3.7}$$

mit Normalenvektor $(\lambda, \mu, 1)^\top \in \mathbb{R}^{m+p+1}$ und den Variablen $(y, z, r)^\top \in \mathbb{R}^{m+p+1}$ abzustützen, vgl. Abbildung 3.5. Der Schnittpunkt dieser Hyperebene mit der r-Achse in $y = 0, z = 0$ ist $(0, 0, \gamma)^\top$.
Das duale Problem läßt sich dann wie folgt formulieren:

$$\begin{array}{ll} \text{Maximiere} & \gamma \\ \text{bzgl.} & \lambda \in \mathbb{R}^m, \mu \in \mathbb{R}^p \\ \text{unter} & r \leq \Phi(y, z) \qquad \forall y \in \mathbb{R}^m, z \in \mathbb{R}^p. \end{array}$$

wobei r gemäß (3.7) durch $r = \gamma - \lambda^\top y - \mu^\top z$ gegeben ist. Damit lautet das Dualprogramm

$$\begin{array}{ll} \text{Maximiere} & \gamma \\ \text{bzgl.} & \lambda \in \mathbb{R}^m, \mu \in \mathbb{R}^p \\ \text{unter} & \gamma - \lambda^\top y - \mu^\top z \leq \Phi(y, z) \qquad \forall y \in \mathbb{R}^m, z \in \mathbb{R}^p. \end{array}$$

© 2003 by M. Gerdts

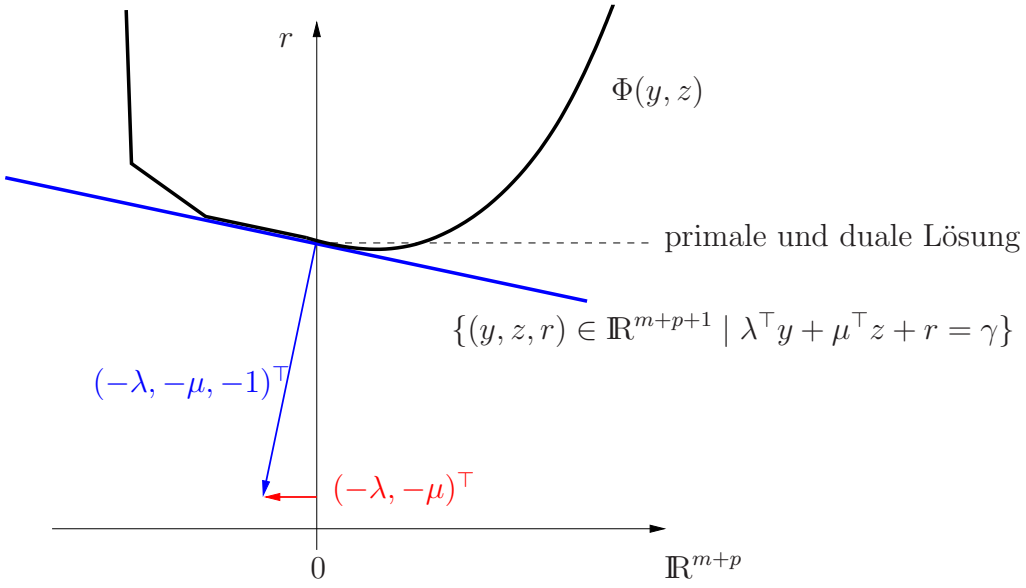


Abbildung 3.5: Grafische Interpretation des Dualproblems: Abstützung des Graphen der Minimalwertfunktion durch eine Hyperbene mit Normalenvektor $(\lambda,\mu,1)^\top$ bzw. $(-\lambda,-\mu,-1)^\top$.

Mit der Definition von Φ ist dieses Problem wiederum äquivalent zu

$$\begin{array}{ll} \text{Maximiere} & \gamma \\ \text{bzgl.} & \lambda \in \mathbb{R}^m, \mu \in \mathbb{R}^p \\ \text{unter} & \gamma \le f(x) + \lambda^\top y + \mu^\top z \qquad \forall y \in \mathbb{R}^m, z \in \mathbb{R}^p,\ x \in X,\ g(x) \le y,\ h(x) = z. \end{array}$$

Wegen $h(x) = z$ ist dieses Problem wiederum äquivalent mit dem Problem

$$\begin{array}{ll} \text{Maximiere} & \gamma \\ \text{bzgl.} & \lambda \in \mathbb{R}^m, \mu \in \mathbb{R}^p \\ \text{unter} & \gamma \le f(x) + \lambda^\top y + \mu^\top h(x) \qquad \forall y \in \mathbb{R}^m,\ x \in X,\ g(x) \le y. \end{array}$$

Nun unterscheiden wir zwei Fälle. Zunächst untersuchen wir die Nebenbedingung

$$\gamma \le f(x) + \lambda^\top y + \mu^\top h(x) \qquad \forall y \in \mathbb{R}^m,\ x \in X,\ g(x) \le y \tag{3.8}$$

und nehmen an, daß es eine Komponente $\lambda_i < 0$ gibt. Damit gilt $\lambda_i y_i \to -\infty$ für $y_i \to \infty$. Für $y_i \to \infty$ ist dann auch $g_i(x) \le y_i$ für $x \in X$ erfüllt. Es folgt, daß (3.8) nur für $\gamma = -\infty$ erfüllt ist. Da γ maximiert werden soll, ist dieser Fall uninteressant. Wir können also die Bedingung $\lambda \in \mathbb{R}^m$ durch $\lambda \ge 0$ ersetzen. In diesem Fall gilt wegen $g(x) \le y$ stets $\lambda^\top g(x) \le \lambda^\top y$ und die Bedingung (3.8) kann durch

$$\gamma \le f(x) + \lambda^\top g(x) + \mu^\top h(x) \qquad \forall x \in X$$

© 2003 by M. Gerdts

ersetzt werden. Also ist das duale Problem äquivalent mit

$$\begin{array}{ll} \text{Maximiere} & \gamma \\ \text{bzgl.} & \lambda \geq 0, \mu \in \mathbb{R}^p \\ \text{unter} & \gamma \leq f(x) + \lambda^\top g(x) + \mu^\top h(x) \qquad \forall x \in X. \end{array}$$

Definiert man die **Lagrangefunktion** gemäß

$$L(x, \lambda, \mu) := f(x) + \lambda^\top g(x) + \mu^\top h(x)$$

und die **duale Zielfunktion** gemäß

$$\psi(\lambda, \mu) := \inf_{x \in X} L(x, \lambda, \mu)$$

so lautet das

Dualproblem:

$$\max_{\lambda \geq 0, \mu \in \mathbb{R}^p} \psi(\lambda, \mu) = \max_{\lambda \geq 0, \mu \in \mathbb{R}^p} \inf_{x \in X} L(x, \lambda, \mu).$$

Beispiel 3.6

- *(vgl. [GK02], S. 316)*

$$\begin{array}{ll} \textit{Minimiere} & f(x_1, x_2) = x_1^2 - x_2^2 \\ \textit{unter} & (x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2 \\ & g(x_1, x_2) = x_1^2 + x_2^2 - 1 \leq 0. \end{array}$$

  Die Lösung dieses Primalproblems ist $f(0, \pm 1) = -1$. Die duale Zielfunktion ist

$$\psi(\lambda) = \inf_{(x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2} \{x_1^2 - x_2^2 + \lambda(x_1^2 + x_2^2 - 1)\} = \begin{cases} -\infty, & \textit{falls } 0 \leq \lambda < 1, \\ -\lambda, & \textit{falls } \lambda \geq 1. \end{cases}$$

  Die optimale Lösung des Dualproblems $\max_{\lambda \geq 0} \psi(\lambda)$ ist gegeben durch $\lambda = 1$ mit Wert -1. Hier besitzen Primal- und Dualproblem den gleichen Zielfunktionswert.

- *Gegeben sei das primale lineare Optimierungsproblem*

$$\min c^\top x \qquad \textit{unter} \qquad Ax = b,\ x \in X = \{x \in \mathbb{R}^n \mid x \geq 0\}.$$

  Die duale Zielfunktion lautet

$$\begin{aligned} \psi(\lambda) &= \inf_{x \geq 0} \left(c^\top x + \lambda^\top (b - Ax)\right) \\ &= \inf_{x \geq 0} \left(c^\top - \lambda^\top A\right) x + \lambda^\top b \\ &= \begin{cases} \lambda^\top b, & \textit{falls } c^\top - \lambda^\top A \geq 0, \\ -\infty, & \textit{sonst.} \end{cases} \end{aligned}$$

© 2003 by M. Gerdts

Damit lautet das duale Problem

$$\max b^\top \lambda \qquad \textit{unter} \qquad A^\top \lambda \leq c.$$

- *Gegeben sei das primale quadratische Optimierungsproblem*

$$\min \frac{1}{2} x^\top Q x + c^\top x \qquad \textit{unter} \qquad Ax \leq b$$

mit symmetrischer und positiv definiter Matrix Q. Die duale Zielfunktion lautet

$$\psi(\lambda) = \inf_{x \in \mathbb{R}^n} \left(\frac{1}{2} x^\top Q x + c^\top x + \lambda^\top (Ax - b) \right).$$

Das Infimum kann berechnet werden: Notwendig und hinreichend gilt

$$Qx + A^\top \lambda + c = 0 \quad \Rightarrow \quad x = -Q^{-1}(c + A^\top \lambda).$$

Mit den Abkürzungen

$$W = -AQ^{-1}A^\top, \qquad v = -b - AQ^{-1}c$$

lautet das Dualproblem damit

$$\max_{\lambda \geq 0} \left(\frac{1}{2} \lambda^\top W \lambda + \lambda^\top v - \frac{1}{2} c^\top Q^{-1} c \right).$$

Der Vorteil des dualen Problems liegt in der einfachen Struktur der Nebenbedingungen.

Im folgenden werden das primale und das duale Problem zueinander in Beziehung gesetzt.

Satz 3.31 **(Schwacher Dualitätssatz)**
Es sei x ein primal zulässiger Punkt[1] *und (λ, μ) sei ein dual zulässiger Punkt*[2]*. Dann gilt für den Minimalwert $w(P)$ des Primalproblems und den Maximalwert $w(D)$ des Dualproblems die Einschließung*

$$\psi(\lambda, \mu) \leq w(D) \leq w(P) \leq f(x).$$

Beweis: Für alle primal und dual zulässigen Punkte x und λ, μ gilt

$$\psi(\lambda, \mu) = \inf_{x \in X} L(x, \lambda, \mu) \leq f(x) + \underbrace{\lambda^\top}_{\geq 0} \underbrace{g(x)}_{\leq 0} + \mu^\top \underbrace{h(x)}_{=0} \leq f(x).$$

[1] Ein primal zulässiger Punkt x erfüllt $x \in X$, $g(x) \leq 0$ und $h(x) = 0$

[2] (λ, μ) heißt dual zulässig, falls $\lambda \geq 0$ gilt.

© 2003 by M. Gerdts

Die linke Seite hängt nicht von x ab, während die rechte Seite nicht von λ, μ abhängt. Übergang zum Supremum bzgl. $\lambda \geq 0, \mu$ auf der linken Seite und zum Infimum bzgl. $x \in X, g(x) \leq 0, h(x) = 0$ auf der rechten Seite liefert die Behauptung. □

Stimmen der primale und der duale Zielfunktionswert überein, so sind beide Probleme bereits optimal gelöst, denn es gilt:

Satz 3.32 **(Hinreichendes Optimalitätskriterium)**
Es gelte $\psi(\hat{\lambda}, \hat{\mu}) = f(\hat{x})$, wobei $\hat{x}$ primal zulässig und $(\hat{\lambda}, \hat{\mu})$ dual zulässig seien. Dann ist $\hat{x}$ optimal für das Primalproblem und $(\hat{\lambda}, \hat{\mu})$ ist optimal für das Dualproblem.
Außerdem gilt die **Complementary Slackness Condition**

$$\hat{\lambda}_i = 0, \ \textit{falls } g_i(\hat{x}) < 0, \qquad i = 1, \ldots, m.$$

Beweis: Die erste Aussage folgt aus dem schwachen Dualitätssatz. Complementary Slackness Condition: Angenommen es gilt $g_i(\hat{x}) < 0$ und $\hat{\lambda}_i > 0$ für mindestens ein $1 \leq i \leq m$. Dann folgt

$$\psi(\hat{\lambda}, \hat{\mu}) = \inf_{x \in X} L(x, \hat{\lambda}, \hat{\mu}) \leq f(\hat{x}) + \underbrace{\hat{\lambda}^\top g(\hat{x})}_{<0} + \underbrace{\hat{\mu}^\top h(\hat{x})}_{=0} < f(\hat{x})$$

im Widerspruch zur Voraussetzung $\psi(\hat{\lambda}, \hat{\mu}) = f(\hat{x})$. □

Das folgende Beispiel zeigt, daß tatsächlich der Fall $w(D) < w(P)$ eintreten kann. In diesem Fall spricht man von einer **Dualitätslücke**, vgl. Abbildung 3.6.

Beispiel 3.7 **(Dualitätslücke (vgl. [BS79], S. 181))**

$$\begin{array}{ll} \textit{Minimiere} & f(x_1, x_2) = -2x_1 + x_2 \\ \textit{unter} & (x_1, x_2) \in X = \{(0,0), (0,4), (4,4), (4,0), (1,2), (2,1)\}, \\ & 0 = h(x_1, x_2) = x_1 + x_2 - 3. \end{array}$$

Die Lösung dieses Primalproblems ist $(2,1)$ mit $f(2,1) = -3$. Die duale Zielfunktion ist

$$\psi(\mu) = \min\{-2x_1 + 3 + \mu(x_1 + x_2 - 3) \mid (x_1, x_2) \in X\} = \begin{cases} -4 + 5\mu, & \textit{falls } \mu \leq -1, \\ -8 + \mu, & \textit{falls } -1 \leq \mu \leq 2, \\ -3\mu, & \textit{falls } \mu \geq 2. \end{cases}$$

Die optimale Lösung des Dualproblems $\max_{\mu \in \mathbb{R}} \psi(\mu)$ ist gegeben durch $\mu = 2$ mit Wert -6. Wegen $-6 < -3$ besteht eine Dualitätslücke.

Es stellt sich die Frage, unter welchen Bedingungen **keine** Dualitätslücke auftritt. Der folgende Satz liefert hinreichende Bedingungen hierfür.

© 2003 by M. Gerdts

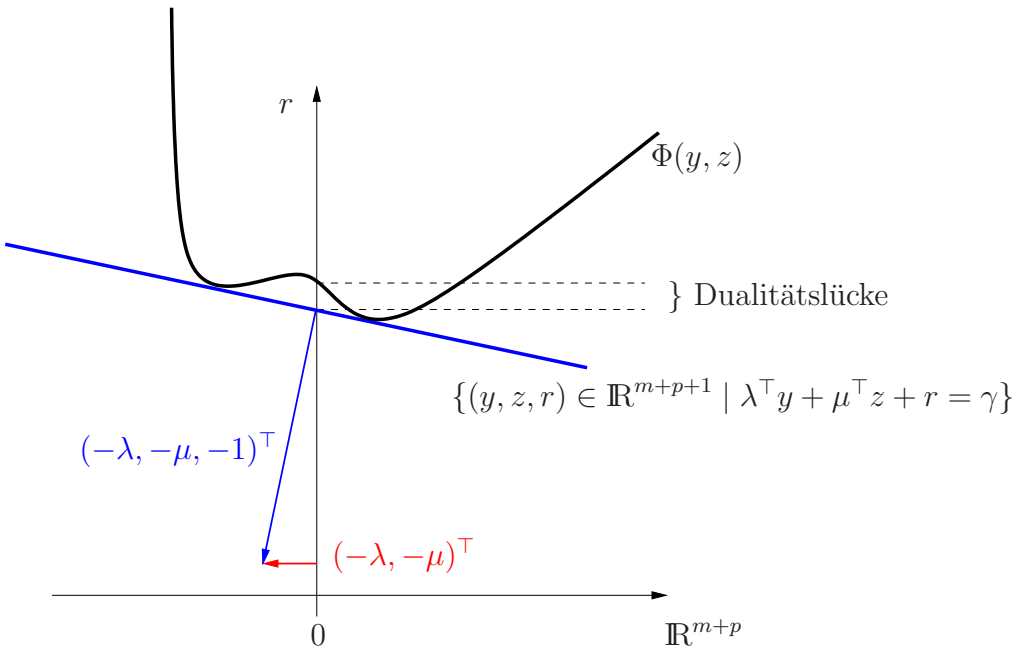


Abbildung 3.6: Grafische Interpretation des Dualproblems: Abstützung des Graphen der Minimalwertfunktion durch eine Hyperbene mit Normalenvektor $(\lambda,\mu,1)^\top$ bzw. $(-\lambda,-\mu,-1)^\top$ und Auftreten einer Dualitätslücke.

Satz 3.33 **(Starker Dualitätssatz)**
$X \subseteq \mathbb{R}^n$ sei nichtleer und konvex. Die Funktionen f und g_i, $i = 1,\dots,m$ seien konvex. Die Funktionen h_j, $j = 1,\dots,p$ seien affin linear[3]*. Es seien $w(P)$ bzw. $w(D)$ die Zielfunktionswerte des Primal- bzw. Dualproblems. Es sei $w(P)$ endlich und es gebe ein $y \in relint(X)$*[4] *mit*

$$\begin{aligned} g_i(y) &< 0, \qquad i = 1,\dots,m, \\ h_j(y) &= 0, \qquad j = 1,\dots,p \end{aligned}$$

*(***Slater Bedingung***). Dann ist das Dualproblem lösbar und es gilt $w(P) = w(D)$.*

Beweis: (siehe [GK02], S. 323)
Seien $h_j(x) = a_j^\top x - \gamma_j$, $j = 1,\dots,p$. Zunächst setzen wir voraus, daß die Vektoren a_j, $j = 1,\dots,p$ linear unabhängig sind und daß das Innere von X nichtleer ist. Definiere

$$Q := \{(y,z,r) \in \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^p \times \mathbb{R} \mid \exists x \in X : g(x) \le y,\ h(x) = z,\ f(x) \le r\}.$$

Es läßt sich zeigen, daß Q konvex und nichtleer ist. Der Punkt $(0,0,w(P))$ ist kein innerer Punkt von Q, denn andernfalls gäbe es ein $\delta > 0$ mit $(0,0,w(P)-\delta) \in Q$ im

[3] $h_j(x) = a_j^\top x - \gamma_j$ mit $a_j \in \mathbb{R}^n$ und $\gamma_j \in \mathbb{R}$
[4] Die Definition des relativ Inneren einer Menge findet sich in Anhang B

© 2003 by M. Gerdts

Widerspruch zur Minimalität von $w(P)$. Nach dem Trennungssatz 2.1 in Anhang B gibt es eine trennende Hyperebene, die $(0, 0, w(P))$ enthält und Q in einem ihrer abgeschlossenen Halbräume enthält. Mit anderen Worten: Es gibt einen von Null verschiedenen Vektor $(0, 0, 0) \neq (\hat{\lambda}, \hat{\mu}, \hat{\gamma}) \in \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^p \times \mathbb{R}$ mit

$$\hat{\gamma} w(P) \leq \hat{\lambda}^\top y + \hat{\mu}^\top z + \hat{\gamma} r \qquad \forall (y, z, r) \in Q. \tag{3.9}$$

Da mit $(y, z, r) \in Q$ auch $(y, z, r + \delta) \in Q$ für alle $\delta \geq 0$ gilt, folgt, daß $\hat{\gamma} \geq 0$ gelten muß, da $w(P)$ endlich ist. Analog folgt auch $\hat{\lambda} \geq 0$.

Zeige: $\hat{\gamma} > 0$.

Annahme: $\hat{\gamma} = 0$. Dann folgt aus (3.9)

$$0 \leq \hat{\lambda}^\top y + \hat{\mu}^\top z \qquad \forall (y, z, r) \in Q$$

bzw.

$$0 \leq \hat{\lambda}^\top g(x) + \hat{\mu}^\top h(x) \qquad \forall x \in X. \tag{3.10}$$

Für das y aus der Slater-Bedingung gilt speziell $g(y) < 0$ und $h(y) = 0$. Damit folgt sofort $\hat{\lambda} = 0$. (3.10) läßt sich damit neu formulieren:

$$0 \leq \hat{\mu}^\top (h(x) - h(y)) = \left(\sum_{j=1}^{p} \hat{\mu}_j a_j \right)^\top (x - y) \qquad \forall x \in X. \tag{3.11}$$

Wir hatten vorausgesetzt, daß das Innere von X nichtleer ist, also sind das Innere von X und $relint(X)$ identisch. Wegen $y \in relint(X)$ ist y ein innerer Punkt von X. Damit gilt $y \pm \varepsilon_k e_k \in X$ für hinreichend kleines $\varepsilon_k > 0$ für alle Einheitsvektoren e_k, $k = 1, \ldots, n$. Aus (3.11) folgt für diese Punkte

$$0 \leq \pm \varepsilon_k \left(\sum_{j=1}^{p} \hat{\mu}_j a_j \right)_k, \qquad k = 1, \ldots, n.$$

Daraus folgt

$$0 = \sum_{j=1}^{p} \hat{\mu}_j a_j$$

und mit der vorausgesetzten linearen Unabhängigkeit der a_j folgt $\hat{\mu} = 0$. Wir haben also insgesamt $(\hat{\lambda}, \hat{\mu}, \hat{\gamma}) = (0, 0, 0)$, im Widerspruch zu $(\hat{\lambda}, \hat{\mu}, \hat{\gamma}) \neq (0, 0, 0)$.

Also gilt $\hat{\gamma} > 0$ und o.B.d.A. können wir $\hat{\gamma} = 1$ wählen. Mit $y = g(x), z = h(x), r = f(x)$ folgt aus (3.9)

$$w(P) \leq f(x) + \hat{\lambda}^\top g(x) + \hat{\mu}^\top h(x) \qquad \forall x \in X$$

bzw.

$$w(P) \leq \inf_{x \in X} L(x, \hat{\lambda}, \hat{\mu}) = \psi(\hat{\lambda}, \hat{\mu}).$$

© 2003 by M. Gerdts

Andererseits gilt

$$\psi(\hat{\lambda}, \hat{\mu}) \leq \sup_{\lambda \geq 0, \mu \in \mathbb{R}^p} \psi(\lambda, \mu) = w(D).$$

Beides zusammen ergibt $w(P) \leq w(D)$ und nach dem schwachen Dualitätssatz muß Gleichheit gelten, also $w(P) = w(D)$. Damit ist die Behauptung unter den obigen Zusatzvoraussetzungen gezeigt.

Seien nun die Vektoren a_j, $j = 1, \ldots, p$ linear abhängig und X habe ein nichtleeres Inneres. Aufgrund der Slater-Bedingung hat das Gleichungssystem $a_j^\top x - \gamma_j = 0$, $j = 1, \ldots, p$ zumindest die Lösung y und einige Gleichungen sind linear abhängig. Eliminieren wir die linear abhängigen Gleichungen aus dem Optimierungsproblem, so befinden wir uns wieder im zuerst diskutierten Fall der linear unabhängigen Restriktionen und der obige Beweis funktioniert wie zuvor. Schließlich ergänzen wir die weggelassenen linear abhängigen Gleichungsrestriktionen mit Multiplikator $\mu_j = 0$ in der Lagrangefunktion.

Es bleibt der Fall zu untersuchen, daß das Innere von X leer ist. Dann ist die affine Hülle $aff(X)$ ein affiner Unterraum des $\mathbb{R}^n$ mit Dimension $k < n$ und kann als

$$aff(X) = \{x \in \mathbb{R}^n \mid x = Cu + d,\ u \in \mathbb{R}^k\}$$

mit einer Matrix $C \in \mathbb{R}^{n \times k}$ vom Rang k und einem Vektor $d \in \mathbb{R}^n$ dargestellt werden. Betrachte nun das transformierte Problem $(\bar{P})$

$$\min_u \bar{f}(u) \text{ unter } u \in U,\ \bar{g}(u) \leq 0,\ \bar{h}(u) = 0,$$

wobei

$$\begin{aligned} \bar{f}(u) &:= f(Cu + d), \\ \bar{g}(u) &:= g(Cu + d), \\ \bar{h}(u) &:= h(Cu + d), \\ U &:= \{u \in \mathbb{R}^k \mid Cu + d \in X\}. \end{aligned}$$

Es zeigt sich, daß dieses transformierte Problem die Voraussetzungen des Satzes erfüllt, wobei der durch $y = C\hat{u} + d$ gegebene Vektor $\hat{u} \in \mathbb{R}^k$ die Rolle des Slaterpunktes übernimmt. Da $y \in relint(X)$ gilt, ist $\hat{u}$ im Inneren von U. Das zum transformierten Problem gehörende duale Problem $(\bar{D})$ ist also lösbar und es gilt $w(\bar{P}) = w(\bar{D})$. Ausserdem hat sich der Zielfunktionswert durch die Transformation nicht verändert und es gilt $w(P) = w(\bar{P})$. Für die duale Zielfunktion gilt

$$\bar{\psi}(\lambda, \mu) = \inf_{u \in U} \left(\bar{f}(u) + \lambda^\top \bar{g}(u) + \mu^\top \bar{h}(u) \right)$$

© 2003 by M. Gerdts

$$
\begin{aligned}
&= \inf_{Cu+d\in X} \Big(f(Cu+d) + \lambda^\top g(Cu+d) + \mu^\top h(Cu+d) \Big) \\
&= \inf_{x\in X} \Big(f(x) + \lambda^\top g(x) + \mu^\top h(x) \Big) \\
&= \psi(\lambda,\mu).
\end{aligned}
$$

Die beiden dualen Zielfunktionen stimmen also miteinander überein. Damit ist alles gezeigt. □

Bemerkung 3.8

Der starke Dualitätssatz kann noch weiter abgeschwächt werden, da auf die Gültigkeit der Slaterbedingung für affin-lineare Ungleichungsrestriktionen verzichtet werden kann.

Der Vorteil des Dualproblems besteht darin, daß die duale Zielfunktion $\psi(\lambda,\mu)$ auf ihrer **Domäne (wesentlicher Definitionsbereich)**

$$dom(\psi) := \{(\lambda,\mu)^\top \in \mathbb{R}^{m+p} \mid \lambda \geq 0,\ \psi(\lambda,\mu) > -\infty\}$$

konkav ist, d.h. $-\psi$ ist konvex, siehe [GK02], S. 320. Damit ist das zum Dualprogramm äquivalente Problem $\min_{\lambda\geq 0,\mu\in\mathbb{R}^p} -\psi(\lambda,\mu)$ ein konvexes Problem und kann u.U. leichter gelöst werden als das zugehörige Primalproblem (insbesondere falls die duale Zielfunktion ψ leicht berechenbar ist). Insbesondere ist jede Lösung des dualen Problems bereits ein globales Maximum der dualen Zielfunktion. Kann man zudem noch das Auftreten einer Dualitätslücke ausschliessen, so besteht ein möglicher Ansatz zur Lösung des Primalproblems darin, das duale Problem zu lösen. Gemäß Satz 3.32 hätte man dann auch das Primalproblem gelöst. Kann das Auftreten einer Dualitätslücke nicht ausgeschlossen werden, so liefert das Dualproblem gemäß Satz 3.31 zumindest eine untere Schranke des optimalen primalen Zielfunktionswerts (dies kann z.B. bei Branch&Bound Verfahren ausgenutzt werden).

Im Vorgriff auf Abschnitt 4.2 könnte ein konzeptionelles Subgradientenverfahren zur Lösung des dualen Problems wie folgt aussehen:

© 2003 by M. Gerdts

(i) Wähle eine Startschätzung $(\lambda^{(0)}, \mu^{(0)})^\top \in \mathbb{R}^{m+p}$ mit $\lambda^{(0)} \geq 0$ und setze $k = 0$.

(ii) Falls $(\lambda^{(k)}, \mu^{(k)})^\top$ einem geeigneten Abbruchkriterium genügt, STOP.

(iii) Berechne eine Lösung $x^{(k)}$ der Aufgabe

$$\min_{x \in X} L(x, \lambda^{(k)}, \mu^{(k)}).$$

Berechne z.B. mit Hilfe von Satz 3.34 einen Subgradienten $\xi := (\xi_1, \xi_2)^\top \in \mathbb{R}^{m+p}$ von $-\psi(\lambda^{(k)}, \mu^{(k)})$ und setze $d := (d_1, d_2)^\top = -\xi/\|\xi\|$.

(iv) Berechne

$$\begin{aligned} \lambda^{(k+1)} &= Proj_{\{\lambda \mid \lambda \geq 0\}} \left(\lambda^{(k)} + \alpha_k d_1\right), \\ \mu^{(k+1)} &= \mu^{(k)} + \alpha_k d_2 \end{aligned}$$

für eine geeignete Schrittweite $\alpha_k > 0$.

(v) Setze $k := k + 1$ und gehe zu (ii).

Eine detailliertere Darstellung des Verfahrens findet sich in [BS79] ab S. 196. Der Algorithmus ist lediglich konzeptionell, da wesentliche Teilschritte noch nicht näher beschrieben sind, etwa die Berechnung von $x^{(k)}$ oder α_k. Zur Wahl der Schrittweiten α_k sei auf Abschnitt 4.2 verwiesen. Die Berechnung der $x^{(k)}$ gestaltet sich mitunter schwierig. Daher ist diese Vorgehensweise nur für solche Problemstellungen geeignet, bei denen die Berechnung von $x^{(k)}$ einfach ist.

In Schritt (iii) des Algorithmus wird ein Subgradient der konvexen Funktion $-\psi(\lambda, \mu)$ benötigt. Der folgende Satz liefert einen speziellen Subgradienten:

Satz 3.34

Sei X nichtleer und kompakt und f, g_i, $i = 1, \ldots, m$ und h_j, $j = 1, \ldots, p$ seien stetig auf X. Für gegebenes $\hat{\lambda} \in \mathbb{R}^m$ und $\hat{\mu} \in \mathbb{R}^p$ sei $\hat{x}$ eine Lösung des Problems

$$\min_{x \in X} L(x, \hat{\lambda}, \hat{\mu}).$$

Dann ist $(-g(\hat{x}), -h(\hat{x}))$ ein Subgradient von $-\psi$ in $(\hat{\lambda}, \hat{\mu})$.

Beweis: Beachte, daß das Minimierungsproblem für jedes (λ, μ), wohldefiniert ist, da X kompakt und f, g_i, h_j stetig sind. Insbesondere existiert $\hat{x}$. Weiterhin ist die duale Zielfunktion ψ unter den Voraussetzungen konkav bzw. $-\psi$ ist konvex.

© 2003 by M. Gerdts

Es gilt für alle λ, μ

$$\begin{aligned}
\psi(\lambda,\mu) &= \inf_{x\in X} L(x,\lambda,\mu) \\
&\leq L(\hat{x},\lambda,\mu) \\
&= f(\hat{x}) + \lambda^\top g(\hat{x}) + \mu^\top h(\hat{x}) \\
&= f(\hat{x}) + (\lambda-\hat{\lambda})^\top g(\hat{x}) + (\mu-\hat{\mu})^\top h(\hat{x}) + \hat{\lambda}^\top g(\hat{x}) + \hat{\mu}^\top h(\hat{x}) \\
&= \psi(\hat{\lambda},\hat{\mu}) + (\lambda-\hat{\lambda})^\top g(\hat{x}) + (\mu-\hat{\mu})^\top h(\hat{x})
\end{aligned}$$

Multiplikation mit -1 liefert

$$-\psi(\lambda,\mu) \geq -\psi(\hat{\lambda},\hat{\mu}) + (\lambda-\hat{\lambda})^\top(-g)(\hat{x}) + (\mu-\hat{\mu})^\top(-h)(\hat{x}).$$

□

© 2003 by M. Gerdts

Kapitel 4

Verfahren zur unrestringierten Optimierung

Gegenstand dieses Kapitels sind numerische Verfahren zur Lösung des

unrestringierten Optimierungsproblems (UOP):

$$\min f(x) \quad \text{unter} \quad x \in \mathbb{R}^n.$$

Darin sei $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ eine beliebige Funktion.

4.1 Das Verfahren von Nelder und Mead

Wir folgen der Darstellung von W. Alt [Alt02], welche auf dem Originalartikel [NM65] basiert.

In der Praxis erfreut sich das Verfahren von Nelder und Mead großer Beliebtheit, da es keinerlei Voraussetzungen an die zu minimierende Funktion f stellt. Insbesondere werden zur Durchführung des Algorithmus lediglich Funktionswerte von f benötigt. Allerdings gibt es auch keine allgemeinen Konvergenzaussagen und keine Garantie, daß das Verfahren tatsächlich ein (zumindest lokales) Minimium von f liefert. Für spezielle Funktionen und niedrige Raumdimensionen werden in [LRWW98] Konvergenzresultate erzielt. Jedoch sind diese Resultate nicht allgemein gültig, da in [McK98] Beispiele konstruiert werden, für die das Verfahren gegen nichtstationäre Punkte konvergiert. Es gibt neuerdings jedoch auch eine konvergente Modifikation des Verfahrens, vgl. [PCB02].

Das Verfahren basiert auf der Konstruktion von Simplizes.

Definition 4.1 **(Simplex)**
Seien $x^0, x^1, \ldots, x^n \in \mathbb{R}^n$ gegebene Vektoren, wobei die Vektoren $x^i - x^0$, $i = 1, \ldots, n$ linear unabhängig seien. Die konvexe Hülle

$$S = \left\{ x = \sum_{i=0}^{n} \lambda_i x^i \mid \lambda_i \geq 0,\ i = 0, 1, \ldots, n,\ \sum_{i=0}^{n} \lambda_i = 1 \right\}$$

dieser $n+1$ Punkte im $\mathbb{R}^n$ heißt **(n-dimensionales) Simplex mit Ecken** $x^0, x^1, \ldots, x^n$.

Zum Start des Verfahrens wird ein Simplex S_0 vorgegeben. Jeder Iterationsschritt des Verfahrens besteht aus folgenden Aktionen:

- Bestimme zum aktuellen Simplex S_k mit den Ecken $x^0, x^1, \ldots, x^n$ die Ecke x^m mit dem größten Funktionswert:

$$f(x^m) = \max\{f(x^0), f(x^1), \ldots, f(x^n)\}.$$

- Berechne einen Punkt y mit einem kleineren Funktionswert $f(y) < f(x^m)$ und ersetze x^m durch den neuen Punkt y. Damit erhält man einen neuen Simplex S_{k+1} zu den Punkten y und x^i, $i = 0, 1, \ldots, n$, $i \neq m$.

Für $j = 0, 1, \ldots, n$ sind die **Schwerpunkte der Ecken bzgl.** x^j durch

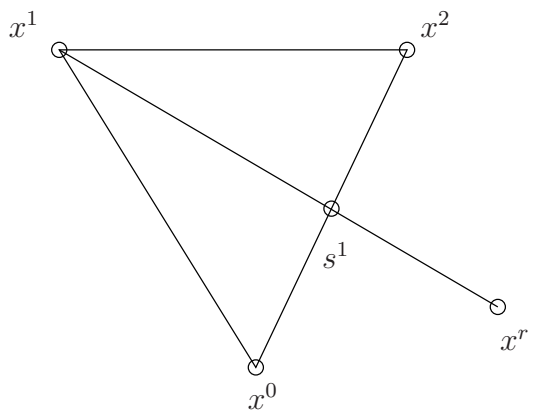
$$s^j = \frac{1}{n} \sum_{\substack{i=0 \\ i \neq j}}^{n} x^i$$

gegeben.

Zur Bestimmung des neuen Punktes y werden drei Konstruktionsprinzipien verwendet:

(i) **Reflektion**
Ein neuer Punkt x^r wird durch Reflektion der Ecke x^j am Schwerpunkt s^j bestimmt:

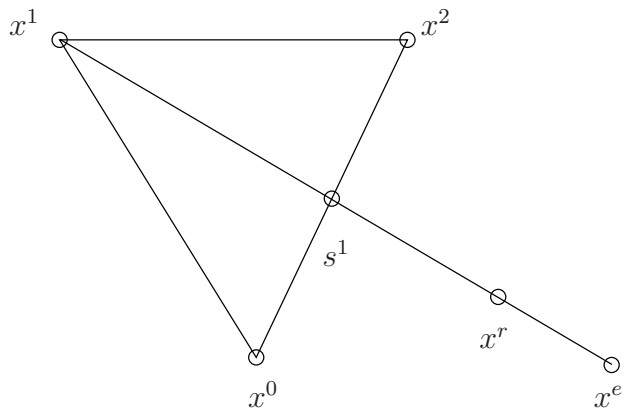
$$x^r = s^j + \gamma(s^j - x^j), \qquad 0 < \gamma \leq 1.$$



(ii) **Expansion**
Der Punkt x^e wird über x^r hinaus weiter nach außen in Richtung $s^j - x^j$ bzw. $x^r - s^j$ verschoben:

$$x^e = s^j + \beta(x^r - s^j), \qquad \beta > 1.$$

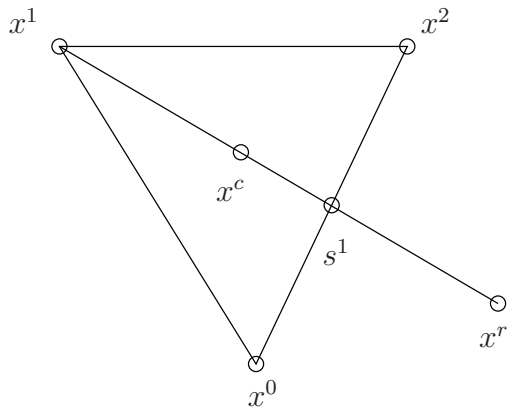
© 2003 by M. Gerdts



(iii) **Kontraktion**

– **Innere partielle Kontraktion**
Der Punkt x^c wird zwischen x^j und s^j verschoben:

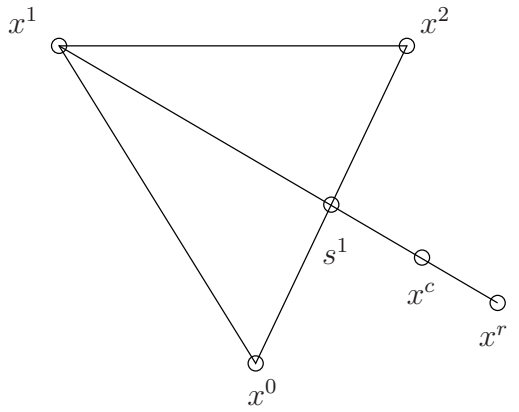
$$x^c = s^j + \alpha(x^j - s^j), \qquad 0 < \alpha < 1.$$



– **Äussere partielle Kontraktion**
Der Punkt x^c wird zwischen s^j und x^r verschoben:

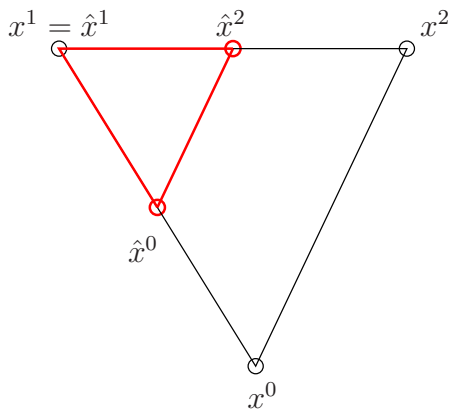
$$x^c = s^j + \alpha(x^r - s^j), \qquad 0 < \alpha < 1.$$

© 2003 by M. Gerdts



– **Totale Kontraktion**
Die Punkte x^i, $i = 0, 1, \ldots, n$ mit $i \neq j$ werden durch die Mittelpunkte der Strecken von x^j nach x^i ersetzt:

$$\hat{x}^i = x^i + \frac{1}{2}(x^j - x^i) = \frac{1}{2}(x^j + x^i)$$



Basierend auf diesen Konstruktionsprinzipien lautet das
<u>Verfahren von Nelder und Mead:</u>

(0) Gegeben seien Parameter $0 < \alpha < 1$, $\beta > 1$ und $0 < \gamma \leq 1$, sowie ein Startpunkt $x^{(0,0)} \in \mathbb{R}^n$. Setze $k = 0$.

(i) Bestimme die Eckpunkte des Startsimplex S_0:

$$x^{(0,i)} = x^{(0,0)} + e_i, \qquad i = 1, 2, \ldots, n.$$

(e_i bezeichnet den i-ten Einheitsvektor)

(ii) Bestimme einen Punkt $x^{(k,m)}$ mit

$$f(x^{(k,m)}) = \max\{f(x^{(k,0)}), \ldots, f(x^{(k,n)})\},$$

© 2003 by M. Gerdts

einen Punkt $x^{(k,l)}$ mit

$$f(x^{(k,l)}) = \min\{f(x^{(k,0)}), \ldots, f(x^{(k,n)})\},$$

sowie den Schwerpunkt bzgl. $x^{(k,m)}$

$$s^{(k,m)} = \frac{1}{n} \sum_{\substack{i=0 \\ i \neq m}}^{n} x^{(k,i)}.$$

(iii) Berechne den Punkt

$$x^r = s^{(k,m)} + \gamma(s^{(k,m)} - x^{(k,m)})$$

durch Reflektion von $x^{(k,m)}$ an $s^{(k,m)}$.

(iv) (a) Falls $f(x^r) < f(x^{(k,l)})$ gilt, ist x^r neuer minimaler Punkt. Versuche durch Expansion einen noch besseren Wert zu erhalten. Berechne

$$x^e = s^{(k,m)} + \beta(x^r - s^{(k,m)})$$

und ersetze $x^{(k,m)}$ durch den besten der beiden Punkte x^r und x^e:

$$x^{(k+1,m)} = \begin{cases} x^e, & \text{falls } f(x^e) < f(x^r), \\ x^r, & \text{falls } f(x^r) \leq f(x^e). \end{cases}$$

(b) Falls

$$f(x^{(k,l)}) \leq f(x^r) \leq \max\{f(x^{(k,j)}) \mid j \neq m\}$$

gilt, setze $x^{(k+1,m)} = x^r$. Hier ist x^r höchstens schlechter als $x^{(k,l)}$ und in der Regel besser als $x^{(k,m)}$.

(c) Falls

$$f(x^r) > \max\{f(x^{(k,j)}) \mid j \neq m\}$$

gilt, unterscheide folgende Fälle:

I. Falls $f(x^r) > f(x^{(k,m)})$ gilt, so ist x^r eine Verschlechterung und es ist möglicherweise ratsam, den Simplex nicht zu verlassen. Führe innere partielle Kontraktion durch und berechne

$$x^c = s^{(k,m)} + \alpha(x^{(k,m)} - s^{(k,m)}).$$

II. Falls $f(x^r) < f(x^{(k,m)})$ gilt, so ist x^r zumindest besser als $x^{(k,m)}$, allerdings schlechter als alle anderen Eckpunkte. Es ist möglicherweise ratsam, näher am Simplex zu suchen. Führe äussere partielle Kontraktion durch und berechne

$$x^c = s^{(k,m)} + \alpha(x^r - s^{(k,m)}).$$

© 2003 by M. Gerdts

Ist $f(x^c) < f(x^{(k,m)})$, setze $x^{(k+1,m)} = x^c$. Andernfalls haben wir trotz aller Versuche keine Verbesserung erreichen können und führen daher eine totale Kontraktion bzgl. des momentan besten Punktes $x^{(k,l)}$ durch und setzen

$$x^{(k+1,i)} = \frac{1}{2}(x^{(k,i)} + x^{(k,l)}), \qquad i \neq l.$$

(v) Setze $k = k + 1$ und gehe zu (ii).

Abbruchkriterien:

- Nelder und Mead schlagen folgendes Abbruchkriterium vor: Die Standardabweichung der Funktionswerte an den Simplexecken soll kleiner als eine vorgegebene Toleranz sein, d.h.

$$\left(\frac{1}{n+1}\sum_{i=0}^{n}\left(f(x^{(k,i)}) - \bar{f}_k\right)^2\right)^{1/2} < tol,$$

  wobei

$$\bar{f}_k = \frac{1}{n+1}\sum_{j=0}^{n} f(x^{(k,j)})$$

  den Mittelwert der Funktionswerte an den Simplexecken bezeichnet. Dieses Kriterium wird auch in der NAG-Version `E04CCF` des Verfahrens verwendet.

- In der MATLAB-Implementation `fminsearch` des Verfahrens wird das Verfahren abgebrochen, sobald der Durchmesser des Simplex S_k kleiner als eine gegebene Toleranz ist.

Bemerkung 4.1

Der Punkt $x^{(k,l)}$ kann als aktuelle Iterierte betrachtet werden, da dieser Punkt den minimalen Funktionswert unter allen Ecken des aktuellen Simplex S_k liefert. Per Konstruktion gilt zumindest

$$f(x^{(k+1,l)}) \leq f(x^{(k,l)}), \qquad k = 0, 1, \ldots.$$

Für die Konstanten haben sich in zahlreichen Anwendungen die Werte $0.4 \leq \alpha \leq 0.6$, $2 \leq \beta \leq 3$ und $\gamma = 1$ bewährt.

Beispiel 4.1

Wir wollen die in Beispiel 2.1 betrachtete exakte l_1-Penaltyfunktion mit $\alpha = 100$ minimieren, d.h. unsere Zielfunktion ist durch

$$l_1(x, y; \alpha) = f(x, y) + \alpha|h(x, y)| + \alpha \max\{0, g_1(x, y)\} + \alpha \max\{0, g_2(x, y)\}$$

© 2003 by M. Gerdts

mit

$$\begin{aligned} f(x,y) &= (x-2)^2 + (y-3)^2, \\ h(x,y) &= y + \frac{x}{2} - \frac{1}{2}, \\ g_1(x,y) &= y + 2x^2 - 2, \\ g_2(x,y) &= x^2 - y - 1, \end{aligned}$$

gegeben. Die Optimallösung lautet

$$x = \frac{3}{5}, \quad y = \frac{1}{5}, \quad f(x,y) = \frac{49}{5}.$$

Das Programm `fminsearch` *der* MATLAB-*Optimization Toolbox, welches eine Implementation des Verfahrens von Nelder und Mead darstellt, findet die Optimallösung ausgehend vom Startwert* $(0,0)^\top$ *tatsächlich. Aufruf von*

```
[x,val,exitflag,output] = fminsearch(@l1penalty,[0,0],...
                    optimset('TolX',1e-12,'Display','iter'))
```

wobei die Funktion in `l1penalty.m` *gemäß*

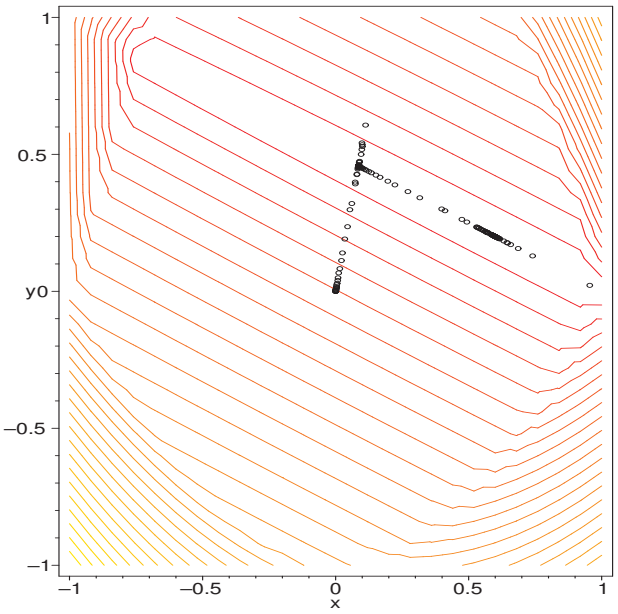
```
function f = l1penalty(x)
  alpha=100;
  f = (x(1)-2)^2 + (x(2)-3)^2 + alpha*abs(x(2)+x(1)/2-0.5) ...
                              + alpha*max(0,x(2)+2*x(1)^2-2) ...
                              + alpha*max(0,x(1)^2-x(2)-1);
```

gegeben ist, liefert die Ausgabe:

```
Optimization terminated successfully:
 the current x satisfies the termination criteria using OPTIONS.TolX of 1.000000e-12
 and F(X) satisfies the convergence criteria using OPTIONS.TolFun of 1.000000e-04
x =
  0.6000    0.2000
val =
  9.8000
exitflag =
   1
output =
  iterations: 180
   funcCount: 366
   algorithm: 'Nelder-Mead simplex direct search'
```

Die Abbildung veranschaulicht diejenigen Punkte, an denen Funktionsauswertungen vorgenommen wurden:

© 2003 by M. Gerdts



4.2 Subgradientenverfahren

Wir betrachten wiederum das unrestringierte Optimierungsproblem (UOP). Das Subgradientenverfahren verallgemeinert das aus der differenzierbaren Optimierung bekannte Gradientenverfahren.

4.2.1 Das Gradientenverfahren (Verfahren des steilsten Abstiegs)

Wir fassen das Gradientenverfahren kurz zusammen und setzen hierfür voraus, daß die Zielfunktion f stetig differenzierbar ist. Das Gradientenverfahren erzeugt bei gegebenem Startwert $x^{(0)}$ eine Folge $\{x^{(k)}\}$ von Näherungslösungen gemäß der iterativen Vorschrift

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k d^{(k)}, \quad k = 0, 1, 2, \ldots.$$

Die Idee des Gradientenverfahrens besteht nun darin, die Richtung des **steilsten Abstiegs** als Suchrichtung $d^{(k)}$ zu wählen:

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

Für stetig differenzierbare Funktionen f mit $\nabla f(x^{(k)}) \neq 0$ ist durch $d^{(k)}$ eine Abstiegsrichtung gegeben.

Definition 4.2 **(Abstiegsrichtung)**
Seien $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ und $x \in \mathbb{R}^n$. $d \in \mathbb{R}^n$ heißt **Abstiegsrichtung von f in x,** *falls es ein $\bar{\alpha} > 0$ gibt mit*

$$f(x + \alpha d) < f(x)$$

© 2003 by M. Gerdts

für alle $0 < \alpha \leq \bar{\alpha}$.

Hinreichende Bedingungen für eine Abstiegsrichtung liefert der folgende Hilfssatz.

Hilfssatz 4.1
Sei $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ *lokal lipschitzstetig in* x. d *ist eine Abstiegsrichtung von* f *in* x, *wenn eine der folgenden Bedingungen erfüllt ist.*

(a) $f^o(x; d) < 0$;

(b) $\lambda^\top d < 0$ *für alle* $\lambda \in \partial_o f(x)$.

Beweis: (siehe [MN92], S. 78)

(a) Aus

$$\limsup_{\alpha \downarrow 0} \frac{f(x + \alpha d) - f(x)}{\alpha} \leq \limsup_{y \to x, \alpha \downarrow 0} \frac{f(y + \alpha d) - f(y)}{\alpha} = f^o(x; d) < 0$$

folgt die Existenz eines $\bar{\alpha} > 0$ mit $f(x + \alpha d) - f(x) < 0$ für alle $0 < \alpha \leq \bar{\alpha}$, d.h. d ist Abstiegsrichtung.

(b) Folgt aus $f^o(x; d) = \max\{\lambda^\top d \mid \lambda \in \partial_o f(x)\} < 0$ und Teil (a). □

Die Schrittweite α_k wird durch eine geeignete Schrittweitenstrategie – etwa die Armijo-Regel oder die Wolfe-Powell-Regel oder die exakte eindimensionale Minimierung – bestimmt (vgl. [GK99]), so daß ein hinreichender **Abstieg** in der Zielfunktion erfolgt, d.h. es gilt $f(x^{(k+1)}) < f(x^{(k)})$ für alle k. Die Existenz einer Schrittweite $\alpha_k > 0$ mit dieser Abstiegseigenschaft ist für stetig differenzierbare Funktionen f und die Wahl $d^{(k)} = -\nabla f(x^{(k)})$ gesichert, falls $\nabla f(x^{(k)}) \neq 0$ gilt. Das Gradientenverfahren ist also ein **Abstiegsverfahren**.

Zusammenfassend lautet das Gradientenverfahren für differenzierbare Funktionen f:

© 2003 by M. Gerdts

Gradientenverfahren mit Armijoregel:

(i) Wähle eine Toleranz $\varepsilon \geq 0$, Konstanten $\sigma \in (0, 1/2)$ und $\beta \in (0, 1)$ und eine Startschätzung $x^{(0)} \in \mathbb{R}^n$ und setze $k = 0$.

(ii) Falls $\|\nabla f(x^{(k)})\| \leq \varepsilon$, STOP.

(iii) Setze $d^{(k)} = -\nabla f(x^{(k)})$ und bestimme $\alpha_k = \max\{\beta^j \mid j = 0, 1, 2, \ldots\}$ mit

$$f(x^{(k)} + \alpha_k d^{(k)}) \leq f(x^{(k)}) + \sigma \alpha_k \nabla f(x^{(k)})^\top d^{(k)}.$$

(iv) Setze $x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k d^{(k)}$, $k := k + 1$ und gehe zu (ii).

Es zeigt sich, daß jeder Häufungspunkt der durch das Gradientenverfahren erzeugten Folge ein **stationärer Punkt** von f ist.

Bemerkung 4.2

- *Die Wahl der Suchrichtung $d^{(k)} = -\nabla f(x^{(k)})$ kann auch wie folgt motiviert werden. Gesucht ist eine Richtung, die das Optimierungsproblem*

$$\min_{d \in \mathbb{R}^n, \|d\|=1} f'(x; d), \qquad f'(x; d) = \nabla f(x)^\top d$$

  löst. Das Resultat dieses Optimierungsproblems ist $d = -\nabla f(x)/\|\nabla f(x)\|$.

- *Für differenzierbare Funktionen f kann eine Abstiegsrichtung d von f in x auch durch die Bedingung $f'(x; d) = \nabla f(x)^\top d < 0$ charakterisiert werden. Hier bevorzugen wir jedoch die Definition 4.2, da diese für beliebige Funktionen f gültig ist.*

4.2.2 Das Subgradientenverfahren (für konvexe Funktionen)

In diesem Abschnitt wird vorausgesetzt, daß f **konvex** ist.
Es stellt sich die Frage, ob bzw. wie das Gradientenverfahren für nichtdifferenzierbare Problemstellungen modifiziert werden kann.

Idee des Subgradientenverfahrens:
Ersetze den Gradienten $\nabla f(x^{(k)})$ durch einen **beliebigen Subgradienten** $\lambda_k \in \partial_o f(x^{(k)})$.

Formal erhält man mit dieser Idee den folgenden Algorithmus, bei dem die Suchrichtung aus technischen Gründen auf die Länge 1 normiert wurde:

© 2003 by M. Gerdts

Subgradientenverfahren:

(i) Wähle eine Startschätzung $x^{(0)} \in \mathbb{R}^n$ und setze $k = 0$.

(ii) Falls $x^{(k)}$ einem geeigneten Abbruchkriterium genügt, STOP.

(iii) Berechne $\lambda^{(k)} \in \partial_o f(x^{(k)})$, setze $d^{(k)} = -\lambda^{(k)}/\|\lambda^{(k)}\|$ und

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k d^{(k)} \tag{4.1}$$

für eine geeignete Schrittweite $\alpha_k > 0$.

(iv) Setze $k := k + 1$ und gehe zu (ii).

Allerdings ergeben sich dabei sofort die folgenden Probleme.

- Ein beliebiger Subgradient muß nicht notwendig eine **Abstiegsrichtung** liefern (Insbesondere sind damit auch herkömmliche Schrittweitenregeln zur eindimensionalen Minimierung hinfällig.).

Beispiel 4.2 **(vgl. [GK02], S. 366, [HUL93], S. 2)**
Betrachte $f(x_1, x_2) = \max\{-x_1, x_1 + 2x_2, x_1 - 2x_2\}$ *und den Punkt* $x^{(0)} = (1, 0)^\top$. *Die Berechung des Subdifferentials in* $x^{(0)}$ *liefert*

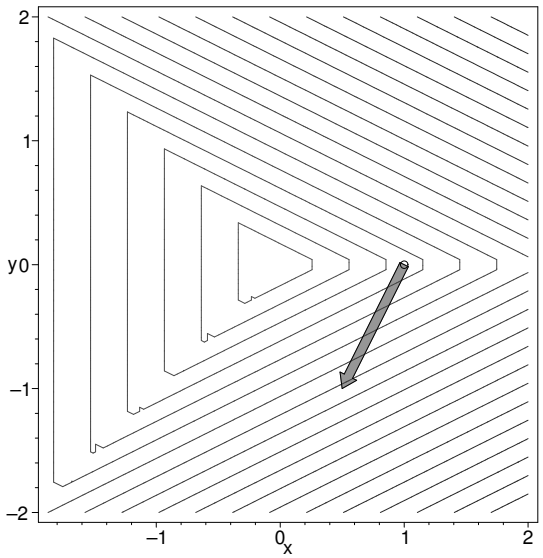
$$\partial_c f(1,0) = conv\left\{\begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ -2 \end{pmatrix}\right\}.$$

Wähle $\lambda = (1, 2)^\top \in \partial_c f(1, 0)$. *Wird analog zum Gradientenverfahren* $-\lambda$ *als Suchrichtung gewählt, ergibt sich für* $\alpha > 0$

$$\begin{aligned} f(1-\alpha, -2\alpha) &= \max\{-1+\alpha, 1-\alpha-4\alpha, 1-\alpha+4\alpha\} \\ &= \max\{-1+\alpha, 1-5\alpha, 1+3\alpha\} \\ &= 1+3\alpha > 1 = f(1,0). \end{aligned}$$

Also: $-\lambda$ *ist* **keine** *Abstiegsrichtung.*

© 2003 by M. Gerdts



- Die Formulierung geeigneter **Abbruchkriterien** ist problematisch, da nach Satz 3.21 lediglich $0 \in \partial_o f(\hat{x})$ im Optimum $\hat{x}$ gilt. Demzufolge macht es keinen Sinn, die Bedingung $\|\nabla f(x^{(k)})\| \leq \varepsilon$ durch $\|\lambda_k\| \leq \varepsilon$ zu ersetzen. Betrachte z.B. die Funktion $f(x) = |x|$. Für $x^{(k)} \neq 0$ hat man $\|\nabla f(x^{(k)})\| = 1$, auch wenn $x^{(k)}$ dem Optimum $x = 0$ beliebig nahe kommt. Selbst wenn man sich bereits im Optimum $x = 0$ befinden sollte, merkt man es mitunter nicht, sondern entfernt sich durch Wahl eines Subgradienten $0 \neq \lambda \in \partial_c f(0) = [-1, 1]$ sofort wieder aus dem Optimum.

- Die **Wahl der Schrittweite** α_k muß modifiziert werden. Denn wir haben für die nichtdifferenzierbare Funktion

$$f(x_1, x_2) = \begin{cases} 5\sqrt{9x_1^2 + 16x_2^2}, & \text{für } x_1 \geq |x_2|, \\ 9x_1 + 16|x_2|, & \text{für } 0 < x_1 < |x_2|, \\ 9x_1 + 16|x_2| - x_1^3, & \text{für } x_1 \leq 0 \end{cases} \tag{4.2}$$

  (vgl. Übung 1, Aufgabe 3) gesehen, daß die üblichen Schrittweitenstrategien (Armijoregel, konstante Schrittweite, exakte eindimensionale Minimierung) nicht zum Erfolg führen, selbst dann nicht, wenn stets Abstiegsrichtungen vorliegen sollten, was nach Beispiel 4.2 noch nicht einmal der Fall sein muß.

- Wie können Subgradienten numerisch bestimmt werden?

Die Frage nach der numerischen Berechnung eines Subgradienten wird ansatzweise in Abschnitt 4.2.3 beantwortet. In einigen Fällen ist es auch möglich, das Subdifferential explizit zu berechnen, etwa mit Hilfe der Rechenregeln in Abschnitt 3.4.1. Daher setzen wir ab hier die Gültigkeit der folgenden Annahme voraus.

© 2003 by M. Gerdts

Annahme 4.1

Es ist ein Verfahren (Black-Box) vorhanden, welches für gegebenes x einen beliebigen Subgradienten $\lambda \in \partial_o f(x)$ berechnet.

Die Nicht-Abstiegsproblematik einer Suchrichtung läßt sich beim oben formulierten Subgradientenverfahren nicht umgehen. Daher ist das Subgradientenverfahren **kein Abstiegsverfahren**. Später werden wir im Zusammenhang mit dem ε-Subgradientenverfahren und der Bundle-Methode jedoch auch Abstiegsverfahren kennen lernen.
Die Suche nach einem geeigneten Abbruchkriterium stellt sich als sehr schwierig heraus und läßt sich nicht zufriedenstellend beantworten.
Die gute Nachricht ist: Die Frage nach einer geeigneten Schrittweite läßt sich beantworten. Es wird sich zeigen, daß die Wahl einer geeigneten Schrittweite α_k äußerst einfach ist. Man wähle eine Schrittweitenfolge $\{\alpha_k\}$, die den Anforderungen

$$\alpha_k > 0, \quad \lim_{k\to\infty} \alpha_k = 0, \quad \sum_{k=0}^{\infty} \alpha_k = \infty \tag{4.3}$$

genügt. Die letzten beiden Bedingungen erzwingen, daß die Schrittweitenfolge zwar gegen Null konvergiert, dieses jedoch nicht zu schnell geschieht. Eine geeignete Schrittweitenfolge ist demnach z.B.

$$\alpha_k = \frac{1}{1+k}, \quad k = 0, 1, 2, \ldots.$$

Beachte, daß diese Schrittweitenfolge völlig unabhängig vom Problem, d.h. von f, ist. Es ist eine **off-line** gewählte Schrittweitenfolge.
Zur Motivation der letzten Bedingung in (4.3) nehmen wir an, daß $\Lambda := \sum_{k=0}^{\infty} \alpha_k < \infty$ gilt und $\{x^{(k)}\}$ eine durch das Subgradientenverfahren erzeugte Folge ist. Dann gilt (beachte $\|d^{(k)}\| = 1$)

$$\begin{aligned} \|x^{(0)} - x^{(k)}\| &\leq \|x^{(0)} - x^{(1)}\| + \|x^{(1)} - x^{(2)}\| + \ldots + \|x^{(k-1)} - x^{(k)}\| \\ &= \alpha_0 + \alpha_1 + \ldots + \alpha_{k-1} \leq \Lambda. \end{aligned}$$

Mit anderen Worten: Die gesamte Folge $\{x^{(k)}\}$ verbleibt in einer Umgebung $U_\Lambda(x^{(0)})$ des Startwerts. Liegt das Optimum $\hat{x}$ außerhalb dieser Umgebung, so kann keine Konvergenz eintreten. Daher muß die Schrittweitenfolge so gewählt werden, daß $\Lambda = \infty$ gilt.
Die Forderung $\alpha_k \downarrow 0$ ist durch den folgenden Hilfssatz motiviert.

Hilfssatz 4.2

Sei f konvex. Seien $x^{(k)}$ keine Minimalstelle und $\hat{x}$ eine beliebige Minimalstelle von f. Dann gibt es $\bar{\alpha}_k > 0$, so daß für die Iteration (4.1) gilt

$$\|x^{(k+1)} - \hat{x}\| < \|x^{(k)} - \hat{x}\| \qquad \forall\, 0 < \alpha_k < \bar{\alpha}_k.$$

© 2003 by M. Gerdts

Beweis: (vgl. [Zow85])
Für die euklidische Norm gilt

$$\begin{aligned}
\|\hat{x} - x^{(k+1)}\|^2 &= \|\hat{x} - x^{(k)} + \alpha_k \lambda^{(k)}/\|\lambda^{(k)}\|\|^2 \\
&= \left(\hat{x} - x^{(k)} + \alpha_k \lambda^{(k)}/\|\lambda^{(k)}\|\right)^\top \left(\hat{x} - x^{(k)} + \alpha_k \lambda^{(k)}/\|\lambda^{(k)}\|\right) \\
&= \|\hat{x} - x^{(k)}\|^2 + 2\alpha_k \underbrace{\left(\lambda^{(k)}/\|\lambda^{(k)}\|\right)^\top (\hat{x} - x^{(k)})}_{=:b_k} + \alpha_k^2 \underbrace{\left(\lambda^{(k)}\right)^\top \lambda^{(k)}/\|\lambda^{(k)}\|^2}_{=1} \\
&= \|\hat{x} - x^{(k)}\|^2 + 2\alpha_k b_k + \alpha_k^2.
\end{aligned}$$

Wegen $\lambda^{(k)} \in \partial_c f(x^{(k)})$ folgt speziell

$$f(\hat{x}) \geq f(x^{(k)}) + \left(\lambda^{(k)}\right)^\top (\hat{x} - x^{(k)}).$$

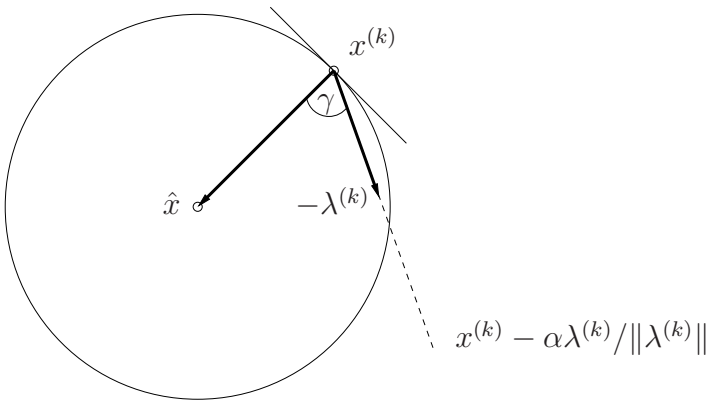
Und damit

$$b_k \leq \frac{f(\hat{x}) - f(x^{(k)})}{\|\lambda^{(k)}\|} < 0. \tag{4.4}$$

Damit gilt $2\alpha_k b_k + \alpha_k^2 < 0$, falls $0 < \alpha_k < -2b_k =: \bar{\alpha}_k$ gilt. Mit der Abschätzung folgt dann

$$\|\hat{x} - x^{(k+1)}\| < \|\hat{x} - x^{(k)}\|.$$

Anschaulich: Wegen $b_k < 0$ muß der Winkel γ zwischen $\hat{x} - x^{(k)}$ und $-\lambda^{(k)}$ zwischen $-\pi/2$ und $\pi/2$ liegen, vgl. Skizze. An der Skizze sieht man sofort, daß sich der Abstand $\|\hat{x} - x^{(k+1)}\|$ für hinreichend kleines α im Vergleich zu $\|\hat{x} - x^{(k)}\|$ (Kreis) verringert.



□

Genügt die Schrittweite α_k den Bedingungen (4.3), so läßt sich die Konvergenz des Subgradientenverfahrens beweisen. Dazu wird noch die Hilfsfolge

$$\begin{aligned}
m_0 &:= f(x^{(0)}), \\
m_{k+1} &:= \min\{m_k, f(x^{(k+1)})\}, \qquad k = 0, 1, 2, \ldots
\end{aligned}$$

© 2003 by M. Gerdts

benötigt, die den besten bis zur Iteration $k+1$ erreichten Funktionswert bezeichnet (zur Erinnerung: das Subgradientenverfahren ist kein Abstiegsverfahren!).

Satz 4.1

Sei f konvex und die Lösungsmenge des unrestringierten Optimierungsproblems sei nichtleer. Es bezeichne

$$\hat{f} := \min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x)$$

den optimalen Zielfunktionswert. Seien $\{x^{(k)}\}$ und $\{m_k\}$ die vom Subgradientenverfahren erzeugten Folgen, wobei die Schrittweite α_k gemäß (4.3) gewählt sei.
Dann konvergiert die Folge $\{m_k\}$ gegen $\hat{f}$.

Beweis: (vgl. [GK02], S. 307)
$\{m_k\}$ ist monoton fallend und nach unten durch $\hat{f}$ beschränkt. Damit ist sie konvergent. Der Grenzwert sei $\hat{m}$.
Annahme: $\hat{m} > \hat{f}$
Sei $\hat{f} < \alpha < \hat{m}$ gewählt und $lev(f, \alpha) = \{x \in \mathbb{R}^n \mid f(x) \leq \alpha\}$ die zugehörige Niveaumenge.
Sei $\hat{x} \in \mathbb{R}^n$ ein Vektor mir $f(\hat{x}) < \alpha$. Da f konvex ist, ist sie auch stetig und somit ist $\hat{x}$ ein innerer Punkt von $lev(f, \alpha)$ (das Urbild der offenen Menge $\{f \in \mathbb{R} \mid f < \alpha\}$ unter der stetigen Abbildung f ist offen). Damit existiert $\delta > 0$, so daß $x \in lev(f, \alpha)$ für alle $\|x - \hat{x}\| \leq \delta$. Für die Vektoren

$$z^{(k)} := \hat{x} + \delta \frac{\lambda^{(k)}}{\|\lambda^{(k)}\|}$$

gilt dann $z^{(k)} \in lev(f, \alpha)$ für alle k. Wegen $\lambda^{(k)} \in \partial_c f(x^{(k)})$ folgt andererseits

$$\begin{aligned} \underbrace{f(z^{(k)})}_{\leq \alpha} &\geq \underbrace{f(x^{(k)})}_{\geq m_k \geq \hat{m} > \alpha} + \left(\lambda^{(k)}\right)^\top (z^{(k)} - x^{(k)}) \\ &> \alpha + \left(\lambda^{(k)}\right)^\top (z^{(k)} - x^{(k)}) \end{aligned}$$

bzw.

$$\left(\lambda^{(k)}\right)^\top (z^{(k)} - x^{(k)}) < 0$$

bzw. mit $d^{(k)} = -\lambda^{(k)}/\|\lambda^{(k)}\|$ und $z^{(k)} = \hat{x} - \delta d^{(k)}$

$$\left(d^{(k)}\right)^\top (x^{(k)} - \hat{x}) < -\delta \qquad \forall k \in \mathbb{N}.$$

Analog zur ersten Formel im Beweis von Hilfssatz 4.2 folgt für die euklidische Norm

$$\begin{aligned} \|\hat{x} - x^{(k+1)}\|^2 &= \|\hat{x} - x^{(k)}\|^2 + 2\alpha_k \underbrace{\left(d^{(k)}\right)^\top (x^{(k)} - \hat{x})}_{< -\delta} + \alpha_k^2 \\ &< \|\hat{x} - x^{(k)}\|^2 - 2\delta\alpha_k + \alpha_k^2 \\ &= \|\hat{x} - x^{(k)}\|^2 + \alpha_k(\alpha_k - 2\delta). \end{aligned}$$

© 2003 by M. Gerdts

Wegen $\alpha_k \downarrow 0$ gibt es ein $k_o \in \mathbb{N}$ mit $\alpha_k \leq \delta$ für alle $k \geq k_0$. Also gilt

$$\|\hat{x} - x^{(k+1)}\|^2 < \|\hat{x} - x^{(k)}\|^2 - \delta\alpha_k \qquad \forall k \geq k_0.$$

Aufsummieren dieser Ungleichungen liefert

$$\delta \sum_{j=k_0}^{l} \alpha_j < \|x^{(k_0)} - \hat{x}\|^2 - \|x^{(l+1)} - \hat{x}\|^2 \leq \|x^{(k_0)} - \hat{x}\|^2 \qquad \forall l \geq k_0.$$

Dies liefert einen Widerspruch, da die rechte Seite beschränkt ist und die Summe nach Voraussetzung gegen ∞ strebt. □

Bemerkung 4.3

- *Dieselben Resultate gelten auch für das projizierte Subgradientenverfahren zur Lösung des Problems*

  $$\min_{x \in X} f(x),$$

  wobei $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ konvex und $X \subseteq \mathbb{R}^n$ eine nichtleere, abgeschlossene und konvexe Menge ist. Die Iterationsvorschrift (4.1) im Subgradientenverfahren wird hierbei durch die Projektion

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

  ersetzt, vgl. [GK02].

- *Kennt man – aus irgendwelchen Gründen – den optimalen Zielfunktionswert $\hat{f}$, so läßt sich eine „optimale“ Schrittweite formulieren, die aus dem Beweis von Hilfssatz 4.2 abgeleitet werden kann:*

  $$\alpha_k = \frac{f(x^{(k)}) - \hat{f}}{\|\lambda^{(k)}\|}.$$

  Speziell folgt diese Wahl aus der Darstellung

  $$\|\hat{x} - x^{(k+1)}\|^2 = \|\hat{x} - x^{(k)}\|^2 + 2\alpha_k b_k + \alpha_k^2$$

  und (4.4), da die Parabel $\alpha_k^2 + 2\alpha_k b_k$ für $\alpha_k = -b_k$ ihr Minimum annimmt. Diese Schrittweitenwahl liefert unter geeigneten Voraussetzungen eine R-lineare Konvergenzrate.

  Ein typisches Beispiel, bei dem der optimale Zielfunktionswert a priori bekannt ist, ist die Bestimmung eines zulässigen Punktes x mit $g_i(x) \leq 0$, $i = 1, \ldots, m$. Diese Aufgabe ist äquivalent zu $\min f(x)$ mit $f(x) = \max\{0, g_1(x), \ldots, g_m(x)\}$. Falls ein zulässiger Punkt existiert, so gilt $\hat{f} = 0$.

© 2003 by M. Gerdts

Ein Hauptnachteil des Subgradientenverfahrens besteht in der sehr langsamen Konvergenzgeschwindigkeit.

Satz 4.2

Die Konvergenzgeschwindigkeit der durch das Subgradientenverfahren konstruierten Folge $\{x^{(k)}\}$ mit Schrittweite gemäß (4.3) ist langsamer als R-linear[1].

Beweis: Es gelte $x^{(k)} \to \hat{x}$.

Annahme: Die Konvergenzgeschwindigkeit ist R-linear, d.h. es gibt $0 < C < 1$ und $M > 0$ mit

$$\|x^{(k)} - \hat{x}\| \leq M \cdot C^k \qquad \forall k \geq k_0.$$

O.B.d.A. sei $k_0 = 0$. Damit gilt

$$\begin{aligned} \alpha_k &= \|x^{(k+1)} - x^{(k)}\| \\ &\leq \|x^{(k+1)} - \hat{x}\| + \|\hat{x} - x^{(k)}\| \\ &\leq M \cdot C^{k+1} + M \cdot C^k = M \cdot C^k (C+1). \end{aligned}$$

Summation über alle Schrittweiten liefert

$$\sum_{k=0}^{\infty} \alpha_k \leq M(C+1) \sum_{k=0}^{\infty} C^k = \frac{M(C+1)}{1-C} < \infty.$$

Dies ist ein Widerspruch zur Wahl der Schrittweitenfolge $\{\alpha_k\}$. □

Bemerkung 4.4

Es gibt eine Variante des Subgradientenverfahrens mit Space-Dilation (Raumstreckung), die unter geeigneten Voraussetzungen eine R-lineare Konvergenzrate liefert, vgl. [Sho85] und [Zow85]. Dieses Verfahren basiert auf der Iteration

$$\begin{aligned} x^{(k+1)} &= x^{(k)} - \alpha_k d^{(k)}, \\ d^{(k)} &= H_k \lambda^{(k)} / \sqrt{(\lambda^{(k)})^\top H_k \lambda^{(k)}}, \qquad \lambda^{(k)} \in \partial_o f(x^{(k)}), \\ H_{k+1} &= t_k \left(H_k - \beta_k d^{(k)} \left(d^{(k)} \right)^\top \right), \qquad H_0 = I, \\ t_k &= \frac{n^2}{n^2-1}, \quad \beta_k = \frac{2}{n+1}, \quad \alpha_k = \frac{1}{n+1}. \end{aligned}$$

Desweiteren gibt es Erweiterungen des Subgradientenverfahrens auf nichtkonvexe Probleme.

[1] Lineare Konvergenz impliziert R-lineare Konvergenz. Da das Subgradientenverfahren langsamer als R-linear konvergent ist, ist es auch langsamer als linear konvergent.

© 2003 by M. Gerdts

4.2.3 Numerische Berechnung von Subgradienten

(Siehe Shor [Sho85])

Für konvexe Funktionen f kann die Monotonie der Richtungsableitungen $f'(x;h)$ ausgenutzt werden, um die Richtungsableitung numerisch zu approximieren und eine vorgegebene Genauigkeit einzuhalten. Für $t > 0$ gilt

$$\frac{f(x+th)-f(x)}{t} \geq f'(x;h) \geq \frac{f(x)-f(x-th)}{t}.$$

Da die Werte

$$\frac{f(x+th)-f(x)}{t} \qquad \text{und} \qquad \frac{f(x)-f(x-th)}{t}$$

numerisch berechnet werden können (finite Differenzen), hat man somit eine obere und untere Schranke für den Wert der Richtungsableitung zur Verfügung. Durch geeignete Wahl von $t > 0$ läßt sich eine vorgegebene Fehlertoleranz einhalten.

Betrachtet man die Definition des Gradienten

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

so erkennt man, daß die i-te Komponente gerade die Richtungsableitung von f in Richtung des i-ten Einheitsvektors e_i darstellt, d.h.

$$\frac{\partial f}{\partial x_i}(x) = f'(x;e_i), \qquad i = 1,2,\ldots,n.$$

Mit den obigen Bemerkungen zur Approximation von Richtungsableitungen kann der Gradient $\nabla f(x)$ approximiert werden, falls er in x existiert.

Ist die Funktion f nicht differenzierbar, so ist in [Sho85] ein Verfahren angegeben, welches für konvexe Funktionen f zu vorgegebenen Toleranzen $\varepsilon, \delta > 0$ ein $\bar{x}$ mit $\|x - \bar{x}\| < \delta$ und eine Approximation

$$\lambda^* = \begin{pmatrix} \frac{f(\bar{x}+h_n e_1)-f(\bar{x}-h_n e_1)}{2h_n} \\ \frac{f(\bar{x}+h_n e_2)-f(\bar{x}-h_n e_2)}{2h_n} \\ \vdots \\ \frac{f(\bar{x}+h_n e_n)-f(\bar{x}-h_n e_n)}{2h_n} \end{pmatrix}$$

mit $\|\lambda^* - \lambda\| < \varepsilon/2$ für ein $\lambda \in \partial_c f(\bar{x})$ konstruiert. Der Algorithmus berechnet also einen Vektor λ^*, der beliebig nahe am Subdifferential $\partial_c f(\bar{x})$ ist, wobei $\bar{x}$ beliebig nahe an x ist.

© 2003 by M. Gerdts

4.3 ε-Subgradientenverfahren

Wir betrachten wiederum das unrestringierte Optimierungsproblem (UOP) und setzen voraus, daß die Zielfunktion f konvex ist.

Ein Nachteil des Subgradientenverfahrens lag darin begründet, daß ein beliebiger Subgradient $\lambda^{(k)} \in \partial_c f(x^{(k)})$ keine Abstiegsrichtung $d^{(k)} = -\lambda^{(k)}/\|\lambda^{(k)}\|$ liefern muß, vgl. Beispiel 4.2. Insbesondere kann dann auch keine Liniensuche zur eindimensionalen Minimierung der Funktion f in dieser Richtung durchgeführt werden. Das wiederum hatte zur Folge, daß die Schrittweite α_k im Subgradientenverfahren offline gemäß (4.3) gewählt werden mußte.

Ein anderer Subgradient aus $\partial_c f(x^{(k)})$ hingegen kann sehr wohl eine Abstiegsrichtung liefern und wäre als Suchrichtung besser geeignet. Der Vorteil einer Abstiegsrichtung besteht darin, daß eine Liniensuche zur Bestimmung der Schrittweite α_k durchgeführt werden kann. D.h., die Schrittweite α_k müßte nicht mehr – wie im Subgradientenverfahren – offline bestimmt werden, sondern ist an die Funktion f gekoppelt. In Beispiel 4.2 würde z.B. der Subgradient $(1,0)^\top$ die Abstiegsrichtung $d = -\lambda = (-1,0)^\top$ liefern. Diese Richtung ist für das angegebene Beispiel sehr gut, da sie vom Punkt $x^{(0)} = (1,0)^\top$ direkt in Richtung des Optimums $\hat{x} = (0,0)^\top$ zeigt.

4.3.1 Bestimmung einer Abstiegsrichtung

Es stellt sich die Frage, wie Abstiegsrichtungen im nichtdifferenzierbaren Fall bestimmt werden können. Wir erinneren uns zunächst an das Gradientenverfahren für differenzierbare Funktionen. Die Wahl der Suchrichtung $d^{(k)}$ kann auch wie folgt motiviert werden. Gesucht ist eine Lösung $d^{(k)}$ des Problems

$$\min_{d\in\mathbb{R}^n, \|d\|\le 1} f'(x^{(k)}; d) = \min_{d\in\mathbb{R}^n, \|d\|\le 1} \nabla f(x^{(k)})^\top d.$$

Das Resultat ist die normierte Suchrichtung $d^{(k)} = -\nabla f(x^{(k)})/\|\nabla f(x^{(k)})\|$.

Für konvexe Funktionen kann ein entsprechendes Problem formuliert werden:

$$\min_{d\in\mathbb{R}^n, \|d\|\le 1} f'(x^{(k)}; d). \tag{4.5}$$

Dieses Problem ist wohldefiniert, da die Richtungsableitung für konvexe Funktionen existiert, vgl. Satz 3.6. Nach Hilfssatz 3.1 gilt

$$f'(x^{(k)}; d) = \max_{\lambda\in\partial_c f(x^{(k)})} \lambda^\top d.$$

Damit lautet (4.5)

$$\min_{d\in\mathbb{R}^n, \|d\|\le 1} \max_{\lambda\in\partial_c f(x^{(k)})} \lambda^\top d. \tag{4.6}$$

© 2003 by M. Gerdts

Da die Mengen $\|d\| \leq 1$ und $\partial_c f(x^{(k)})$ nichtleer, konvex und kompakt sind, können min und max in (4.6) vertauscht werden und es folgt das äquivalente Problem

$$\max_{\lambda \in \partial_c f(x^{(k)})} \min_{d \in \mathbb{R}^n, \|d\| \leq 1} \lambda^\top d. \tag{4.7}$$

Das innere Problem kann für gegebenes λ gelöst werden und es gilt $d = -\lambda/\|\lambda\|$. Damit wiederum folgt aus (4.7) das Problem

$$\max_{\lambda \in \partial_c f(x^{(k)})} -\|\lambda\|$$

bzw. schließlich

$$\min_{\lambda \in \partial_c f(x^{(k)})} \|\lambda\|. \tag{4.8}$$

Es gilt also, einen Subgradienten $\lambda^{(k)} \in \partial_c f(x^{(k)})$ mit minimaler euklidischer Norm zu finden. Da $\partial_c f(x^{(k)})$ nichtleer, konvex und kompakt ist, existiert stets eine Lösung $\lambda^{(k)}$. Die Suchrichtung

$$d^{(k)} = -\frac{\lambda^{(k)}}{\|\lambda^{(k)}\|} \tag{4.9}$$

minimiert die Richtungsableitung $f'(x^{(k)}; \cdot)$. Es gilt $f'(x^{(k)}; d^{(k)}) = -\|\lambda^{(k)}\| \leq 0$. Daraus ergibt sich ein schönes **Abbruchkriterium**. Falls die Aufgabe (4.8) die Lösung $\lambda^{(k)} = 0$ liefert, ist die notwendige und hinreichende Bedingung aus Satz 3.22 erfüllt und $x^{(k)}$ ist optimal.

4.3.2 Algorithmus des ε-Subgradientenverfahrens

Es gibt noch eine gravierendere Schwierigkeit, die auch durch die Wahl von Abstiegsrichtungen gemäß (4.8) und (4.9) nicht beseitigt werden kann.

Beispiel 4.3

Betrachte wiederum die Funktion

$$f(x_1, x_2) = \begin{cases} 5\sqrt{9x_1^2 + 16x_2^2}, & \text{für } x_1 \geq |x_2|, \\ 9x_1 + 16|x_2|, & \text{für } 0 < x_1 < |x_2|, \\ 9x_1 + 16|x_2| - x_1^3, & \text{für } x_1 \leq 0 \end{cases}$$

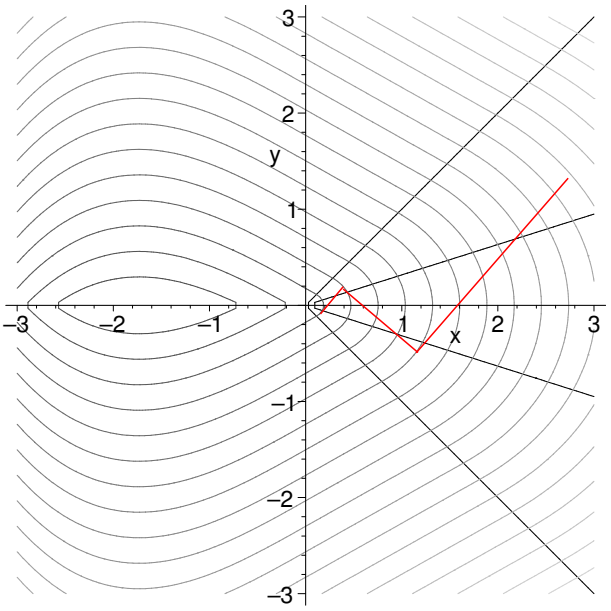
Sie ist nicht differenzierbar für $x_1 \leq 0, x_2 = 0$. Da f fast überall differenzierbar ist, existiert der Gradient fast überall und der negative normierte Gradient liefert folglich eine Abstiegsrichtung gemäß (4.8) und (4.9). Dennoch zeigt dieses Beispiel, daß das Vorhandensein einer Abstiegsrichtung in Verbindung mit einer eindimensionalen Liniensuche alleine nicht zum Erfolg führt. Startet man in einem Punkt $x^{(0)} = (x_1, x_2)^\top$ mit $x_1 > |x_2| > (9/16)^2 x_1$ und verwendet die eindimensionale exakte Minimierung zur Bestimmung einer Schrittweite $\alpha_k > 0$, so nähert sich die Folge $\{x^{(k)}\}$ dem nicht optimalen Punkt $(0, 0)^\top$ in einem orthogonalen Zick-Zack-Kurs beliebig nahe an, allerdings ohne

© 2003 by M. Gerdts

diesen Punkt jemals zu erreichen. Da die Funktion f in den Iterierten differenzierbar ist und das Subdifferential nur aus dem Gradienten besteht, wird stets der normierte negative Gradient als Suchrichtung verwendet.

Im Punkt $(0,0)^\top$ ist die Funktion f nicht differenzierbar und das Hilfsproblem zur Bestimmung einer Suchrichtung würde die normierte Suchrichtung $(-1,0)^\top$ liefern, welche dann in einem Schritt zum Optimum $\hat{x} = (-\sqrt{3},0)^\top$ führen würde.

Das prinzipielle Problem der Subgradientenmethode ist hier, daß das Subdifferential insbesondere in einer sehr kleinen Umgebung von $(0,0)^\top$ zu klein ist. Es enthält keine Informationen über die Subgradienten in der Nähe eines Punktes. Dies wäre aber wichtig, da man dann z.B. in der Nähe von $(0,0)^\top$ anstatt des negativen Gradienten in $x^{(k)}$ beispielsweise den normierten Subgradienten $(-1,0)^\top$ aus dem Subdifferential im Punkt $(0,0)^\top$ wählen könnte.

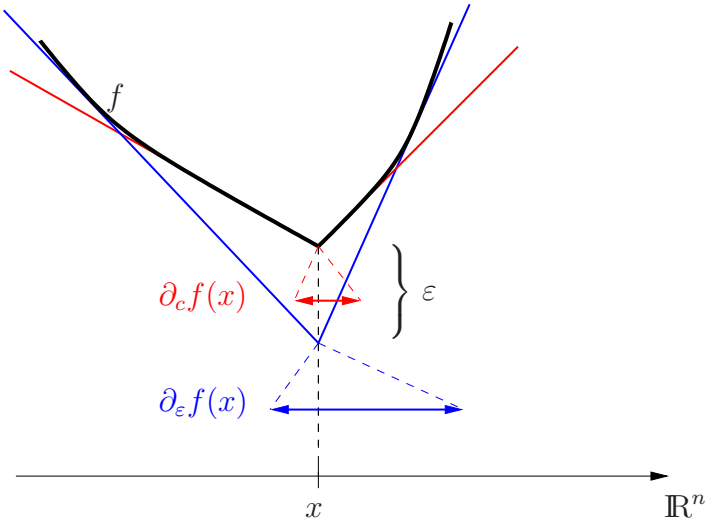


Das Beispiel zeigt, daß es wichtig ist, das Subdifferential zu vergrößern, so daß es auch Informationen über die Subgradienten in Nachbarpunkten enthält und bessere Abstiegsrichtungen generiert werden. Hier kommt nun das ε-Subdifferential ins Spiel. In Satz 3.14 wurde gezeigt, daß

$$\partial_c f(y) \subseteq \partial_\varepsilon f(x) \qquad \forall y \in U_{\frac{\varepsilon}{2L}}(x)$$

für alle $\varepsilon \geq 0$ gilt. Damit leistet das ε-Subdifferential genau das Gewünschte: Es enthält Informationen über die Subgradienten in einer gewissen Umgebung von x.

© 2003 by M. Gerdts



Zusammenfassend entsteht das folgende ε-Subgradientenverfahren, indem die Abstiegsrichtung gemäß (4.9) und (4.8) bestimmt wird, wobei das Subdifferential $\partial_c f(x^{(k)})$ in (4.8) durch das ε-Subdifferential $\partial_\varepsilon f(x^{(k)})$ ersetzt wird. Die Schrittweite wird anders als im Subgradientenverfahren nicht offline gewählt, sondern analog zum differenzierbaren Gradientenverfahren durch eine geeignete eindimensionale Minimierungsregel bestimmt. Ein mögliches **Abbruchkriterium** ergibt sich aus Satz 3.23, falls der Fall $\lambda^{(k)} = 0$ eintreten sollte (Später werden wir sehen, daß dieser Fall tatsächlich eintritt, falls der optimale Zielfunktionswert endlich ist.). Es gilt dann $f(x^{(k)}) \leq f(y) + \varepsilon$ für alle $y \in \mathbb{R}^n$.

ε-Subgradientenverfahren:

(i) Wähle eine Startschätzung $x^{(0)} \in \mathbb{R}^n$, $\varepsilon > 0$ und setze $k = 0$.

(ii) Falls $x^{(k)}$ einem geeigneten Abbruchkriterium genügt, STOP.

(iii) Berechne $\lambda^{(k)} \in \partial_\varepsilon f(x^{(k)})$ mit

$$\|\lambda^{(k)}\| = \min_{\lambda \in \partial_\varepsilon f(x^{(k)})} \|\lambda\|$$

und setze $d^{(k)} = -\lambda^{(k)}$.

(iv) Berechne

$$f(x^{(k)} + \alpha_k d^{(k)}) = \min_{\alpha > 0} f(x^{(k)} + \alpha d^{(k)}) \tag{4.10}$$

und setze

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

(v) Setze $k := k + 1$ und gehe zu (ii).

© 2003 by M. Gerdts

Bemerkung 4.5

Auf die Normierung der Suchrichtung $d^{(k)}$ in Schritt (iii) kann aufgrund der Schrittweitenbestimmung in (4.10) verzichtet merden.

4.3.3 Konvergenz des ε-Subgradientenverfahrens

Analog zur Herleitung der Abstiegsrichtung in Abschnitt 4.3.1 zeigt sich mit Hilfe von Satz 3.13, daß

$$d^{(k)} = -\frac{\lambda^{(k)}}{\|\lambda^{(k)}\|}$$

mit

$$\|\lambda^{(k)}\| = \min_{\lambda \in \partial_\varepsilon f(x^{(k)})} \|\lambda\|$$

die ε-Richtungsableitung $f'_\varepsilon(x^{(k)}; \cdot)$ über der nichtleeren, konvexen und kompakten Menge $\|d\| \leq 1$ minimiert und es gilt

$$f'_\varepsilon(x^{(k)}; d^{(k)}) = -\|\lambda^{(k)}\|.$$

<u>Fall 1:</u> $\lambda^{(k)} = 0$

Es folgt $0 \in \partial_\varepsilon f(x^{(k)})$. Gemäß Satz 3.23 ist $x^{(k)}$ bereits ε-optimal und das Verfahren kann beendet werden.

<u>Fall 2:</u> $\lambda^{(k)} \neq 0$

Es folgt $0 \notin \partial_\varepsilon f(x^{(k)})$ und $\|\lambda^{(k)}\| > 0$. Aus der Definition der ε-Richtungsableitung (vgl. Definition 3.7) ergibt sich

$$f'_\varepsilon(x^{(k)}; d^{(k)}) = \inf_{\alpha > 0} \frac{f(x^{(k)} + \alpha d^{(k)}) - f(x^{(k)}) + \varepsilon}{\alpha} = -\|\lambda^{(k)}\| < 0.$$

Für ein geeignetes $\alpha > 0$ gilt damit

$$f(x^{(k)} + \alpha d^{(k)}) < f(x^{(k)}) - \varepsilon.$$

Für die Wahl von α_k gemäß (4.10) folgt dann die Beziehung

$$f(x^{(k+1)}) = f(x^{(k)} + \alpha_k d^{(k)}) < f(x^{(k)}) - \varepsilon.$$

Mit anderen Worten: Der Funktionswert von f nimmt in jeder Iteration um mindestens $\varepsilon > 0$ ab. Damit ist folgendes Konvergenzresultat bewiesen:

Satz 4.3

Seien $\hat{f} = \inf f(x)$ und $\{x^{(k)}\}$ die durch das ε-Subgradientenverfahren erzeugte Folge zu einem beliebigen Startpunkt $x^{(0)}$. Dann gilt eine der folgenden Aussagen:

(a) Falls $\hat{f} = -\infty$ ist, so gilt $\lim_{k\to\infty} f(x^{(k)}) = -\infty$.

© 2003 by M. Gerdts

(b) Falls $\hat{f} > -\infty$ ist, dann gibt es einen Index $k_0 \in \mathbb{N}$ mit $f(x^{(k_0)}) \leq \hat{f} + \varepsilon$.

Aussage (b) bedeutet gerade, daß das ε-Subgradientenverfahren nach **endlich vielen Schritten** in einem ε-optimalen Punkt endet, falls der optimale Zielfunktionswert endlich ist.
Aus Aussage (b) folgt weiter

$$f(x^{(k_0)}) \leq \hat{f} + \varepsilon \leq f(y) + \varepsilon \qquad \forall y \in \mathbb{R}^n.$$

Nach Satz 3.23 ist dies äquivalent mit $0 \in \partial_\varepsilon f(x^{(k_0)})$.

Fazit:
Ist der optimale Zielfunktionswert endlich, so bricht das ε-Subgradientenverfahren nach **endlich vielen Schritten** in einem ε-optimalen Punkt $x^{(k_0)}$ mit $0 \in \partial_\varepsilon f(x^{(k_0)})$ ab.

Bemerkung 4.6
Der Parameter $\varepsilon > 0$ muß nicht konstant gehalten werden. Eine mögliche Strategie zur dynamischen Anpassung von ε besteht darin, ε zu halbieren, sobald die Abbruchbedingung $\lambda^{(k)} = 0$ erreicht wird, und das Verfahren dann fortzusetzen. Dadurch wird eine Folge $\{x^{(k)}\}$ erzeugt, die gegen den optimalen Zielfunktionswert $\hat{f}$ konvergiert.

Trotz dieses sehr schönen Konvergenzresultats hat das ε-Subgradientenverfahren den **entscheidenden Nachteil**, daß das ε-Subdifferential bereits für sehr einfache Funktionen äußerst kompliziert zu berechnen ist, z.B. ergibt sich für $f(x) = |x|$ das ε-Subdifferential

$$\partial_\varepsilon f(x) = \begin{cases} [-1, -1 - \varepsilon/x], & \text{falls } x < -\varepsilon/2, \\ [-1, 1], & \text{falls } -\varepsilon/2 \leq x \leq \varepsilon/2, \\ [1 - \varepsilon/x, 1], & \text{falls } x > \varepsilon/2. \end{cases}$$

In der Praxis ist das ε-Subdifferential daher i.a. unbekannt und der Algorithmus ist so nicht durchführbar. Allerdings wird der nächste Abschnitt zeigen, wie das ε-Subdifferential numerisch approximiert werden kann.

4.4 Bundle-Methode

Wir betrachten wiederum das unrestringierte Optimierungsproblem (UOP) und setzen voraus, daß die Zielfunktion f konvex ist. Die Idee der Bundle-Methode besteht darin, das ε-Subdifferential im ε-Subgradientenverfahren durch ein darin enthaltenes Polytop zu ersetzen, vgl. Abbildung 4.1. Ist die Approximation des ε-Subdifferentials durch das Polytop hinreichend gut, so wird eine Suchrichtung generiert, die einen hinreichenden Abstieg der Zielfunktion ermöglicht. Stellt sich die Approximation als zu schlecht heraus,

© 2003 by M. Gerdts

muß das Polytop erweitert werden, um einen hinreichend gute Approximation des ε-Subdifferentials zu gewährleisten.

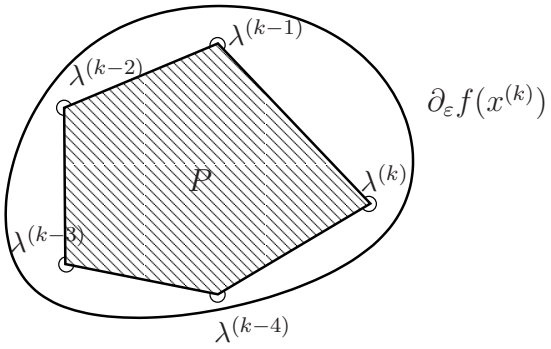


Abbildung 4.1: Idee der Bundle-Methode: Innere Approximation des ε-Subdifferentials $\partial_\varepsilon f(x^{(k)})$ durch ein Polytop P.

4.4.1 Innere Approximation des ε-Subdifferentials

Da wir davon ausgehen, daß $\partial_\varepsilon f(x^{(k)})$ im k-ten Iterationsschritt nicht zur Verfügung steht, müssen wir mit Subgradienten $\lambda^{(j)} \in \partial_c f(x^{(j)})$, $j = 0, 1, 2, \ldots$ arbeiten und versuchen, $\partial_\varepsilon f(x^{(k)})$ mit diesen Informationen geeignet zu approximieren.

<u>Idee:</u>
Verwende das **Bündel von Subgradienten** bestehend aus dem aktuellen Subgradienten $\lambda^{(k)} \in \partial_c f(x^{(k)})$ und den Subgradienten $\lambda^{(j)} \in \partial_c f(x^{(j)})$ aus den vorangegangenen Iterationsschritten $j = 0, 1, \ldots, k-1$, um das ε-Subdifferential $\partial_\varepsilon f(x^{(k)})$ durch Konvexkombinationen

$$\sum_{j=0}^{k} c_j \lambda^{(j)} \qquad \text{mit} \qquad \sum_{j=0}^{k} c_j = 1,\ c_j \geq 0,\ j = 0, 1, \ldots, k \tag{4.11}$$

zu approximieren, vgl. Abbildung 4.1.

<u>Problem:</u> Wann ist eine Konvexkombination der Form (4.11) in $\partial_\varepsilon f(x^{(k)})$ enthalten?

Um diese Frage zu beantworten, betrachten wir die
<u>Linearisierung von f in $y \in \mathbb{R}^n$ für $\lambda \in \partial_c f(y)$</u>

$$\bar{f}(x; y, \lambda) := f(y) + \lambda^\top (x - y)$$

und den

© 2003 by M. Gerdts

Linearisierungsfehler in $x \in \mathbb{R}^n$

$$e(x, y, \lambda) := f(x) - \bar{f}(x; y, \lambda).$$

Speziell seien die Linearisierungsfehler in $x^{(k)}$ für die Linearisierungen in $y = x^{(j)}$ und $\lambda = \lambda^{(j)}$ für $j = 0, 1, \ldots, k$ bezeichnet durch

$$e_j^k := e(x^{(k)}, x^{(j)}, \lambda^{(j)}) = f(x^{(k)}) - f(x^{(j)}) - \left(\lambda^{(j)}\right)^\top \left(x^{(k)} - x^{(j)}\right). \tag{4.12}$$

Der folgende Hilfssatz liefert eine innere Approximation des ε-Subdifferentials in $x^{(k)}$.

Hilfssatz 4.3

Sei $\varepsilon > 0$ gegeben. Für $j = 0, 1, \ldots, k$ seien Punkte $x^{(j)} \in \mathbb{R}^n$ und Subgradienten $\lambda^{(j)} \in \partial_c f(x^{(j)})$ gegeben.

(i) Es seien Zahlen $c_j \geq 0$, $j = 0, 1, \ldots, k$ mit $\sum_{j=0}^k c_j = 1$ gegeben und es gelte

$$\sum_{j=0}^k c_j e_j^k \leq \varepsilon.$$

Dann gilt

$$\sum_{j=0}^k c_j \lambda^{(j)} \in \partial_\varepsilon f(x^{(k)}).$$

(ii) Es gilt

$$P_\varepsilon^k := \left\{ \sum_{j=0}^k c_j \lambda^{(j)} \mid \sum_{j=0}^k c_j e_j^k \leq \varepsilon,\ \sum_{j=0}^k c_j = 1,\ c_j \geq 0,\ j = 0, 1, \ldots, k \right\} \subseteq \partial_\varepsilon f(x^{(k)}).$$

(iii) Die Menge P_ε^k ist nichtleer, konvex und kompakt.

Beweis: Aussage (ii) folgt sofort aus (i). Zeige (i): Wegen $\lambda^{(j)} \in \partial_c f(x^{(j)})$ folgt mit (4.12) sofort

$$e_j^k \geq 0, \quad j = 0, 1, \ldots, k-1, \quad e_k^k = 0.$$

Für alle $x \in \mathbb{R}^n$ und alle $j = 0, 1, \ldots, k$ gilt

$$\begin{aligned}
\left(\lambda^{(j)}\right)^\top (x - x^{(k)}) &= \underbrace{\left(\lambda^{(j)}\right)^\top (x - x^{(j)})}_{\leq f(x) - f(x^{(j)}),\ \text{da } \lambda^{(j)} \in \partial_c f(x^{(j)})} - \left(\lambda^{(j)}\right)^\top (x^{(k)} - x^{(j)}) \\
&\leq f(x) - f(x^{(j)}) - \left(\lambda^{(j)}\right)^\top (x^{(k)} - x^{(j)}) \\
&= f(x) - f(x^{(k)}) + e_j^k.
\end{aligned}$$

Multiplikation mit $c_j \geq 0$ und anschließende Addition liefert

$$\sum_{j=0}^k c_j \left(\lambda^{(j)}\right)^\top (x - x^{(k)}) \leq f(x) - f(x^{(k)}) + \sum_{j=0}^k c_j e_j^k \leq f(x) - f(x^{(k)}) + \varepsilon \qquad \forall x \in \mathbb{R}^n$$

© 2003 by M. Gerdts

bzw.

$$f(x^{(k)}) + \sum_{j=0}^{k} c_j \left(\lambda^{(j)}\right)^\top (x - x^{(k)}) - \varepsilon \leq f(x) \qquad \forall x \in \mathbb{R}^n.$$

Also: $\sum_{j=0}^{k} c_j \lambda^{(j)} \in \partial_\varepsilon f(x^{(k)})$.

(iii): Wegen $e_k^k = 0$ ist $\lambda^{(k)} \in P_\varepsilon^k$ (wähle $c_i = 0$, $i \neq k$ und $c_k = 1$). Die Kompaktheit folgt aus der Kompaktheit von $\partial_\varepsilon f(x^{(k)})$, vgl. Satz 3.13. Die Konvexität rechnet man leicht nach. □

4.4.2 Bestimmung der Suchrichtung

Im vorangegangen Abschnitt wurde gezeigt, daß die Menge P_ε^k im ε-Subdifferential $\partial_\varepsilon f(x^{(k)})$ enthalten ist und zudem nichtleer, konvex und kompakt ist. Sie besitzt daher formal dieselben Eigenschaften wie $\partial_\varepsilon f(x^{(k)})$, die nötig waren, um eine Abstiegsrichtung $d^{(k)}$ im ε-Subgradientenverfahren herleiten zu können, vgl. die Abschnitte 4.3.1 und 4.3.3. Es liegt daher nahe, die (i.a. nicht berechenbare) Menge $\partial_\varepsilon f(x^{(k)})$ in Schritt (iii) des ε-Subgradientenverfahrens durch die berechenbare Menge P_ε^k zu ersetzen[2].

Schritt (iii) des ε-Subgradientenverfahrens lautet dann:

Bestimme $z^{(k)} \in P_\varepsilon^k$ mit

$$\|z^{(k)}\| = \min_{z \in P_\varepsilon^k} \|z\|. \tag{4.13}$$

Wir nutzen die spezielle Struktur von P_ε^k aus und leiten ein äquivalentes Problem her. Jedes Element $z \in P_\varepsilon^k$ kann als

$$z = \sum_{j=0}^{k} c_j \lambda^{(j)}$$

mit

$$\sum_{j=0}^{k} c_j e_j^k \leq \varepsilon, \quad \sum_{j=0}^{k} c_j = 1, \quad c_j \geq 0, \quad j = 0, 1, \ldots, k$$

[2] **Vorsicht:** Die aus der Approximation resultierende Suchrichtung ist i.a. **keine** Abstiegsrichtung mehr (Gegenbeispiel?) und es kann somit auch nicht ohne Weiteres eine eindimensionale Liniensuche wie in Schritt (iv) durchgeführt werden. Dieser Problematik wird später durch die Einführung sogenannter **Nullschritte** Rechnung getragen.

© 2003 by M. Gerdts

geschrieben werden. Damit ist (4.13) äquivalent mit dem

konvexen quadratischen Optimierungsproblem

$$\begin{array}{lrcl} \text{Minimiere} & \frac{1}{2}\Big\|\sum_{j=0}^{k} c_j\lambda^{(j)}\Big\|^2 & & \\ \text{bzgl.} & c_j,\ j=0,1,\ldots,k, & & \\ \text{unter} & \sum_{j=0}^{k} c_j e_j^k & \leq & \varepsilon, \\ & \sum_{j=0}^{k} c_j & = & 1, \\ & c_j & \geq & 0, \quad j=0,1,\ldots,k. \end{array} \tag{4.14}$$

Bezeichnet c_j^k, $j = 0, 1, \ldots, k$ die optimale Lösung des quadratischen Problems, so ist das zugehörige Element $z^{(k)}$ aus (4.13) durch

$$z^{(k)} = \sum_{j=0}^{k} c_j^k \lambda^{(j)}$$

gegeben. Hieraus resultiert die (nicht normierte) Suchrichtung

$$d^{(k)} = -z^{(k)}. \tag{4.15}$$

Bemerkung 4.7

Falls $z^{(k)} = 0$ auftritt, kann das Verfahren abgebrochen werden, denn wegen $z^{(k)} \in P_\varepsilon^k \subseteq \partial_\varepsilon f(x^{(k)})$ folgt $0 \in \partial_\varepsilon f(x^{(k)})$. Somit ist $x^{(k)}$ ε-optimal. Wegen $P_\varepsilon^k \subseteq \partial_\varepsilon f(x^{(k)})$ ist allerdings nicht garantiert, daß der Fall $z^{(k)} = 0$ tatsächlich eintritt, denn es könnte $0 \in \partial_\varepsilon f(x^{(k)})$ aber $0 \notin P_\varepsilon^k$ gelten.

Die Wahl des Parameters $\varepsilon > 0$ in (4.14) ist problematisch. Wegen $f(x^{(k+1)}) < f(x^{(k)}) - \varepsilon$ im ε-Subgradientenverfahren sollte ε möglichst groß sein, damit die Abnahme des Zielfunktionswerts beim Übergang von $x^{(k)}$ zu $x^{(k+1)}$ möglichst groß wird (optimal wäre $\varepsilon = f(x^{(k)}) - \hat{f}$, wobei $\hat{f}$ den optimalen Zielfunktionswert bezeichnet). Andererseits muß P_ε^k eine möglichst gute Approximation von $\partial_\varepsilon f(x^{(k)})$ darstellen, um überhaupt einen Abstieg um ε erreichen zu können (beachte, daß die Suchrichtung $d^{(k)}$ in (4.15) nicht einmal eine Abstiegsrichtung zu sein braucht!). Dies erfordert i.a. ein kleines ε.

4.4.3 Alternative Methoden zur Berechnung einer Suchrichtung

Da die Wahl von ε problematisch ist, werden in der Literatur (siehe z.B. [Kiw85], [LSB81], [Sch89]) anstatt des quadratischen Optimierungsproblems (4.14) häufig verwandte Opti-

© 2003 by M. Gerdts

mierungsprobleme zur Berechnung einer Suchrichtung verwendet, die von anderen Parametern als ε abhängen.

Variante 1:
Der Term $\sum_{j=0}^{k} c_j e_j^k$ aus der ersten Nebenbedingung in (4.14) wird mit einem Parameter $\eta \geq 0$ an die Zielfunktion gekoppelt. Daraus resultiert das konvexe quadratische Optimierungsproblem

$$\boxed{\begin{array}{ll} \text{Minimiere} & \frac{1}{2}\Big\|\sum_{j=0}^{k} c_j \lambda^{(j)}\Big\|^2 + \eta \sum_{j=0}^{k} c_j e_j^k \\ \text{bzgl.} & c_j,\ j = 0, 1, \ldots, k, \\ \text{unter} & \sum_{j=0}^{k} c_j = 1, \\ & c_j \geq 0, \quad j = 0, 1, \ldots, k. \end{array}} \tag{4.16}$$

Der Zusammenhang von (4.14) und (4.16) wird mit dem folgenden Hilfssatz klar.

Hilfssatz 4.4

(i) Ist $\hat{c}_j$, $j = 0, 1, \ldots, k$ eine Optimallösung von (4.14) und $\hat{\eta}$ ein zugehöriger Lagrange-Multiplikator der ersten Nebenbedingung in (4.14), so ist $\hat{c}_j$, $j = 0, 1, \ldots, k$ eine Optimallösung von (4.16) für $\eta = \hat{\eta}$.

(ii) Ist $\hat{c}_j$, $j = 0, 1, \ldots, k$ eine Optimallösung von (4.16) mit $\eta \geq 0$, so ist $\hat{c}_j$, $j = 0, 1, \ldots, k$ eine Optimallösung von (4.14) für

$$\varepsilon = \sum_{j=0}^{k} \hat{c}_j e_j^k.$$

Beweis: Übungsaufgabe

Aus Teil (ii) folgt mit Hilfssatz 4.3, daß für eine Lösung $\hat{c}_j$, $j = 0, 1, \ldots, k$ von (4.16) die Beziehung

$$\sum_{j=0}^{k} \hat{c}_j \lambda^{(j)} \in \partial_\zeta f(x^{(k)}), \qquad \zeta = \sum_{j=0}^{k} \hat{c}_j e_j^k$$

gilt.

Variante 2:
Diese Variante basiert auf dem **Schnittebenenverfahren**, welches mit einem **Trust-Region Ansatz** (siehe [Sch89]) gekoppelt ist. Beim Schnittebenenverfahren wird die

© 2003 by M. Gerdts

konvexe Funktion f von unten durch die Funktion

$$\begin{aligned} f_k^{CP}(x) &= \max_{j=0,1,\ldots,k} \left\{ f(x^{(j)}) + \left(\lambda^{(j)}\right)^\top (x - x^{(j)}) \right\} \\ &= f(x^{(k)}) + \max_{j=0,1,\ldots,k} \left\{ \left(\lambda^{(j)}\right)^\top (x - x^{(k)}) - e_j^k \right\} \end{aligned} \tag{4.17}$$

approximiert, wobei $\lambda^{(j)} \in \partial_c f(x^{(j)})$ gegebene Subgradienten sind, vgl. Abbildung 4.2. Wegen $\lambda^{(j)} \in \partial_c f(x^{(j)})$ gilt

$$f(x) \geq f(x^{(j)}) + \left(\lambda^{(j)}\right)^\top (x - x^{(j)}) \qquad \forall j = 0, 1, \ldots, k,\ x \in \mathbb{R}^n$$

und folglich

$$f(x) \geq \max_{j=0,1,\ldots,k} \left\{ f(x^{(j)}) + \left(\lambda^{(j)}\right)^\top (x - x^{(j)}) \right\} = f_k^{CP}(x) \qquad \forall x \in \mathbb{R}^n.$$

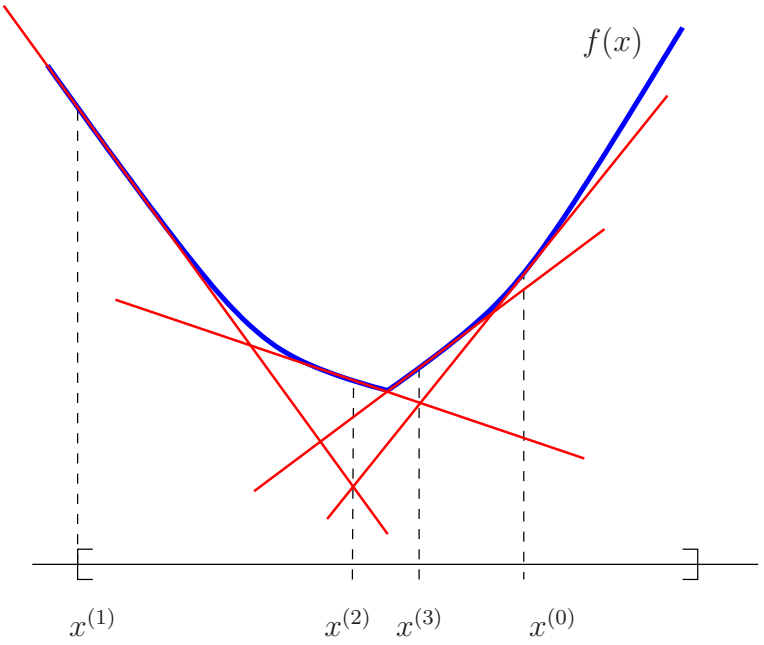


Abbildung 4.2: Idee der Schnittebenenmethode zur Minimierung einer konvexen Funktion: Stückweise lineare Approximation durch Stützhyperebenen. Optimale Punkte der aktuellen Approximation, die nicht optimal für das Ausgangsproblem sind, werden in der nächsten Iteration „abgeschnitten“.

Beim **Trust-Region-Verfahren** „vertraut“ man der Approximation (4.17) nur auf dem durch $\frac{1}{2}\|d\|^2 \leq \rho$ gegebenen „Vertrauensbereich“ (Trust-Region), wobei $d := x - x^{(k)}$ gesetzt wurde und $\rho > 0$ ein Parameter ist. Eine optimale Suchrichtung ergibt sich dann aus der Lösung des nichtdifferenzierbaren Optimierungsproblems

$$\min_{\frac{1}{2}\|d\|^2 \leq \rho} f_k^{CP}(x^{(k)} + d).$$

© 2003 by M. Gerdts

Dieses Problem kann in ein äquivalentes differenzierbares Optimierungsproblem umformuliert werden:

$$\boxed{\begin{array}{lll} \text{Minimiere} & v & \\ \text{bzgl.} & v, d & \\ \text{unter} & \left(\lambda^{(j)}\right)^\top d - e_j^k & \leq v, \quad j = 0, 1, \ldots, k, \\ & \frac{1}{2}\|d\|^2 & \leq \rho. \end{array}} \tag{4.18}$$

Auch hier gibt es einen schönen Zusammenhang mit dem Optimierungsproblem (4.14):

Hilfssatz 4.5

(i) Sei $\hat{c}_j$, $j = 0, 1, \ldots, k$ eine Optimallösung von (4.14) und $\hat{\eta}$ ein zugehöriger Lagrange-Multiplikator der ersten Nebenbedingung in (4.14) mit $\hat{\eta} > 0$. Dann ist $(\hat{v}, \hat{d})$ mit

$$\hat{d} = -\frac{1}{\hat{\eta}} \sum_{j=0}^{k} \hat{c}_j \lambda^{(j)}, \qquad \hat{v} = f_k^{CP}(x^{(k)} + \hat{d})$$

Optimallösung von (4.18) für

$$\rho = \frac{1}{2\hat{\eta}^2} \Big\| \sum_{j=0}^{k} \hat{c}_j \lambda^{(j)} \Big\|^2.$$

(ii) Sei $(\hat{v}, \hat{d})$ eine Optimallösung von (4.18) mit Lagrange-Multiplikatoren $\hat{c}_j \geq 0$, $j = 0, 1, \ldots, k$ der ersten $k+1$ Nebenbedingungen in (4.18). Für den Lagrange-Multiplikator $\hat{\eta}$ der letzten Nebenbedingung in (4.18) gelte $\hat{\eta} > 0$. Dann ist $\hat{c}_j \geq 0$, $j = 0, 1, \ldots, k$ Optimallösung von (4.14) für

$$\varepsilon = \sum_{j=0}^{k} \hat{c}_j e_j^k.$$

Beweis: siehe [Sch89], S. 18-21

Variante 3:

Schließlich gibt es noch eine dritte Variante, bei der die Nebenbedingung $\frac{1}{2}\|d\|^2 \leq \rho$ in

© 2003 by M. Gerdts

(4.18) an die Zielfunktion gekoppelt wird:

$$\boxed{\begin{array}{lll} \text{Minimiere} & v + \frac{1}{2}\eta\|d\|^2 & \\ \text{bzgl.} & v, d & \\ \text{unter} & \left(\lambda^{(j)}\right)^\top d - e_j^k \;\leq\; v, & j = 0, 1, \ldots, k. \end{array}} \tag{4.19}$$

Es gilt ein zu Hilfssatz 4.4 analoges Resultat, welches den Zusammenhang von (4.18) und (4.19) angibt:

Hilfssatz 4.6

(i) Ist $(\hat{v}, \hat{d})$ eine Optimallösung von (4.18) und $\hat{\eta}$ ein zugehöriger Lagrange-Multiplikator der letzten Nebenbedingung in (4.18), so ist $(\hat{v}, \hat{d})$ eine Optimallösung von (4.19) für $\eta = \hat{\eta}$.

(ii) Ist $(\hat{v}, \hat{d})$ eine Optimallösung von (4.19) mit $\eta \geq 0$, so ist $(\hat{v}, \hat{d})$ eine Optimallösung von (4.18) für

$$\rho = \frac{1}{2}\|\hat{d}\|^2.$$

Beweis: Übungsaufgabe

Aus numerischer Sicht ist (4.19) einfacher zu lösen als (4.18), da es sich um ein quadratisches Problem mit linearen Nebenbedingungen handelt.

Bemerkung 4.8

Für $\eta > 0$ stellt (4.16) gerade das duale Problem von (4.19) dar.

Fazit:

Die Optimierungsprobleme (4.14), (4.16), (4.18) und (4.19) sind im Sinne von Hilfssatz 4.4, Hilfssatz 4.5 und Hilfssatz 4.6 äquivalent und können zur Bestimmung einer Suchrichtung verwendet werden. Je nach Wahl müssen in einer praktischen Implementierung Strategien zur Bestimmung des Parameters ε in (4.14) bzw. des Parameters ρ in (4.18) bzw. des Parameters η in (4.16) und (4.19) entwickelt werden.

4.4.4 Implementierung

Ein implementierbarer Algorithmus unter Verwendung von (4.14) findet sich in [LSB81], [HUL93], Kapitel 14, oder [Kiw85], Kapitel 7. In [Mif82] wird ein an (4.19) angelehntes Problem gelöst. Ein Trust-Region Verfahren wird in [Sch89] detailliert untersucht. In

© 2003 by M. Gerdts

diesen Quellen wird u.a. auch die Erweiterung auf nichtkonvexe Problemstellungen vorgestellt. Der Artikel [MÖ2] gibt einen Überblick über Varianten und Aktualisierungen der Bundle-Methode.
Wir beschränken uns hier auf die Darstellung der Bundle-Methode unter Verwendung des in Variante 1 dargestellten Optimierungsproblems (4.16), vgl. [GK02]. Speziell wird $\eta = 1$ gewählt.

© 2003 by M. Gerdts

Algorithmus: Bundle-Methode

(i) Wähle Startpunkt $x^{(1)} \in \mathbb{R}^n$, einen Subgradienten $\lambda^{(1)} \in \partial_c f(x^{(1)})$ und ein $\sigma \in (0,1)$. Setze $y^{(1)} = x^{(1)}$, $z^{(0)} = \lambda^{(1)}$, $e_1^1 = \varepsilon_0 = 0$, $k = 1$, $J_k = \{1\}$.

(ii) Berechne eine Lösung c_j^k, $j \in J_k$ des quadratischen Optimierungsproblems

$$\begin{array}{ll} \text{Minimiere} & \frac{1}{2}\Big\| \sum\limits_{j\in J_k} c_j \lambda^{(j)} \Big\|^2 + \sum\limits_{j\in J_k} c_j e_j^k \\ \text{bzgl.} & c_j,\ j \in J_k, \\ \text{unter} & \sum\limits_{j\in J_k} c_j = 1, \quad c_j \geq 0, \quad j \in J_k. \end{array} \tag{4.20}$$

(iii) Setze

$$\begin{aligned} z^{(k)} &= \sum_{j\in J_k} c_j^k \lambda^{(j)}, \\ \varepsilon_k &= \sum_{j\in J_k} c_j^k e_j^k, \\ d^{(k)} &= -z^{(k)}, \\ \xi_k &= -\|z^{(k)}\|^2 - \varepsilon_k. \end{aligned}$$

(iv) Falls $\xi_k = 0$, STOP.

(v) Setze $y^{(k+1)} = x^{(k)} + d^{(k)}$ und berechne $\lambda^{(k+1)} \in \partial_c f(y^{(k+1)})$.

- **(wesentlicher Schritt; serious step)**
  Falls $f(y^{(k+1)}) \leq f(x^{(k)}) + \sigma\xi_k$ gilt, setze $\alpha_k = 1$, $x^{(k+1)} = y^{(k+1)}$.
- **(Nullschritt; null step)**
  Falls $f(y^{(k+1)}) > f(x^{(k)}) + \sigma\xi_k$ gilt, setze $\alpha_k = 0$, $x^{(k+1)} = x^{(k)}$.

(vi) Setze

$$\begin{aligned} J_k^p &= \{j \in J_k \mid c_j^k > 0\}, \\ J_{k+1} &= J_k^p \cup \{k+1\}, \\ e_j^{k+1} &= f(x^{(k+1)}) - f(y^{(j)}) - \left(\lambda^{(j)}\right)^\top \left(x^{(k+1)} - y^{(j)}\right), \qquad j \in J_{k+1}. \end{aligned}$$

(vii) Setze $k := k+1$ und gehe zu (ii).

© 2003 by M. Gerdts

Bemerkung 4.9

Erläuterungen zum Algorithmus:

- *An Stelle des quadratischen Optimierungsproblems (4.14) wird das verwandte quadratische Optimierungsproblem (4.20) verwendet. Die beiden Probleme sind eng miteinander verknüpft, vgl. Hilfssatz 4.4. Der Vorteil der Formulierung (4.20) besteht darin, daß sich ε_k automatisch ergibt und nicht vorgegeben ist. Bei Verwendung von (4.14) müsste man sich eine geeignete Strategie zur Anpassung von ε überlegen. Dies ist auch möglich, vgl. [LSB81] oder [Kiw85], S. 307-325. Algorithmen zur Lösung der quadratischen Teilprobleme finden sich z.B. in [GM78], [Mif79] oder [Kiw86].*

- *Falls in Schritt (v) kein hinreichender Abstieg in der Zielfunktion erreicht werden kann, dient der Nullschritt dazu, das Bündel der Subgradienten zu erweitern, um eine bessere Suchrichtung zu erhalten. Die Anzahl der Nullschritte kann mitunter drastisch reduziert werden, indem die Abstiegsbedingung $f(y^{(k+1)}) \leq f(x^{(k)}) + \sigma\xi_k$ nicht nur in $y^{(k+1)}$, sondern auch an Zwischenstellen $x^{(k)}+\alpha d^{(k)}$ mit $\alpha > 0$ überprüft wird ($\rightarrow$ Armijo-Regel). In diesem Fall wird nur dann ein Nullschritt durchgeführt, falls kein geeignetes $\alpha > 0$ mit der Abstiegsbedingung gefunden werden kann. Eine Reduzierung der Anzahl der Nullschritte führt i.a. zu einer Steigerung der Effizienz des Verfahrens. Geeignete Schrittweitenstrategien werden z.B. in [LSB81], [HUL93] und [Kiw85] diskutiert.*

- *In Schritt (vi) werden nur solche Subgradienten in der nächsten Iteration verwendet, die auch wirklich zur Bestimmung der Suchrichtung $d^{(k)}$ beigetragen haben ($c_j^k > 0$). Diejenigen die nichts beigetragen haben ($c_j^k = 0$) werden vernachlässigt. Durch diese Maßnahme wird die Dimension des quadratischen Problems (4.20) klein gehalten. Durch Lösen eines zusätzlichen linearen Optimierungsproblems kann man sogar stets eine Lösung von (4.20) finden, so daß die Menge J_k^p aus höchstens $n+1$ Elementen besteht, vgl. [Kiw85], Lemma 2.2.1, S.49. Es ist auch möglich, die wesentliche Subgradienteninformation aus den vorangegangenen Schritten in nur einem aggregierten Vektor mitzuführen, vgl. [Kiw85], Kapitel 7.*

Zusammenhang mit ε-Abstiegsverfahren:

- *Die Bundle-Idee wird auch bei den sogenannten ε-Abstiegsverfahren verwendet. Bei einem ε-Abstiegsverfahren wird in jedem Iterationsschritt eine Abnahme der Zielfunktion um $\varepsilon > 0$ erreicht, d.h. $f(x^{(i+1)}) < f(x^{(i)}) - \varepsilon$ für $i = 0, 1, 2, \ldots$. In diesem Fall gilt ein zu Satz 4.3 analoges Konvergenzresultat. Das ε-Subgradientenverfahren ist ein spezielles ε-Abstiegsverfahren. Da man das ε-Subdifferential $\partial_\varepsilon f(x^{(i)})$ nicht kennt, kann man versuchen, dieses mit Hilfe eines Bündels von Subgradienten zu*

© 2003 by M. Gerdts

approximieren. In Anlehnung an [HUL93], S. 195-222, hat Iteration i eines ε-Abstiegsverfahren die folgende Gestalt:

(i) Berechne $\lambda_0 \in \partial_c f(x^{(i)})$ und setze $k = 0$.

(ii) Löse das quadratische Hilfsproblem (4.14) und berechne eine Suchrichtung d_k gemäß (4.15). Falls $\|d_k\| \leq tol$, STOP.

(iii) Führe eine eindimensionale Liniensuche in Richtung d_k durch.
Falls ein ε-Abstieg von f in Richtung d_k erreicht werden kann, berechne neue Iterierte $x^{(i+1)}$ und führe den nächsten Iterationsschritt durch.
Falls kein ε-Abstieg in f in Richtung d_k erreicht werden kann, berechne einen Subgradienten $\lambda_{k+1} \in \partial_c f(x^{(i)} + \alpha d_k)$ mit geeignetem $\alpha > 0$, setze $k = k + 1$ und gehe zu (ii).

Der Unterschied zum Bundle-Verfahren besteht darin, daß hier in jedem Iterationsschritt aufs Neue ein Bündel von Subgradienten erzeugt wird, dieses jedoch nicht in der nächsten Iteration weiterverwendet wird, während die Bundle-Methode das Bündel in jeder Iteration dynamisch und effizient anpasst.

4.4.5 Konvergenz der Bundle-Methode

Der Konvergenzbeweis ist [GK02] entnommen.
Wir benötigen einige Hilfsresultate.

Hilfssatz 4.7

Die durch den Algorithmus erzeugten Größen e_j^k, $j \in J_k$, ε_k und $x^{(k)}$, $k = 1, 2, \ldots$ haben die folgenden Eigenschaften:

(a) $e_j^k \geq 0$ und $\lambda^{(j)} \in \partial_{e_j^k} f(x^{(k)})$ für alle $j \in J_k, k = 1, 2, \ldots$.

(b) $\varepsilon_k \geq 0$ und $z^{(k)} \in \partial_{\varepsilon_k} f(x^{(k)})$ für alle $k = 1, 2, \ldots$.

Beweis:

(a) $e_j^k \geq 0$ folgt für konvexes f aus der Definition des Linearisierungsfehlers. Für alle $x \in \mathbb{R}^n$ gilt

$$\begin{aligned} f(x) &\geq f(y^{(j)}) + \left(\lambda^{(j)}\right)^\top (x - y^{(j)}) \\ &= f(x^{(k)}) + \left(\lambda^{(j)}\right)^\top (x - x^{(k)}) - \left(f(x^{(k)}) - f(y^{(j)}) - \left(\lambda^{(j)}\right)^\top (x^{(k)} - y^{(j)})\right) \\ &= f(x^{(k)}) + \left(\lambda^{(j)}\right)^\top (x - x^{(k)}) - e_j^k. \end{aligned}$$

Also: $\lambda^{(j)} \in \partial_{e_j^k} f(x^{(k)})$.

© 2003 by M. Gerdts

(b) $\varepsilon_k \geq 0$ folgt, da ε_k als Konvexkombination von $e_j^k \geq 0$ definiert ist. Nach (a) gilt für alle $x \in \mathbb{R}^n$

$$f(x) \geq f(x^{(k)}) + \left(\lambda^{(j)}\right)^\top (x - x^{(k)}) - e_j^k.$$

Multiplikation mit $c_j^k \geq 0, \sum_{j \in J_k} c_j^k = 1$ und anschließende Addition liefert

$$\begin{aligned} f(x) &\geq f(x^{(k)}) + \sum_{j \in J_k} c_j^k \left(\lambda^{(j)}\right)^\top (x - x^{(k)}) - \sum_{j \in J_k} c_j^k e_j^k \\ &= f(x^{(k)}) + \left(z^{(k)}\right)^\top (x - x^{(k)}) - \varepsilon_k. \end{aligned}$$

Also: $z^{(k)} \in \partial_{\varepsilon_k} f(x^{(k)})$. □

Das Abbruchkriterium in Schritt (iv) folgt aus

Hilfssatz 4.8

Es gelten:

(a) $\xi_k \leq 0$ *für alle* $k = 1, 2, \ldots$.

(b) Gilt $\xi_k = 0$ *für ein* k*, so ist* $x^{(k)}$ *Minimum von* f.

Beweis: (a) ergibt sich aus der Definition und Hilfssatz 4.7. Ist $\xi_k = 0$, so ist $z^{(k)} = 0$ und $\varepsilon_k = 0$. Wegen

$$0 = z^{(k)} \in \partial_{\varepsilon_k} f(x^{(k)}) = \partial_c f(x^{(k)})$$

ist $x^{(k)}$ nach Satz 3.22 optimal. □

Der folgende Hilfssatz besagt, daß die Folge der Funktionswerte $\{f(x^{(k)})\}$ konvergiert und daß das Abbruchkriterium im Grenzübergang erreicht wird, wenn f nach unten beschränkt ist.

Hilfssatz 4.9

Es gelte $f(x^{(k)}) \geq \hat{f}$ *für alle* $k = 1, 2, \ldots$ *mit* $\hat{f} \in \mathbb{R}$*. Dann gelten:*

(a) $f(x^{(k)}) - f(x^{(k+1)}) \to 0$ *für* $k \to \infty$.

(b) $\displaystyle\sum_{k=1}^{\infty} \alpha_k \left(\|z^{(k)}\|^2 + \varepsilon_k\right) \leq \frac{f(x^{(1)}) - \hat{f}}{\sigma}$.

(c) Gibt es unendlich viele wesentliche Schritte, etwa mit den Nummern $k_1 < k_2 < \ldots$*, so gilt* $z^{(k_j)} \to 0$ *und* $\varepsilon_{k_j} \to 0$ *für* $j \to \infty$.

© 2003 by M. Gerdts

Beweis:

(a) Die Folge $\{f(x^{(k)})\}$ ist nach Voraussetzung nach unten beschränkt. Per Konstruktion ist sie monoton fallend, vgl. Schritt (v) der Bundle-Methode und Hilfssatz 4.8, (a). Damit konvergiert sie und es folgt die Behauptung.

(b) Gemäß Schritt (v) der Bundle-Methode gilt

$$f(x^{(k)}) - f(x^{(k+1)}) \geq -\sigma\alpha_k\xi_k \qquad \forall k \in \mathbb{N}.$$

Aufsummieren liefert (Teleskopsumme!)

$$f(x^{(1)}) - \underbrace{f(x^{(k)})}_{\geq \hat{f}} \geq -\sigma \sum_{j=1}^{k-1} \alpha_j \underbrace{\xi_j}_{=-\|z^{(j)}\|-\varepsilon_j} \qquad \forall k \in \mathbb{N}$$

und wegen $f(x^{(k)}) \geq \hat{f}$ folgt

$$f(x^{(1)}) - \hat{f} \geq \sigma \sum_{j=1}^{k-1} \alpha_j \left(\|z^{(j)}\| + \varepsilon_j\right) \qquad \forall k \in \mathbb{N}.$$

Grenzübergang $k \to \infty$ liefert

$$f(x^{(1)}) - \hat{f} \geq \sigma \sum_{j=1}^{\infty} \alpha_j \left(\|z^{(j)}\| + \varepsilon_j\right).$$

Division durch $\sigma > 0$ liefert die Behauptung.

(c) Für wesentliche Schritte gilt $\alpha_k = 1$, für Nullschritte ist $\alpha_k = 0$. Es folgt

$$\sum_{j=1}^{\infty} \alpha_j \left(\|z^{(j)}\| + \varepsilon_j\right) = \sum_{j=1}^{\infty} \left(\|z^{(k_j)}\| + \varepsilon_{k_j}\right).$$

Nach (b) ist die Reihe konvergent. Notwendig gilt dann auch $\|z^{(k_j)}\| + \varepsilon_{k_j} \to 0$ für $j \to \infty$. Wegen $\varepsilon_{k_j} \geq 0$ und $\|z^{(k_j)}\| \geq 0$ folgt daraus die Behauptung. □

Falls unendlich viele wesentliche Schritte durch den Algorithmus erzeugt werden, zeigt das nächste Resultat, daß jeder Häufungspunkt der erzeugten Folge bereits eine Lösung des Optimierungsproblems ist.

Hilfssatz 4.10

Sei $\{x^{(k)}\}$ eine durch die Bundle-Methode erzeugte Folge, wobei unendlich viele wesentliche Schritte vorkommen. Dann ist jeder Häufungspunkt von $\{x^{(k)}\}$ ein Minimum von f.

Beweis: Sei $\hat{x}$ Häufungspunkt von $\{x^{(k)}\}$. Da $x^{(k)}$ sich in einem Nullschritt nicht ändert ist $\hat{x}$ auch ein Häufungspunkt der Folge der wesentlichen Schritte, d.h. es gibt eine Folge

© 2003 by M. Gerdts

von Zahlen $k_1 < k_2 < \ldots$ mit $x^{(k_j)} \to \hat{x}$ für $j \to \infty$ und $x^{(k_j)}$ ist wesentlicher Schritt. Da einerseits $\{f(x^{(k)})\}$ monoton fallend ist und andererseits $f(x^{(k_j)}) \to f(\hat{x})$ für $j \to \infty$ gilt (lokale Lipschitzstetigkeit!), folgt $f(x^{(k)}) \geq f(\hat{x}) =: \hat{f}$ für alle $k \in \mathbb{N}$. Damit gilt bereits $f(x^{(k)}) \to \hat{f}$ für $k \to \infty$. Hilfssatz 4.7, (b) liefert $z^{(k)} \in \partial_{\varepsilon_k} f(x^{(k)})$ für alle $k \in \mathbb{N}$ und somit speziell

$$f(x) \geq f(x^{(k_j)}) + \left(z^{(k_j)}\right)^\top (x - x^{(k_j)}) - \varepsilon_{k_j} \qquad \forall x \in \mathbb{R}^n, j \in \mathbb{N}.$$

Hilfssatz 4.9, (c) liefert $z^{(k_j)} \to 0$ und $\varepsilon_{k_j} \to 0$ für $j \to \infty$. Grenzübergang $j \to \infty$ ergibt zusammen mit der lokalen Lipschitzstetigkeit von f (f ist konvex!) die Beziehung $f(x) \geq f(\hat{x})$ für alle $x \in \mathbb{R}^n$. □

Der nächste Hilfssatz behandelt den Fall, daß nur endlich viele wesentliche Schritte vorkommen. In diesem Fall liegt ebenfalls ein Minimum vor.

Hilfssatz 4.11

Sei $\{x^{(k)}\}$ eine durch die Bundle-Methode erzeugte Folge, wobei nur endlich viele wesentliche Schritte vorkommen, d.h. es gilt $x^{(k)} = x^{(k_0)}$ für alle $k \geq k_0$ mit einem $k_0 \in \mathbb{N}$. Dann ist $\hat{x} = x^{(k_0)}$ ein Minimum von f.

Beweis:

Wegen $x^{(k+1)} = x^{(k)}$ für alle $k \geq k_0$ folgt aus dem Algorithmus, daß $e_j^{k+1} = e_j^k$ für $j \in J_k^p$ und $k \geq k_0$. Demzufolge ist

$$\eta_k := \sum_{j \in J_k^p} c_j^k e_j^{k+1} = \varepsilon_k \qquad \forall k \geq k_0.$$

Sei

$$Q_k(c) := \frac{1}{2} \Big\| \sum_{j \in J_k} c_j \lambda^{(j)} \Big\|^2 + \sum_{j \in J_k} c_j e_j^k,$$

$\mu \in [0,1]$ beliebig und

$$\bar{c}_j := \begin{cases} \mu, & \text{falls } j = k, \\ (1-\mu) c_j^{k-1}, & \text{falls } j \in J_{k-1}^p. \end{cases}$$

Es gelten

$$\begin{aligned} \bar{c}_j &\geq 0, \qquad \forall j \in J_k, \\ \sum_{j \in J_k} \bar{x}_j &= 1. \end{aligned}$$

Also: $\bar{c}$ ist zulässig für das quadratische Teilproblem in Schritt (ii) und es gilt

$$Q_k(c^k) \leq Q_k(\bar{c}) = \frac{1}{2} \|(1-\mu) z^{(k-1)} + \mu \lambda^{(k)}\|^2 + (1-\mu)\eta_{k-1} + \mu e_k^k.$$

© 2003 by M. Gerdts

Da $\mu \in [0,1]$ beliebig war, gilt sogar

$$Q_k(c^k) \leq \min_{\mu\in[0,1]} \left\{ \frac{1}{2}\|(1-\mu)z^{(k-1)} + \mu\lambda^{(k)}\|^2 + (1-\mu)\eta_{k-1} + \mu e_k^k \right\}.$$

Es sei μ_k die Lösung von

$$\min_{\mu\in[0,1]} q_k(\mu), \qquad q_k(\mu) := \frac{1}{2}\|(1-\mu)z^{(k-1)} + \mu\lambda^{(k)}\|^2 + (1-\mu)\eta_{k-1} + \mu e_k^k$$

und $w_k := q_k(\mu_k)$ der zugehörige Optimalwert. Dann gelten $Q_k(c^k) \leq w_k$ und $w_k = q_k(\mu_k) \leq q_k(\mu)$ für alle $\mu \in [0,1]$. Mit $\eta_k = \varepsilon_k$ von oben folgt für alle $k \geq k_0$

$$\begin{aligned} w_k &\leq q_k(0) = \frac{1}{2}\|z^{(k-1)}\|^2 + \eta_{k-1} \\ &= \frac{1}{2}\|z^{(k-1)}\|^2 + \varepsilon_{k-1} \\ &= \frac{1}{2}\Big\| \sum_{j\in J_k} c_j^{k-1}\lambda^{(j)}\|^2 + \sum_{j\in J_k} c_j^{k-1} e_j^{k-1} \\ &= Q_{k-1}(c^{k-1}) \\ &\leq w_{k-1}. \end{aligned}$$

Also: $0 \leq w_k \leq w_{k-1} \leq w_{k_0}$ für alle $k > k_0$ und

$$\|z^{(k)}\| \leq \sqrt{2w_{k_0}}, \qquad \eta_k \leq w_{k_0} \qquad \forall k \geq k_0. \tag{4.21}$$

Zusätzlich kann man zeigen, daß

$$q_k(\mu) \leq \frac{1}{2}\mu^2\|z^{(k-1)} - \lambda^{(k)}\|^2 + \mu\left(\left(z^{(k-1)}\right)^\top \lambda^{(k)} - \|z^{(k-1)}\|^2\right) + \mu(e_k^k - \eta_{k-1}) + w_{k-1}$$

für alle $k > k_0$ gilt. Aus $x^{(k)} = x^{(k_0)}$ für alle $k \geq k_0$ folgen

$$\begin{aligned} e_k^k &= f(x^{(k-1)}) - f(y^{(k)}) + \left(\lambda^{(k)}\right)^\top d^{(k-1)}, \\ f(y^{(k)}) &> f(x^{(k-1)}) + \sigma\xi_{k-1}, \\ -e_k^k + \left(\lambda^{(k)}\right)^\top d^{(k-1)} &= f(y^{(k)}) - f(x^{(k-1)}) \\ &> \sigma\xi_{k-1} = -\sigma(\|z^{(k-1)}\|^2 + \eta_{k-1}) \end{aligned}$$

für alle $k > k_0$. Wegen $d^{(k-1)} = -z^{(k-1)}$ folgt aus der letzten Ungleichung

$$\left(z^{(k-1)}\right)^\top \lambda^{(k)} < \sigma(\|z^{(k-1)}\|^2 + \eta_{k-1}) - e_k^k.$$

Schließlich folgt für alle $k > k_0$

$$\begin{aligned} q_k(\mu) &\leq \tfrac{1}{2}\mu^2\|z^{(k-1)} - \lambda^{(k)}\|^2 + \mu\left(\sigma\left(\|z^{(k-1)}\|^2 + \eta_{k-1}\right) - e_k^k - \|z^{(k-1)}\|^2\right) \\ &\quad + \mu(e_k^k - \eta_{k-1}) + w_{k-1} \\ &= \tfrac{1}{2}\mu^2\|z^{(k-1)} - \lambda^{(k)}\|^2 - \mu(1-\sigma)\left(\|z^{(k-1)}\|^2 + \eta_{k-1}\right) + w_{k-1}. \end{aligned} \tag{4.22}$$

© 2003 by M. Gerdts

Aus (4.21) folgt die Beschränktheit der Folgen $\{z^{(k)}\}$ und η_k und damit auch die Beschränktheit von $\{d^{(k)}\}$ und $\{y^{(k)}\}$. Da $\partial_c f$ lokal beschränkt ist, folgt insgesamt die Existenz einer Konstanten $c > 0$ (o.B.d.A. sei $c \geq 1/2$), so daß

$$\|z^{(k)}\| \leq c, \quad \|\lambda^{(k)}\| \leq c, \quad \eta_k \leq c \qquad \forall k \geq k_0.$$

Daraus folgt $\|z^{(k-1)} - \lambda^{(k)}\|^2 \leq 4c^2$ und aus (4.22) folgt

$$q_k(\mu) \leq 2c^2\mu^2 - (1-\sigma)\left(\|z^{(k-1)}\|^2 + \eta_{k-1}\right)\mu + w_{k-1} =: \Theta_k(\mu) \qquad \forall k > k_0. \tag{4.23}$$

Θ_k ist quadratisch in μ und man kann nachrechnen, daß das Minimum in

$$\mu_k^* = (1-\sigma)\left(\|z^{(k-1)}\|^2 + \eta_{k-1}\right)/(4c^2)$$

angenommen wird. Zudem zeigt sich, daß $\mu_k^* \leq 1$ ist. Der minimale Funktionswert ist

$$\Theta_k(\mu_k^*) = w_{k-1} - (1-\sigma)^2\left(\|z^{(k-1)}\|^2 + \eta_{k-1}\right)^2/(8c^2). \tag{4.24}$$

Wegen $\mu_k^* \in [0,1]$ und $w_k = q_k(\mu_k) \leq q_k(\mu)$ für alle $\mu \in [0,1]$ folgt mit (4.23) und (4.24) für alle $k > k_0$ die Beziehung

$$w_k = q_k(\mu_k) \leq q_k(\mu_k^*) \leq \Theta_k(\mu_k^*) = w_{k-1} - (1-\sigma)^2\left(\|z^{(k-1)}\|^2 + \eta_{k-1}\right)^2/(8c^2).$$

Aufsummieren für $j = k_0+1, \ldots, k+1$ liefert

$$\frac{(1-\sigma)^2}{8c^2}\sum_{j=k_0}^{k}\left(\|z^{(j)}\|^2 + \eta_j\right)^2 \leq w_{k_0} - \underbrace{w_{k+1}}_{\geq 0} \leq w_{k_0}.$$

Grenzübergang $k \to \infty$ liefert die Konvergenz der Reihe und damit notwendigerweise $z^{(k)} \to 0$ und $\eta_k = \varepsilon_k \to 0$ für $k \to \infty, k \geq k_0$.
Die Behauptung folgt nun wie im Beweis von Hilfssatz 4.10. □

Zusammenfassend liefern die Hilfsätze 4.10 und 4.11 den folgenden Konvergenzsatz. Allerdings ist darin die Existenz eines Häufungspunktes noch nicht gesichert.

Satz 4.4

Jeder Häufungspunkt der durch die Bundle-Methode erzeugten Folge $\{x^{(k)}\}$ ist eine Lösung des Minimierungsproblems.

Die Existenz eines Häufungspunktes unter einer Zusatzbedingung ist durch folgenden Hilfssatz gesichert.

Hilfssatz 4.12

Die Menge der optimalen Punkte $S = \{\hat{x} \in \mathbb{R}^n \mid f(\hat{x}) = \inf_{x\in\mathbb{R}^n} f(x)\}$ sei nichtleer. Dann ist die durch die Bundle-Methode erzeugte Folge $\{x^{(k)}\}$ beschränkt.

Beweis: Sei $\hat{x} \in S$.

© 2003 by M. Gerdts

(i) Wir zeigen zunächst

$$\|\hat{x} - x^{(k)}\|^2 \leq \|\hat{x} - x^{(m)}\|^2 + \sum_{j=m}^{k-1} \left(\|x^{(j+1)} - x^{(j)}\| + 2\alpha_j \varepsilon_j \right) \qquad \forall m \in \mathbb{N}, k \geq m. \tag{4.25}$$

Es gilt $z^{(k)} \in \partial_{\varepsilon_k} f(x^{(k)})$ nach Hilfssatz 4.7 und $f(x^{(k)}) \geq f(\hat{x})$ nach Voraussetzung. Damit folgt

$$0 \geq f(\hat{x}) - f(x^{(k)}) \geq \left(z^{(k)}\right)^\top (\hat{x} - x^{(k)}) - \varepsilon_k$$

bzw.

$$\varepsilon_k \geq \left(z^{(k)}\right)^\top (\hat{x} - x^{(k)}).$$

Mit $x^{(k+1)} - x^{(k)} = \alpha_k d^{(k)} = -\alpha_k z^{(k)}$ und $\alpha_k \geq 0$ folgt $-(\hat{x} - x^{(k)})^\top (x^{(k+1)} - x^{(k)}) \leq \alpha_k \varepsilon_k$ für alle $k = 1, 2, \ldots$. Daraus folgt

$$\begin{aligned} \|\hat{x} - x^{(k+1)}\|^2 &= \|\hat{x} - x^{(k)} + x^{(k)} - x^{(k+1)}\|^2 \\ &= \|\hat{x} - x^{(k)}\|^2 + \|x^{(k+1)} - x^{(k)}\|^2 - 2(\hat{x} - x^{(k)})^\top (x^{(k+1)} - x^{(k)}) \\ &\leq \|\hat{x} - x^{(k)}\|^2 + \|x^{(k+1)} - x^{(k)}\|^2 + 2\alpha_k \varepsilon_k. \end{aligned}$$

Dies ist eine Rekursion für $\|\hat{x} - x^{(k+1)}\|^2$ und induktiv folgt die Behauptung in (4.25).

(ii) Wir zeigen nun, daß

$$\sum_{j=1}^{\infty} \left(\|x^{(j+1)} - x^{(j)}\|^2 + 2\alpha_j \varepsilon_j \right) < \infty \tag{4.26}$$

gilt. Es ist

$$\|x^{(j+1)} - x^{(j)}\|^2 = \alpha_j^2 \|d^{(j)}\|^2 = \alpha_j^2 \|z^{(j)}\|^2 \leq 2\alpha_j^2 \|z^{(j)}\|^2$$

und folglich

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^{\infty} \left(\|x^{(j+1)} - x^{(j)}\|^2 + 2\alpha_j \varepsilon_j \right) &\leq \sum_{j=1}^{\infty} \left(2\alpha_j^2 \|z^{(j)}\|^2 + 2\alpha_j \varepsilon_j \right) \\ &\overset{\alpha_j \in [0,1]}{\leq} 2 \sum_{j=1}^{\infty} \alpha_j \left(\|z^{(j)}\|^2 + \varepsilon_j \right). \end{aligned}$$

Die letzte Reihe ist nach Hilfssatz 4.9, (b) konvergent.

(iii) Die Beschränktheit folgt nun aus (i) und (ii). □

Schließlich erhalten wir ein globales Konvergenzresultat.

Satz 4.5

Die Menge der optimalen Punkte $S = \{\hat{x} \in \mathbb{R}^n \mid f(\hat{x}) = \inf_{x \in \mathbb{R}^n} f(x)\}$ *sei nichtleer. Dann*

© 2003 by M. Gerdts

konvergiert jede von der Bundle-Methode erzeugte Folge $\{x^{(k)}\}$ gegen ein Minimum von f.

Beweis: Nach Hilfssatz 4.12 ist die Folge $\{x^{(k)}\}$ beschränkt und es existiert mindestens ein Häufungspunkt $\hat{x}$. Nach Satz 4.4 ist $\hat{x}$ ein Minimum.
Zu zeigen: $x^{(k)} \to \hat{x}$.
Sei $\varepsilon > 0$ beliebig. Es gilt

$$\sum_{j=1}^{\infty} \left(\|x^{(j+1)} - x^{(j)}\|^2 + 2\alpha_j \varepsilon_j \right) < \infty,$$

nach (4.26). Notwendig folgt daraus $\|x^{(j+1)} - x^{(j)}\| \to 0$ für $j \to \infty$. Da zusätzlich $\{x^{(k)}\}$ eine gegen $\hat{x}$ konvergente Teilfolge besitzt, gibt es ein $m \in \mathbb{N}$ mit $\|x^{(m)} - \hat{x}\| \le \varepsilon/2$ und

$$\sum_{j=m}^{\infty} \left(\|x^{(j+1)} - x^{(j)}\|^2 + 2\alpha_j \varepsilon_j \right) \le \frac{1}{2}\varepsilon.$$

Mit (4.25) folgt

$$\|x^{(k)} - \hat{x}\|^2 \le \|x^{(m)} - \hat{x}\|^2 + \frac{1}{2}\varepsilon \le \frac{1}{2}\varepsilon + \frac{1}{2}\varepsilon = \varepsilon \qquad \forall k \ge m.$$

Daraus folgt die Behauptung. □

In [Yua85] wird für eine spezielle Klasse von nichtdifferenzierbaren Optimierungsproblemen die superlineare Konvergenz eines Trust-Region Verfahrens nachgewiesen. Die dort betrachteten Optimierungsprobleme sind von der Form

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) + h(c(x)).$$

Darin sind $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ und $c : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ zweimal stetig differenzierbare Funktionen und $h : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ ist für gegebene Vektoren $h_i \in \mathbb{R}^n$ und Zahlen $b_i \in \mathbb{R}$, $i = 1, 2, \ldots, m$ durch

$$h(c) = \max_{1 \le i \le m} \left\{ h_i^\top c + b_i \right\}$$

gegeben.
Eine weitere Variante der Bundle-Methode für lokal lipschitzstetige Funktionen f ist in [LV98] beschrieben. Sie basiert auf einer Modifikation der vom Schnittebenenverfahren bekannten Funktion f_k^{CP}, siehe (4.17). Allerdings wird anstatt f_k^{CP} die stückweise quadratische Funktion

$$F_k(x) := \max_{j \in J_k} \left\{ f(y^{(j)}) + \left(\lambda^{(j)}\right)^\top (x - y^{(j)}) + \frac{\eta}{2}(x - y^{(j)})^\top B_j (x - y^{(j)}) \right\}$$

verwendet. Darin sind $y^{(j)}$ die von der Bundle-Methode erzeugten Hilfspunkte, $\lambda^{(j)} \in \partial_o f(y^{(j)})$ zugehörige Subgradienten und B_j geeignete Matrizen. Die Kopplung mit dem Trust-Region-Ansatz entfällt hier. Unter geeigneten Voraussetzungen ist die Konvergenzgeschwindigkeit dieses Verfahrens superlinear.

© 2003 by M. Gerdts

4.4.6 Erweiterung auf nichtkonvexe Problemstellungen

Bei der Erweiterung des Algorithmus auf nichtkonvexe Problemstellungen (vgl. [LSB81], [Kiw85] und [Sch89]) spielen der Linearisierungsfehler $e(x, y, \lambda)$ bzw. die Fehler e_j^k eine wesentliche Rolle.

Im konvexen Fall lassen sich die Linearisierungsfehler $e_j^k \geq 0$ als Gewichtungsfaktoren der Subgradienten $\lambda^{(j)}$ in (4.14) bzw. (4.16) deuten: Ist der Linearisierungsfehler e_j^k groß, so wird der entsprechende optimale Koeffizient c_j^k im quadratischen Optimierungsproblem klein sein, was wiederum bedeutet, daß der zugehörige Subgradient $\lambda^{(j)}$ wenig zur Suchrichtung $d^{(k)}$ beiträgt, vgl. (4.15).

Zusätzlich dient der Fehler e_j^k als Maß für die Güte des Subgradienten $\lambda^{(j)}$, denn es gilt

$$\lambda^{(j)} \in \partial_{e_j^k} f(x^{(k)}), \qquad j = 0, 1, \ldots, k.$$

Dies bedeutet, daß $\lambda^{(j)}$ nahe an $\partial_c f(x^{(k)})$ ist, falls e_j^k klein ist, sogar wenn $x^{(j)}$ weit von $x^{(k)}$ entfernt ist.

Im Konvergenzbeweis spielen die Werte e_j^k eine große Rolle und es wird insbesondere $e_j^k \geq 0$ benötigt.

Ist f lokal lipschitzstetig und nicht konvex, so ist der Linearisierungsfehler

$$e(x, y, \lambda) = f(x) - \bar{f}(x; y, \lambda) = f(x) - (f(y) + \lambda^\top (x - y))$$

ebenso wie e_j^k nicht mehr zwangsläufig positiv und die obigen Interpretationen gelten nicht mehr.

Als Ersatz kann z.B. die Funktion

$$\beta(x, y, \lambda) := \max\left\{c\|x - y\|^2, |e(x, y, \lambda)|\right\} \geq 0$$

mit $\beta_j^k = \beta(x^{(k)}, y^{(j)}, \lambda^{(j)})$ mit einer Konstanten $c \geq 0$ gewählt werden. Im konvexen Fall wird $c = 0$ gesetzt, im nicht konvexen Fall ist $c > 0$. Die Funktion β kann wie folgt interpretiert werden. Ist $\|x^{(k)} - x^{(j)}\|$ klein, so dominiert der Linearisierungsfehler e_j^k und dient als Maß für die Abweichung von $\lambda^{(j)}$ von $\partial_o f(x^{(k)})$. Andernfalls dominiert der Term $\|x^{(k)} - x^{(j)}\|$ und zeigt an, daß der Abstand zwischen $x^{(k)}$ und $x^{(j)}$ groß ist.

Wird im Algorithmus e durch β ersetzt, können mit einigen zusätzlichen Modifikationen Konvergenzresultate für nichtkonvexe Problemstellungen abgeleitet werden.

© 2003 by M. Gerdts

Kapitel 5

Verfahren zur restringierten Optimierung

5.1 Penalty-Verfahren

Wir betrachten das gleichungsrestringierte Problem

$$\min f(x) \quad \text{unter} \quad x \in X$$

mit

$$X = \{x \in \mathbb{R}^n \mid h_j(x) = 0,\ j = 1, \ldots, p\}.$$

Darin seien die Funktionen $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ und $h_j : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, $j = 1, \ldots, p$ stetig.

Die Idee des Penalty-Verfahrens besteht darin, die Lösung $\hat{x}$ des Ausgangsproblems iterativ durch die Lösungen von unrestringierten Hilfsproblemen zu approximieren. Diese Hilfsprobleme bestehen in der Minimierung der **Penaltyfunktion**

$$l(x; \alpha) = f(x) + \frac{\alpha}{2} \sum_{j=1}^{p} (h_j(x))^2$$

für geeignete Werte von $\alpha > 0$. Durch die Ankopplung der Nebenbedingungen wird ein Verlassen des zulässigen Bereichs X „bestraft“. Die Konstante α stellt einen Gewichtungsfaktor dar, mit dessen Hilfe die „Stärke der Bestrafung“ gesteuert werden kann. Das Penalty-Verfahren ist durch folgenden Algorithmus gegeben.

Algorithmus: Penalty-Verfahren

(i) Wähle $\alpha_0 > 0$ und setze $k = 0$.

(ii) Bestimme $x^{(k)}$ als Lösung von

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} l(x; \alpha_k)$$

(iii) Ist $h(x^{(k)}) = 0$, STOP.

(iv) Bestimme $\alpha_{k+1} > \alpha_k$, setze $k := k + 1$ und gehe zu (ii).

Da l i.a. nicht differenzierbar ist, werden für das Hilfsproblem in Schritt (ii) Verfahren der unrestringierten, nichtdifferenzierbaren Optimierung benötigt.
Es stellt sich natürlich die Frage, ob das Verfahren tatsächlich gegen eine Lösung des Ausgangsproblems konvergiert.

Satz 5.1

Seien f und h_j, $j = 1, \ldots, p$ stetig und $\{\alpha_k\}$ streng monoton wachsend mit $\alpha_k \to \infty$. Die zulässige Menge $X := \{x \in \mathbb{R}^n \mid h_j(x) = 0, j = 1, \ldots, p\}$ sei nichtleer, und $\{x^{(k)}\}$ sei eine durch den Algorithmus erzeugte Folge (Existenz vorausgesetzt). Dann gelten die folgenden Aussagen:

(a) $\{l(x^{(k)}; \alpha_k)\}$ ist monoton wachsend.

(b) $\{\|h(x^{(k)})\|\}$ ist monoton fallend.

(c) $\{f(x^{(k)})\}$ ist monoton wachsend.

(d) Es ist $\lim_{k\to\infty} h(x^{(k)}) = 0$.

(e) Jeder Häufungspunkt der Folge $\{x^{(k)}\}$ ist eine Lösung des Ausgangsproblems.

Beweis: (vgl. [GK02], S. 208)

(a) Aus $\alpha_{k+1} > \alpha_k$ und der Definition von $x^{(k)}$ folgt

$$l(x^{(k)}; \alpha_k) \le l(x^{(k+1)}; \alpha_k) \le l(x^{(k+1)}; \alpha_{k+1}).$$

(b) Es gilt

$$l(x^{(k)}; \alpha_k) + l(x^{(k+1)}; \alpha_{k+1}) \le l(x^{(k+1)}; \alpha_k) + l(x^{(k)}; \alpha_{k+1}).$$

Mit der Definition von l folgt

$$\alpha_k \|h(x^{(k)})\|^2 + \alpha_{k+1}\|h(x^{(k+1)})\|^2 \le \alpha_k \|h(x^{(k+1)})\|^2 + \alpha_{k+1}\|h(x^{(k)})\|^2$$

bzw.

$$(\alpha_k - \alpha_{k+1}) \left(\|h(x^{(k)})\|^2 - \|h(x^{(k+1)})\|^2\right) \le 0.$$

Wegen $\alpha_k < \alpha_{k+1}$ folgt $\|h(x^{(k)})\|^2 \ge \|h(x^{(k+1)})\|^2$ für alle k.

(c) folgt aus $l(x^{(k)}; \alpha_k) \le l(x^{(k+1)}; \alpha_k)$ und Teil (b).

© 2003 by M. Gerdts

(d) Wegen $X \neq \emptyset$ folgt

$$f(x^{(k)}) \leq l(x^{(k)}; \alpha_k) \leq \inf_{x \in X} l(x; \alpha_k) = \inf_{x \in X} f(x) =: \hat{f} < \infty.$$

Wegen $\alpha_k \to \infty$ und $f(x^{(k)}) \geq f(x^{(0)})$ nach (c) folgt $\lim_{k\to\infty} \|h(x^{(k)})\| = 0$.

(e) Sei $\hat{x}$ Häufungspunkt der Folge $\{x^{(k)}\}$ und $\{x^{(k_j)}\}$, $j = 1, 2, \ldots$ eine gegen $\hat{x}$ konvergente Teilfolge. Nach (d) gilt $h(\hat{x}) = 0$, d.h. $\hat{x}$ ist zulässig. Ausserdem gilt

$$f(\hat{x}) = \lim_{j\to\infty} f(x^{(k_j)}) \leq \lim_{j\to\infty} l(x^{(k_j)}; \alpha_{k_j}) \leq \inf_{x \in X} f(x) =: \hat{f}.$$

Daraus folgt (e). □

Bemerkung 5.1

Da nur die Stetigkeit der auftretenden Funktionen benötigt wird, ist das Verfahren auch auf Problemstellungen mit Ungleichungsnebenbedingungen

$$g_i(x) \leq 0, \quad i = 1, \ldots, m$$

anwendbar. Denn diese Nebenbedingungen können äquivalent als stetige Nebenbedingungen

$$\max\{0, g_i(x)\} = 0, \quad i = 1, \ldots, m$$

geschrieben werden. Die Penaltyfunktion lautet dann

$$l(x; \alpha) = f(x) + \frac{\alpha}{2} \sum_{j=1}^{p} (h_j(x))^2 + \frac{\alpha}{2} \sum_{i=1}^{m} \left(\max\{0, g_i(x)\}\right)^2.$$

Ein wesentlicher Nachteil des Penalty-Verfahrens ist die Tatsache, daß die Gewichtungsfaktoren α_k gegen ∞ streben müssen, um Konvergenz zu erhalten. Dies führt dazu, daß die Teilprobleme in (ii) des Algorithmus für grosses α_k sehr schlecht konditioniert sind[1] und numerisch nur sehr schwer zu lösen sind.

5.1.1 Schätzung der Lagrange-Multiplikatoren

Wir untersuchen, wie aus der Folge $\{x^{(k)}\}$ eine Folge $\{\mu^{(k)}\}$ von Näherungen der Lagrange-Multiplikatoren konstruiert werden kann, so daß $x^{(k)}$ und $\mu^{(k)}$ gegen einen KKT-Punkt $\hat{x}$ und $\hat{\mu}$ des Ausgangsproblems konvergieren.

Hierzu benötigen wir die stetige Differenzierbarkeit der Funktionen f und h_j, $j = 1, \ldots, p$. Ein KKT-Punkt $(\hat{x}, \hat{\mu})$ des Ausgangsproblems erfüllt

$$0 = \nabla f(\hat{x}) + \sum_{j=1}^{p} \hat{\mu}_j \nabla h_j(\hat{x}).$$

[1] Einige Eigenwerte der Hessematrix $\nabla^2_{xx} l(x^{(k)}; \alpha_k)$ streben gegen ∞ und somit strebt die Spektral-Konditionszahl der Hessematrix gegen unendlich.

© 2003 by M. Gerdts

Da $x^{(k)}$ Minimalstelle der Penaltyfunktion mit Gewichtungsparameter α_k ist, gilt notwendig

$$0 = \nabla_x\, l(x^{(k)};\alpha_k) = \nabla f(x^{(k)}) + \alpha_k \sum_{j=1}^{p} h_j(x^{(k)})\nabla h_j(x^{(k)}).$$

Vergleicht man die beiden Ausdrücke, so liegt es nahe,

$$\mu_j^{(k)} = \alpha_k h_j(x^{(k)}) \tag{5.1}$$

als Approximation der Lagrange-Multiplikatoren $\hat{\mu}_j$ zu verwenden.
Es gilt:

Satz 5.2

Seien f und h_j, $j = 1,\ldots,p$ stetig differenzierbar und $\{x^{(k)}\}$ eine durch das Penalty-Verfahren erzeugte Folge mit $x^{(k)} \to \hat{x}$. Die Gradienten $\nabla h_j(\hat{x})$, $j = 1,\ldots,p$ seien linear unabhängig, und $\{\mu^{(k)}\}$ sei durch (5.1) gegeben. Dann gelten:

(a) Die Folge $\{\mu^{(k)}\}$ konvergiert gegen einen Vektor $\hat{\mu}$.

(b) $(\hat{x},\hat{\mu})$ ist ein KKT-Punkt des Ausgangsproblems.

Beweis: (vgl. [GK02], S. 211)

(a) Es seien $J_k := \frac{\partial h(x^{(k)})}{\partial x}$ und $\hat{J} := \frac{\partial h(\hat{x})}{\partial x}$ die Jacobimatrizen von $h = (h_1,\ldots,h_p)$ in $x^{(k)}$ bzw. $\hat{x}$. Aus der Stetigkeit der Jacobimatrizen folgt $J_k \to \hat{J}$. Da die Gradienten $\nabla h_j(\hat{x})$ linear unabhängig sind, ist die Matrix $J_k J_k^\top$ regulär und es gilt $\left(J_k J_k^\top\right)^{-1} \to \left(\hat{J}\hat{J}^\top\right)^{-1}$. Da $x^{(k)}$ ein Minimum von $l(x;\alpha_k)$ ist, gilt

$$\begin{aligned} 0 &= \nabla_x\, l(x^{(k)};\alpha_k) \\ &= \nabla f(x^{(k)}) + \alpha_k \sum_{j=1}^{p} h_j(x^{(k)})\nabla h_j(x^{(k)}) \\ &= \nabla f(x^{(k)}) + \sum_{j=1}^{p} \mu_j^{(k)} \nabla h_j(x^{(k)}) \\ &= \nabla f(x^{(k)}) + J_k^\top \mu^{(k)}. \end{aligned}$$

Multiplikation von links mit J_k liefert $J_k J_k^\top \mu^{(k)} = -J_k \nabla f(x^{(k)})$ bzw.

$$\mu^{(k)} = -\left(J_k J_k^\top\right)^{-1} J_k \nabla f(x^{(k)}) \to -\left(\hat{J}\hat{J}^\top\right)^{-1} \hat{J}\nabla f(\hat{x}) =: \hat{\mu}.$$

(b) Folgt aus

$$0 = \nabla_x\, l(x^{(k)};\alpha_k) = \nabla f(x^{(k)}) + \alpha_k \sum_{j=1}^{p} h_j(x^{(k)})\nabla h_j(x^{(k)})$$

und $\mu_j^{(k)} = \alpha_k h_j(x^{(k)}) \to \hat{\mu}$.

□

© 2003 by M. Gerdts

5.2 Schnittebenenverfahren

Wir betrachten das konvexe Optimierungsproblem (KOP)

$$\min f(x) \quad \text{unter} \quad x \in X.$$

Darin sei $X \subseteq \mathbb{R}^n$ eine nichtleere, abgeschlossene konvexe Menge und $f : D \to \mathbb{R}$ eine konvexe Funktion. Es sei $D \subseteq \mathbb{R}^n$ eine offene Obermenge von X.

Das Schnittebenenverfahren beruht auf der Approximation der Funktion f von unten durch die stückweise lineare Funktion

$$f_k^{CP}(x) = \max_{j=0,1,\ldots,k} \left\{ f(x^{(j)}) + \left(\lambda^{(j)}\right)^\top (x - x^{(j)}) \right\}, \tag{5.2}$$

wobei $\lambda^{(j)} \in \partial_c f(x^{(j)})$ gegebene Subgradienten sind, vgl. Abbildung 5.1. Wegen $\lambda^{(j)} \in \partial_c f(x^{(j)})$ gilt

$$f(x) \geq f(x^{(j)}) + \left(\lambda^{(j)}\right)^\top (x - x^{(j)}) \qquad \forall j = 0, 1, \ldots, k,\ x \in \mathbb{R}^n$$

und folglich

$$f(x) \geq \max_{j=0,1,\ldots,k} \left\{ f(x^{(j)}) + \left(\lambda^{(j)}\right)^\top (x - x^{(j)}) \right\} = f_k^{CP}(x) \qquad \forall x \in \mathbb{R}^n. \tag{5.3}$$

Die Idee des Schnittebenenverfahrens besteht darin, die Funktion f in (KOP) durch die Approximation f_k^{CP} aus (5.2) zu ersetzen und die resultierende Lösung als neue Iterierte $x^{(k+1)}$ zu verwenden. Also: Bestimme eine Lösung $x^{(k+1)}$ von

$$\min_{x \in X} f_k^{CP}(x). \tag{5.4}$$

Dies ist ein nichtdifferenzierbares Optimierungsproblem, welches äquivalent als differenzierbares Problem formuliert werden kann:

$$\begin{array}{ll} \text{Minimiere} & v \\ \text{bzgl.} & v \in \mathbb{R},\ x \in X, \\ \text{unter} & f(x^{(j)}) + \left(\lambda^{(j)}\right)^\top (x - x^{(j)}) \leq v,\ j = 0, 1, \ldots, k. \end{array} \tag{5.5}$$

Insgesamt:

© 2003 by M. Gerdts

Schnittebenenverfahren:

(i) Wähle einen Startpunkt $x^{(0)} \in X$ und setze $k = 0$.

(ii) Falls $x^{(k)}$ einem Abbruchkriterium genügt, STOP.

(iii) Berechne einen Subgradienten $\lambda^{(k)} \in \partial_c f(x^{(k)})$ und berechne eine Lösung $x^{(k+1)}$ von (5.5).

(iv) Setze $k = k + 1$ und gehe zu (ii).

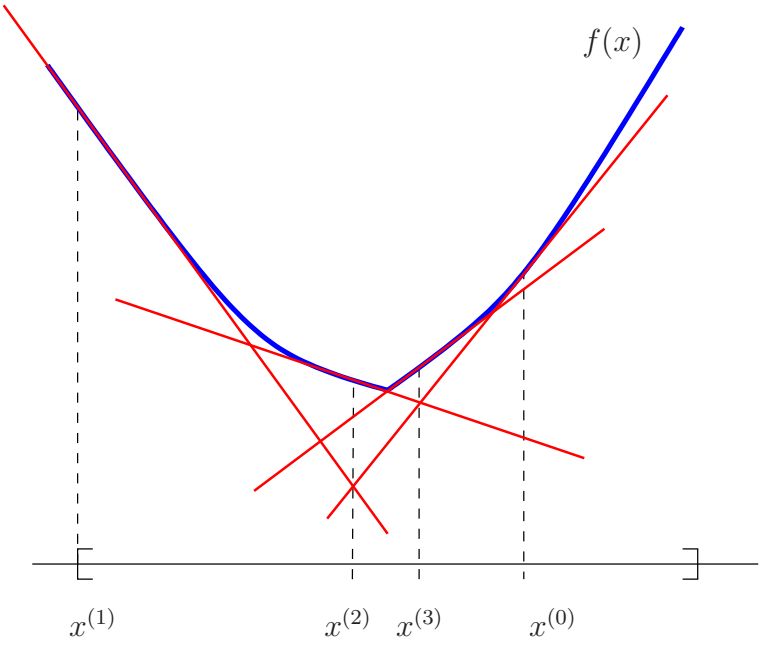


Abbildung 5.1: Idee der Schnittebenenmethode zur Minimierung einer konvexen Funktion: Stückweise lineare Approximation durch Stützhyperebenen. Optimale Punkte der aktuellen Approximation, die nicht optimal für das Ausgangsproblem sind, werden in der nächsten Iteration „abgeschnitten“.

Der Name „Schnittebenenverfahren“ ist durch folgende Beobachtung motiviert. Sei $(x^{(k+1)}, v_{k+1})$ eine Lösung von (5.5) und $x^{(k+1)}$ sei noch nicht optimal. Dann wird in der nächsten Iteration des Verfahrens die Restriktion

$$f(x^{(k+1)}) + \left(\lambda^{(k+1)}\right)^\top (x - x^{(k+1)}) \leq v$$

aufgenommen. Angenommen, $(x^{(k+1)}, v_{k+1})$ würde diese Restriktion erfüllen. Dann wäre $x^{(k+1)}$ wegen (5.3) und

$$f(x) \geq f_k^{CP}(x) \geq f_k^{CP}(x^{(k+1)}) = v_{k+1} \geq f(x^{(k+1)}) \qquad \forall x \in X$$

© 2003 by M. Gerdts

bereits optimal im Widerspruch zur Voraussetzung. Also: Der Punkt $(x^{(k+1)}, v_{k+1})$ erfüllt die neue Restriktion nicht, wird also „abgeschnitten“.

Konvergenz:

Satz 5.3

Jeder Häufungspunkt einer vom Schnittebenenverfahren erzeugten Folge $\{x^{(k)}\}$ ist eine Lösung von (KOP).

Beweis: (vgl. [GK02], S.373)
Sei $\hat{x}$ Häufungspunkt und $\{x^{(k_i)}\}_{i\in\mathbb{N}}$ eine gegen $\hat{x}$ konvergente Teilfolge. Wegen $x^{(k)} \in X$ und der Abgeschlossenheit von X gilt $\hat{x} \in X$. Weiter gilt für alle $x \in X$ und alle $j = 0, 1, \ldots, k_i - 1, i \in \mathbb{N}$

$$\begin{aligned} f(x) &\geq f_{k_i-1}^{CP}(x) \\ &\geq f_{k_i-1}^{CP}(x^{(k_i)}) \\ &= \max_{j=0,\ldots,k_i-1} f(x^{(j)}) + \left(\lambda^{(j)}\right)^\top (x^{(k_i)} - x^{(j)}) \\ &\geq f(x^{(j)}) + \left(\lambda^{(j)}\right)^\top (x^{(k_i)} - x^{(j)}). \end{aligned}$$

Grenzübergang $i \to \infty$ liefert

$$f(x) \geq f(x^{(j)}) + \left(\lambda^{(j)}\right)^\top (\hat{x} - x^{(j)})$$

für alle $x \in X$ und $j = 0, 1, 2, \ldots$. Wählt man speziell die Folge $j = k_i$, $i = 1, 2, \ldots$, so folgt $f(x) \geq f(\hat{x})$. Beachte dabei, daß f als konvex auf einer offenen Obermenge D von X vorausgesetzt ist und somit auf X stetig ist. Desweiteren ist die Folge $\{\lambda^{(j)}\}$ beschränkt. □

Abbruchkriterium:

Ein Abbruchkriterium ist durch folgenden Satz gegeben.

Satz 5.4

Das Optimierungsproblem (KOP) besitze eine Lösung. Sei $\{x^{(k)}\}$ die durch das Schnittebenenverfahren erzeugte Folge und $v_{k+1} = f_k^{CP}(x^{(k+1)})$ die Lösung des Teilproblems in (5.5). Gilt für eine vorgegebene Toleranz $\varepsilon > 0$ die Beziehung

$$f(x^{(k+1)}) - v_{k+1} \leq \varepsilon,$$

so folgt

$$f(x^{(k+1)}) - \hat{f} \leq \varepsilon,$$

© 2003 by M. Gerdts

wobei $\hat{f} = \inf_{x \in X} f(x)$ *den Optimalwert bezeichnet.*

Beweis: (vgl. [GK02], S. 374)
Sei $\hat{x} \in X$ mit $\hat{f} = f(\hat{x})$ eine Lösung von (KOP). Wegen $\lambda^{(j)} \in \partial_c f(x^{(j)})$ gilt

$$f(x^{(j)}) + \left(\lambda^{(j)}\right)^\top (\hat{x} - x^{(j)}) \leq f(\hat{x}) = \hat{f} \qquad \forall j = 0, 1, \ldots, k.$$

Also ist $(\hat{x}, \hat{f})$ zulässig für (5.5). Da $(x^{(k+1)}, v_{k+1})$ Lösung von (5.5) ist, gilt $v_{k+1} \leq \hat{f}$. Daraus folgt

$$f(x^{(k+1)}) - \hat{f} \leq f(x^{(k+1)}) - v_{k+1} \leq \varepsilon.$$

□

Probleme:

- Die Teilprobleme (5.4) können unlösbar sein, falls X unbeschränkt ist. Abhilfe: Verwende einen Trust-Region-Ansatz und löse anstatt (5.4) das Problem

  $$\min_{x \in X} f_k^{CP}(x) + \frac{\eta_k}{2} \|x - x^{(k)}\|^2$$

  bzw.

  $$\min_{x \in X,\ \frac{1}{2}\|x - x^{(k)}\|^2 \leq \rho_k} f_k^{CP}(x).$$

  Der Zusammenhang wurde in Abschnitt 4.4.3, Hilfssatz 4.6 hergestellt.

- Die Größe der Probleme (5.5) nimmt in jedem Iterationsschritt zu. Abhilfe: Eliminiere einige Restriktionen auf geeignete Art und Weise.

Variante:
Der zulässige Bereich sei speziell durch $X := \{x \in C \mid g_i(x) \leq 0,\ i = 1, \ldots, m\}$ mit einer nichtleeren, konvexen Menge $C \subseteq \mathbb{R}^n$ und konvexen Funktionen g_i, $i = 1, \ldots, m$ gegeben. Mit der konvexen Funktion

$$G(x) := \max_{i=1,\ldots,m} g_i(x)$$

gilt $X = \{x \in C \mid G(x) \leq 0\}$. Für $j = 0, 1, \ldots, k$ bezeichne $i_j \in \{1, \ldots, m\}$ einen Index mit

$$g_{i_j}(x^{(j)}) = \max_{i=1,\ldots,m} g_i(x^{(j)}) = G(x^{(j)})$$

und $\mu^{(j)} \in \partial_c g_{i_j}(x^{(j)})$ einen Subgradienten von g_{i_j} in $x^{(j)}$. Wegen

$$\partial_c G(x^{(j)}) = conv\{\partial_c g_i(x^{(j)}) \mid g_i(x^{(j)}) = G(x^{(j)}),\ 1 \leq i \leq m\}$$

gilt stets $\mu^{(j)} \in \partial_c G(x^{(j)})$.

© 2003 by M. Gerdts

Analog zu (5.2) kann G dann durch die stückweise lineare Funktion

$$G_k^{CP}(x) := \max_{j=0,1,\ldots,k} \left\{ g_{i_j}(x^{(j)}) + \left(\mu^{(j)}\right)^\top (x - x^{(j)}) \right\}$$

approximiert werden. An Stelle von (5.4) wird dann das Problem

$$\min f(x) \quad \text{unter} \quad x \in C,\ G_k^{CP}(x) \le 0$$

gelöst. Dies führt auf das äquivalente Problem

$$\begin{array}{ll} \text{Minimiere} & f(x) \\ \text{bzgl.} & x \in C, \\ \text{unter} & g_{i_j}(x^{(j)}) + \left(\mu^{(j)}\right)^\top (x - x^{(j)}) \le 0,\ j = 0, 1, \ldots, k. \end{array}$$

Bemerkung 5.2

In Abschnitt 4.4.3 haben wir bereits auf die Verbindung zwischen dem Schnittebenenverfahren und der Bundle-Methode hingewiesen.

5.3 Ein sequentielles Linearisierungsverfahren

Wir betrachten Optimierungsprobleme der Form

$$\min f(x) \quad \text{unter} \quad x \in X \tag{5.6}$$

mit $X := X_G \cap X_A$ und

$$\begin{aligned} X_G &:= \{x \in \mathbb{R}^n \mid G(x) \le 0\}, & G : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}, \\ X_A &:= \{x \in \mathbb{R}^n \mid Ax \le b\}, & A \in \mathbb{R}^{m \times n},\ b \in \mathbb{R}^m. \end{aligned}$$

Die Gültigkeit folgender Annahmen wird vorausgesetzt.

Annahme 5.1

(a) *Die Funktionen f und G in (5.6) sind konvex.*

(b) *Es gibt ein $\tilde{x} \in \mathbb{R}^n$ mit $G(\tilde{x}) < 0$ und $A\tilde{x} \le b$ (verallgemeinerte Slater-Bedingung).*

Bemerkung 5.3

Beachte, daß die Aufgabenstellung (5.6) auch Probleme der allgemeineren Form

$$\min f(x) \quad \textit{unter} \quad g_i(x) \le 0,\ i = 1, \ldots, m \tag{5.7}$$

© 2003 by M. Gerdts

mit Funktionen $g_i : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ umfaßt. Denn analog zu Abschnitt 3.7.1 läßt sich der zulässige Bereich von (5.7) mit Hilfe der Funktion

$$G(x) := \max\{g_i(x) \mid i = 1, \ldots, m\}$$

als $G(x) \leq 0$ schreiben. Das Optimierungsproblem (5.7) ist folglich in (5.6) enthalten.

Das sequentielle Linearisierungsverfahren ist ein iteratives Verfahren und beruht auf der Linearisierung der Zielfunktion f und der (nichtlinearen) Nebenbedingung G in jedem Iterationsschritt. Es erweitert die Bundle-Idee aus Abschnitt 4.4 auf restringierte Probleme. Das Verfahren erzeugt Folgen $\{x^{(k)}\}$, $\{d^{(k)}\}$, $\{\alpha_k\}$, $\{y^{(k)}\}$, $\{\lambda_f^{(k)}\}$ und $\{\lambda_G^{(k)}\}$ mit

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k d^{(k)}, \quad y^{(k+1)} = x^{(k)} + d^{(k)}, \quad \lambda_f^{(k)} \in \partial_c f(y^{(k)}), \quad \lambda_G^{(k)} \in \partial_c G(y^{(k)})$$

und

$$x^{(k+1)} \in X_A, \quad y^{(k+1)} \in X_A$$

für $k = 1, 2, 3, \ldots$. Analog zur Bundle-Methode werden Indexmengen J_k^f und J_G^f mit $J_k^f, J_k^G \subseteq \{1, \ldots, k\}$ erzeugt.

5.3.1 Bestimmung einer Suchrichtung

Die Bestimmung einer Suchrichtung ist eng mit der Vorgehensweise in der Bundle-Methode und dem Schnittebenenverfahren in Abschnitt 5.2 verknüpft. Wir folgen der Philosophie von Variante 3 in Abschnitt 4.4.1. Das Verfahren sei bis zur Iteration k fortgeschritten, so daß für $j = 1, \ldots, k$ Iterationspunkte $x^{(j)} \in X_A$ und $y^{(j)} \in X_A$, sowie Subgradienten $\lambda_f^{(j)} \in \partial_c f(y^{(j)})$ und $\lambda_G^{(j)} \in \partial_c G(y^{(j)})$ zur Verfügung stehen.

Linearisierung von f:

Für $j \in J_k^f$ stellt

$$\bar{f}(x; y^{(j)}, \lambda_f^{(j)}) = f(y^{(j)}) + \left(\lambda_f^{(j)}\right)^\top (x - y^{(j)})$$

eine Linearisierung von f in $y^{(j)}$ für $\lambda_f^{(j)}$ dar. Analog zu (5.2) bzw. (4.17) wird die Zielfunktion f von unten durch die stückweise lineare Funktion

$$\begin{aligned} \hat{f}_k(x) &:= \max_{j \in J_k^f} \bar{f}(x; y^{(j)}, \lambda_f^{(j)}) = \max_{j \in J_k^f} \left\{ f(y^{(j)}) + \left(\lambda_f^{(j)}\right)^\top (x - y^{(j)}) \right\} \\ &= \max_{j \in J_k^f} \left\{ f_j^k + \left(\lambda_f^{(j)}\right)^\top (x - x^{(k)}) \right\} \end{aligned}$$

mit

$$f_j^k := \bar{f}(x^{(k)}; y^{(j)}, \lambda_f^{(j)})$$

approximiert. Es gilt $\hat{f}_k(x) \leq f(x)$ für alle $x \in \mathbb{R}^n$ und $\hat{f}_k(y^{(j)}) = f(y^{(j)})$ für $j \in J_k^f$.

© 2003 by M. Gerdts

Linearisierung von G:
Für $j \in J_k^G$ stellt

$$\bar{G}(x; y^{(j)}, \lambda_G^{(j)}) = G(y^{(j)}) + \left(\lambda_G^{(j)}\right)^\top (x - y^{(j)})$$

eine Linearisierung von G in $y^{(j)}$ für $\lambda_G^{(j)}$ dar. Damit wird die Funktion G von unten durch die stückweise lineare Funktion

$$\begin{aligned} \hat{G}_k(x) &:= \max_{j \in J_k^G} \bar{G}(x; y^{(j)}, \lambda_G^{(j)}) = \max_{j \in J_k^G} \left\{ G(y^{(j)}) + \left(\lambda_G^{(j)}\right)^\top (x - y^{(j)}) \right\} \\ &= \max_{j \in J_k^G} \left\{ G_j^k + \left(\lambda_G^{(j)}\right)^\top (x - x^{(k)}) \right\} \end{aligned}$$

mit

$$G_j^k := \bar{G}(x^{(k)}; y^{(j)}, \lambda_G^{(j)})$$

approximiert. Es gilt $\hat{G}_k(x) \leq G(x)$ für alle $x \in \mathbb{R}^n$ und $\hat{G}_k(y^{(j)}) = G(y^{(j)})$ für $j \in J_k^G$.

Linearisierung des Optimierungsproblems:
Zur Bestimmung einer Suchrichtung $d^{(k)}$ werden die Funktionen f und G im Optimierungsproblem (5.6) durch ihre Linearisierungen, d.h. durch $\hat{f}_k(x)$ bzw. $\hat{G}_k(x)$, ersetzt. Es entsteht das linearisierte Optimierungsproblem

$$\min_{d \in \mathbb{R}^n} \hat{f}_k(x^{(k)} + d) \quad \text{unter} \quad \hat{G}_k(x^{(k)} + d) \leq 0,\ x^{(k)} + d \in X_A. \tag{5.8}$$

Es stellt sich die Frage, ob das linearisierte Problem lösbar ist. Es zeigt sich, daß der Punkt $\tilde{d} = \tilde{x} - x^{(k)}$ zulässig ist, wenn Annahme 5.1 gilt. Denn aus $\hat{G}_k(x) \leq G(x)$ für alle $x \in \mathbb{R}^n$ und der verallgemeinerten Slater-Bedingung folgt

$$\hat{G}_k(x^{(k)} + \tilde{d}) = \hat{G}_k(\tilde{x}) \leq G(\tilde{x}) < 0, \quad x^{(k)} + \tilde{d} = \tilde{x} \in X_A.$$

Allerdings kann es passieren, daß keine endliche Lösung existiert, falls der zulässige Bereich unbeschränkt ist. Analog zum Trust-Region-Ansatz in Abschnitt 4.4.3 ergänzen wir daher die Zielfunktion des linearisierten Problems um den Term $\|d\|^2/2$ (vgl. auch Hilfssatz 4.6), um eine eindeutige Lösung $d^{(k)}$ zu erhalten:

$$\min_{d \in \mathbb{R}^n} \hat{f}_k(x^{(k)} + d) + \frac{1}{2}\|d\|^2 \quad \text{unter} \quad \hat{G}_k(x^{(k)} + d) \leq 0,\ x^{(k)} + d \in X_A. \tag{5.9}$$

© 2003 by M. Gerdts

Das Problem (5.9) läßt sich als quadratisches Optimierungsproblem schreiben:

$$\boxed{\begin{array}{lll} \text{Minimiere} & v + \frac{1}{2}\|d\|^2 & \\ \text{bzgl.} & v, d & \\ \text{unter} & f_j^k + \left(\lambda_f^{(j)}\right)^\top d \leq v, & j \in J_k^f, \\ & G_j^k + \left(\lambda_G^{(j)}\right)^\top d \leq 0, & j \in J_k^G, \\ & Ad \leq b - Ax^{(k)}. & \end{array}} \tag{5.10}$$

Es gilt

Satz 5.5

Unter Annahme 5.1 hat das Problem (5.10) eine eindeutige Lösung.

Beweis: siehe [Kiw87], Lemma 2.1

Bemerkung 5.4

Durch Dualisierung des Problems (5.10) erhält man ein zu Variante 1 aus Abschnitt 4.4.3 analoges Problem.

5.3.2 Schrittweitenbestimmung

In Schritt (v) der Bundle-Methode in Abschnitt 4.4 wird ein wesentlicher Schritt durchgeführt, falls ein hinreichender Abstieg in der Zielfunktion beim Übergang von $x^{(k)}$ zu $y^{(k+1)} := x^{(k)} + d^{(k)}$ erreicht wird. Andernfalls wird ein Nullschritt durchgeführt.

Diese Vorgehensweise wird auf das restringierte Problem angepaßt. Um entscheiden zu können, ob $y^{(k+1)}$ besser ist als $x^{(k)}$, wird eine **Bewertungsfunktion (merit function)** benötigt. Eine geeignete Bewertungsfunktion ist die **exakte l_1-Penaltyfunktion**

$$l_1(x; c) := f(x) + c \cdot \max\{0, G(x)\}$$

mit einer geeigneten Konstanten $c > 0$. Ein hinreichender Abstieg in der l_1-Penaltyfunktion beim Übergang von $x^{(k)}$ zu $y^{(k+1)}$ bedeutet eine Abnahme in der Zielfunktion oder eine Verbesserung in der verletzten Nebenbedingung, wobei der jeweils andere Wert sich nicht wesentlich verschlechtern darf. Dabei ist zu beachten, daß der neue Iterationspunkt $y^{(k+1)}$ lediglich die linearisierte Restriktion $\hat{G}_k(y^{(k+1)}) \leq 0$, aber nicht notwendig die ursprüngliche Restriktion erfüllt, d.h. es kann der Fall $G(y^{(k+1)}) > 0$ eintreten. Ein **wesentlicher Schritt** wird durchgeführt, falls

$$l_1(y^{(k+1)}; c_k) \leq l_1(x^{(k)}; c_k) + \sigma\xi_k \tag{5.11}$$

mit geeigneten Zahlen $c_k > 0$, $\xi_k < 0$ und $\sigma \in (0, 1)$ gilt. Andernfalls wird ein **Nullschritt**

© 2003 by M. Gerdts

durchgeführt.

Zur Wahl von ξ_k:
Als geeignete Wahl für ξ_k hat sich

$$\xi_k := \hat{l}_{1,k}(y^{(k+1)}; c_k) - l_1(x^{(k)}; c_k) \leq 0 \tag{5.12}$$

herausgestellt, wobei

$$\hat{l}_{1,k}(x; c) := \hat{f}_k(x) + c \cdot \max\{0, \hat{G}_k(x)\}$$

gilt. ξ_k kann als Approximation der Richtungsableitung von $l_1(\cdot; c_k)$ in $x^{(k)}$ in Richtung $d^{(k)}$ interpretiert werden.

Zur Wahl von η_k:
Es seien $\mu_j^{(k)}$, $j \in J_k^G$ die Lagrange-Multiplikatoren für die Nebenbedingungen

$$G_j^k + \left(\lambda_G^{(j)}\right)^\top d \leq 0, \quad j \in J_k^G \tag{5.13}$$

in der Optimallösung von (5.10). Es wird

$$c_k \geq \sum_{j \in J_k^G} \mu_j^{(k)}$$

gewählt.

5.3.3 Algorithmus

Zusammenfassend ergibt sich der folgende Algorithmus zur Lösung des Optimierungsproblems (5.6). Ein Konvergenzbeweis ist in [Kiw87] angegeben.

© 2003 by M. Gerdts

Algorithmus: Sequentielles Linearisierungsverfahren

(i) Wähle einen Startpunkt $x^{(1)} \in X_A$, eine Optimalitätstoleranz $\varepsilon_o \geq 0$, eine Zulässigkeitstoleranz $\varepsilon_z \geq 0$, Subgradienten $\lambda_f^{(1)} \in \partial_c f(x^{(1)})$ und $\lambda_G^{(1)} \in \partial_c G(x^{(1)})$ und ein $\sigma \in (0,1)$. Setze $y^{(1)} = x^{(1)}$, $k = 1$, $J_k^f = \{1\}$, $J_k^G = \{1\}$, $f_1^1 = f(y^{(1)})$, $G_1^1 = G(y^{(1)})$ und $c_0 = 0$.

(ii) Berechne eine Lösung $(d^{(k)}, v_k)$ von (5.10). Es seien $\eta_j^{(k)}$, $j \in J_k^f$, $\mu_j^{(k)}$, $j \in J_k^G$ und $\zeta_j^{(k)}$, $j = 1, \ldots, m$ die Lagrange-Multiplikatoren der ersten, zweiten bzw. dritten Block-Nebenbedingung in (5.13).

(iii) Falls

$$c_{k-1} \geq \sum_{j \in J_k^G} \mu_j^{(k)}$$

gilt, setze $c_k := c_{k-1}$. Andernfalls setze

$$c_k = \max\{2c_{k-1}, \sum_{j \in J_k^G} \mu_j^{(k)}\}.$$

(iv) Berechne ξ_k gemäß (5.12). Falls $\xi_k \geq -\varepsilon_o$ und $G(x^{(k)}) \leq \varepsilon_z$, STOP.

(v) Setze $y^{(k+1)} = x^{(k)} + d^{(k)}$ und berechne $\lambda_f^{(k+1)} \in \partial_c f(y^{(k+1)})$ und $\lambda_G^{(k+1)} \in \partial_c G(y^{(k+1)})$.

- **(wesentlicher Schritt; serious step)**
  Falls (5.11) gilt, setze $\alpha_k = 1$, $x^{(k+1)} = y^{(k+1)}$.
- **(Nullschritt; null step)**
  Falls (5.11) nicht gilt, setze $\alpha_k = 0$, $x^{(k+1)} = x^{(k)}$.

(vi) Setze

$$\begin{aligned}
J_{k+1}^f &= \{j \in J_k^f \mid \eta_j^{(k)} \neq 0\} \cup \{k+1\}, \\
J_{k+1}^G &= \{j \in J_k^G \mid \mu_j^{(k)} \neq 0\} \cup \{k+1\}, \\
f_{k+1}^{k+1} &= f(y^{(k+1)}) + \left(\lambda_f^{(k+1)}\right)^\top (x^{(k+1)} - y^{(k+1)}), \\
f_j^{k+1} &= f_j^k + \left(\lambda_f^{(j)}\right)^\top (x^{(k+1)} - x^{(k)}), \quad j \in J_{k+1}^f \setminus \{k+1\} \\
G_{k+1}^{k+1} &= G(y^{(k+1)}) + \left(\lambda_G^{(k+1)}\right)^\top (x^{(k+1)} - y^{(k+1)}), \\
G_j^{k+1} &= G_j^k + \left(\lambda_G^{(j)}\right)^\top (x^{(k+1)} - x^{(k)}), \quad j \in J_{k+1}^G \setminus \{k+1\}.
\end{aligned}$$

(vii) Setze $k := k + 1$ und gehe zu (ii).

© 2003 by M. Gerdts

Bemerkung 5.5

Ein Verfahren zur Bestimmung einer Suchrichtung kann auch mit Hilfe der Improvement-Funktion

$$H(x,y) := \max\{f(x) - f(y), G(x)\}$$

hergeleitet werden. Gegeben sei die Iterierte $x^{(k)} \in X_A$. *Gesucht ist die Richtung* $d^{(k)}$, *welche das Problem*

$$\min_{d \in \mathbb{R}^n} H(x^{(k)} + d, x^{(k)}) + \frac{1}{2}\|d\|^2 \quad \textit{unter} \quad x^{(k)} + d \in X_A$$

löst. Ersetzt man die Improvement-Funktion durch die Approximation

$$\hat{H}_k(x) := \max\{\hat{f}_k(x) - f(x^{(k)}), \hat{G}_k(x)\},$$

so entsteht das Problem

$$\min_{d \in \mathbb{R}^n} \hat{H}_k(x^{(k)} + d) + \frac{1}{2}\|d\|^2 \quad \textit{unter} \quad x^{(k)} + d \in X_A.$$

Dieses wiederum ist äquivalent zum quadratischen Problem

$$\begin{array}{lrcll}
\textit{Minimiere} & v + \frac{1}{2}\|d\|^2 & & & \\
\textit{bzgl.} & v, d & & & \\
\textit{unter} & f(y^{(j)}) + \left(\lambda_f^{(j)}\right)^\top d - f(x^{(k)}) & \leq & v, & j \in J_k^f, \\
& G(y^{(j)}) + \left(\lambda_G^{(j)}\right)^\top d & \leq & v, & j \in J_k^G, \\
& Ad & \leq & b - Ax^{(k)}. &
\end{array}$$

Eine detaillierte Darstellung der auf dieser Variante der Suchrichtungsbestimmung basierenden Bundle-Methode einschließlich Erweiterungen auf nichtkonvexe Problemstellungen findet sich in [MN92] ab S. 112.

© 2003 by M. Gerdts

Notationen

Notationen:

- $U_r(x) = B(x;r) := \{y \in \mathbb{R}^n \mid \|y - x\| < r\}$ offene Umgebung/Kugel um x mit Radius r.
- $[x, y] := \{\lambda x + (1 - \lambda)y \mid 0 \leq \lambda \leq 1\}$

Definition .1 **(Elementare Operationen für Mengen)**
Es seien $X_1, X_2 \subset \mathbb{R}^n$ Mengen und $\lambda \in \mathbb{R}$.

(a) $X_1 + X_2 := \{x \mid x = y + z,\ y \in X_1, z \in X_2\}$

(b) $\lambda X_1 := \{x \mid x = \lambda z,\ z \in X_1\}$

Kapitel A

Anwendungsbeispiele

A.1 Ein einfaches Fahrzeugmodell: Differentialgleichungen, Stabilität und Eigenwerte

Ein stark vereinfachtes Fahrzeugmodell zur Untersuchung des Fahrkomforts eines Kraftfahrzeugs ist durch das Viertel-Fahrzeugmodell gegeben, vgl. Kortüm und Lugner [KL94] und Abbildung A.1.

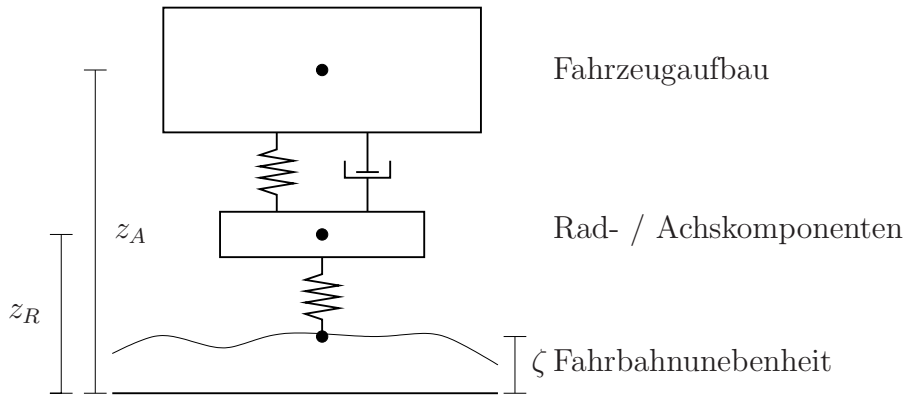


Abbildung A.1: Viertel-Fahrzeugmodell zur Untersuchung des Fahrkomforts

Die Bewegungsgleichungen der Körperschwerpunkte z_A und z_R sind durch die Differentialgleichungen

$$\begin{aligned} m_A \ddot{z}_A &= -m_A g + F_D + F_F \\ m_R \ddot{z}_R &= -m_R g - F_D - F_F + F_S \end{aligned}$$

gegeben, wobei vereinfachend lineare Kraftgesetze für die Dämpferkraft

$$F_D = c_D(\dot{z}_R - \dot{z}_A),$$

die Federkraft

$$F_F = c_F(z_R - z_A) + F_F^0$$

und die Strassenanregung

$$F_S = c_S(\zeta - z_R) + F_S^0$$

angenommen werden.
Es bezeichnen m_A und m_R die Massen des Fahrzeugaufbaus bzw. der Rad- und Achskomponenten, g die Erdbeschleunigung, c_D und c_F die Dämpfer- bzw. Federkonstante der Radaufhängung und c_S die radiale Karkassensteifigkeit des Reifens, der in idealisierter Form als Federelement modelliert ist. Nachdem durch m_A bzw. m_R geteilt wurde, läßt sich das Differentialgleichungssystem zweiter Ordnung dann als inhomogenes, lineares Differentialgleichungssystem erster Ordnung für den Zustand

$$x(t) = (z_A(t), z_R(t), v_A(t), v_R(t))^\top \in \mathbb{R}^4$$

in Matrixnotation schreiben:

$$\dot{x}(t) = Ax(t) + h(t)$$

mit

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ -\frac{c_F}{m_A} & \frac{c_F}{m_A} & -\frac{c_D}{m_A} & \frac{c_D}{m_A} \\ \frac{c_F}{m_R} & -\frac{c_F+c_S}{m_R} & \frac{c_D}{m_R} & -\frac{c_D}{m_R} \end{pmatrix},$$

$$h(t) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -g + \frac{F_F^0}{m_A} \\ -g - \frac{F_F^0}{m_R} + \frac{F_S^0}{m_R} + \frac{c_S}{m_R}\zeta(t) \end{pmatrix}.$$

Stabilität

Bei der Konstruktion eines Fahrzeugs ist insbesondere die Auswahl der Federn und Dämpfer (bzw. der entsprechenden Feder- und Dämpferkonstanten) derart vorzunehmen, daß das Fahrzeug ein **stabiles Fahrverhalten** aufweist. Beispielsweise soll das Fahrzeug nach dem Überfahren einer (nicht zu hohen) Bodenwelle nach einer gewissen Zeit wieder in die Gleichgewichtslage zurück gelangen und nicht in einen instabilen Fahrzustand gelangen.
Die Begriffe werden genauer spezifiziert. Allgemein heißt eine Lösung $x(t)$ des allgemeinen Differentialgleichungssystems

$$\dot{x}(t) = f(t, x(t)), \quad t_0 \le t < \infty,$$

stabil, wenn zu jedem $\varepsilon > 0$ ein $\delta > 0$ existiert, so daß alle Lösungen $y(t)$ mit

$$\|y(t_0) - x(t_0)\| < \delta$$

für alle $t \ge t_0$ existieren und

$$\|y(t) - x(t)\| < \varepsilon$$

© 2003 by M. Gerdts

für alle $t \geq t_0$ erfüllen. Die Lösung $x(t)$ heißt **asymptotisch stabil**, wenn sie stabil ist und wenn $\delta > 0$ existiert, so daß für alle Lösungen $y(t)$ mit $\|y(t_0) - x(t_0)\| < \delta$ gilt

$$\lim_{t\to\infty} \|y(t) - x(t)\| = 0.$$

Eine Lösung $x(t)$ heißt **instabil**, wenn sie nicht stabil ist.

Es zeigt sich, daß die Eigenwerte der Matrix A eine wesentliche Rolle bei der Beurteilung der Stabilität eines Systems spielen. Für Differentialgleichungssysteme der Form

$$\dot{x}(t) = Ax(t) + h(t, x(t))$$

kann gezeigt werden, vgl. Demailly [Dem91], daß jede Lösung $x(t)$ stabil ist, falls

- für sämtliche Eigenwerte λ_j der Matrix A gilt, daß der Realteil $Re\lambda_j < 0$ ist und

- falls die Inhomogenität h folgende Eigenschaften besitzt:

  – h ist stetig bzgl. beider Argumente,
  – es existiert eine stetige Funktion $k : [t_0, \infty) \to \mathbb{R}_+$ mit $\lim\limits_{t\to\infty} k(t) = 0$ und

  $$\|h(t, x_1) - h(t, x_2)\| \leq k(t)\|x_1 - x_2\|$$

  für alle x_1, x_2 und $t_0 \leq t < \infty$.

Die Matrix A und der Vektor h hängen noch von verschiedenen Parametern ab: c_F, c_S, c_D, m_A, m_R, F_F^0, F_S^0.

Im Hinblick auf eine möglichst optimale Fahrzeugauslegung, könnte eine mögliche **Optimierungsaufgabe** nun darin bestehen, eine geeignete Zielfunktion (etwa die Kosten der Federn, Dämpfer oder Reifen oder ein geeignetes Maß für den Fahrkomfort) in Abhängigkeit der obigen Parameter zu minimieren, wobei als Nebenbedingung u.a. gefordert wird, daß der maximale Realteil sämtlicher Eigenwerte kleiner als 0 ist, um ein stabiles Fahrverhalten zu garantieren. Alternativ könnte auch der maximale Realteil aller Eigenwerte bzgl. der obigen Parameter minimiert werden, wobei noch Nebenbedingungen an die Parameter gestellt werden können, etwa, daß die Federsteifigkeit einen gewissen Wert nicht über- bzw. unterschreiten darf.

© 2003 by M. Gerdts

Simulation des Systems

Wir wählen konkrete Werte

$$\begin{aligned}
m_A &= 300.00 \quad [kg], \\
m_R &= 60.00 \quad [kg], \\
g &= 9.81 \quad [m/s^2], \\
c_F &= 300000.00 \quad [N/m], \\
c_D &= 30000.00 \quad [Ns/m], \\
c_S &= 30000.00 \quad [N/m], \\
F_F^0 &= 64743.00 \quad [N], \\
F_S^0 &= 14211.60 \quad [N].
\end{aligned}$$

Man erhält für diesen speziellen Fall

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ -1000 & 1000 & -100 & 100 \\ 5000 & -5500 & 500 & -500 \end{pmatrix},$$

$$h(t) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 206 \\ -852 + 500 \cdot \zeta(t) \end{pmatrix}.$$

Die Lösung des Differentialgleichungssystems kann nicht für beliebige Funktionen $\zeta(t)$ explizit angegeben werden. Ist man an der Lösung des Systems interessiert, benötigt man numerische Methoden, um diese zumindest näherungsweise berechnen zu können.

Wir modellieren das Überfahren einer Bodenwelle, indem das Fahrzeug zunächst zum Zeitpunkt $t = 0$ $[s]$ aus der Gleichgewichtslage $z_A(0) = 0.562$ $[m]$, $z_R(0) = 0.356$ $[m]$, $v_A(0) = v_R(0) = 0$ $[m/s]$ startend im Zeitintervall $[5, 5 + 2\pi]$ eine Bodenwelle gegeben durch

$$\zeta(t) = \begin{cases} 0.1 \cdot \sin(t-5), & \text{falls } 5 \le t \le 5 + 2\pi, \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}$$

überfährt. Abbildung A.2 zeigt das Ergebnis der Simulation.

© 2003 by M. Gerdts

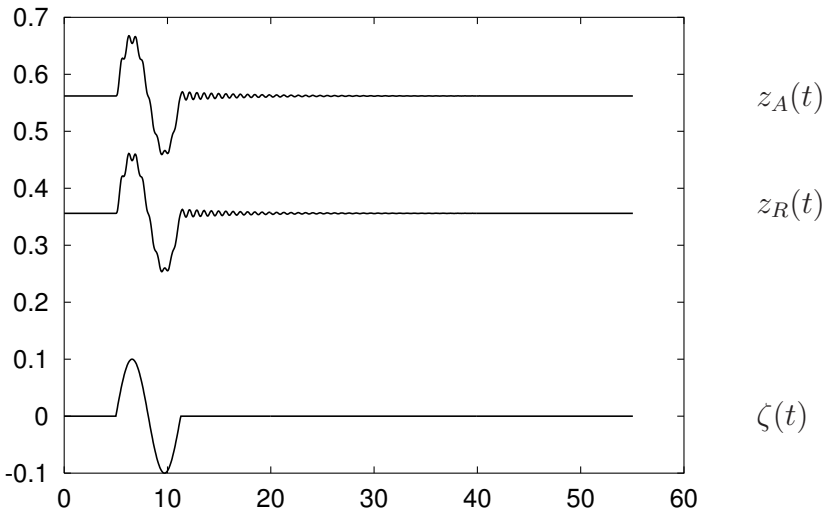


Abbildung A.2: Simulation des Überfahrens einer Bodenwelle mit dem Viertel-Fahrzeugmodell.

© 2003 by M. Gerdts

Kapitel B

Definitionen

Definition B.1 **(konvexe Menge)**
Eine Menge $X \subseteq \mathbb{R}^n$ heißt konvex, falls

$$\lambda x + (1-\lambda)y \in X$$

für alle $x, y \in X$ und alle $0 \leq \lambda \leq 1$ gilt.

Definition B.2 **(konvexe Funktion)**
Eine Funktion $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ heißt **konvex**, *falls*

$$f(\lambda x + (1-\lambda)y) \leq \lambda f(x) + (1-\lambda)f(y)$$

für alle $x, y \in \mathbb{R}^n$ und alle $0 \leq \lambda \leq 1$ gilt. Falls oben „$\leq$“ für alle $x \neq y$ gilt, heißt f **strikt konvex**.

Definition B.3 **(Konvexkombination)**
Ein Vektor $x \in \mathbb{R}^n$ heißt **Konvexkombination** *von Vektoren $x_1, \ldots, x_m \in \mathbb{R}^n$, wenn es Skalare $\lambda_1, \ldots, \lambda_m \in \mathbb{R}$ mit*

$$\lambda_i \geq 0, \quad \sum_{i=1}^{m} \lambda_i = 1$$

gibt, so daß

$$x = \sum_{i=1}^{m} \lambda_i x_i$$

gilt. Sind alle $\lambda_i > 0$, so heißt x **echte** *Konvexkombination.*

Definition B.4 **(konvexe Hülle)**
Die **konvexe Hülle** *$conv(X)$ einer Menge $X \subseteq \mathbb{R}^n$ ist die kleinste konvexe Teilmenge des $\mathbb{R}^n$, die X enthält, d.h.*

$$conv(X) = \bigcap \{M \mid M \subseteq \mathbb{R}^n \text{ konvex}, \ X \subseteq M\}.$$

Definition B.5 **(affine Menge, affine Hülle, relatives Inneres)**

- *$M \subseteq \mathbb{R}^n$ heißt* **affine Menge**, *falls*

$$(1-\lambda)x + \lambda y \in M \qquad \forall x, y \in M, \lambda \in \mathbb{R}.$$

(Jede affine Menge M kann mit geeigneten $b \in \mathbb{R}^m$ und $B \in \mathbb{R}^{m\times n}$ als

$$M = \{x \in \mathbb{R}^n \mid Bx = b\}$$

dargestellt werden.)

- *Sei $M \subseteq \mathbb{R}^n$ eine Menge. Die Menge*

$$\begin{aligned} aff(M) &:= \bigcap\{S \mid S \text{ ist affine Menge und } M \subseteq S\} \\ &= \{x = \sum_{i=1}^m \lambda_i x_i \mid x_i \in M,\ i = 1, \ldots, m,\ \sum_{i=1}^m \lambda_i = 1\}. \end{aligned}$$

heißt **affine Hülle** *von M.*

- *Sei C konvex. Die Menge*

$$relint(C) := \{x \in aff(C) \mid \exists \varepsilon > 0 : U_\varepsilon(x) \cap aff(C) \subseteq C\}$$

heißt **relatives Inneres von** *C.*

B.1 Trennungssatz

Satz B.1

Es gilt:

(a) *Sei $C \subset \mathbb{R}^n$ eine nichtleere konvexe Menge und sei $y \in \mathbb{R}^n$ ein Punkt, der nicht im Abschluß $cl(C)$ von C liegt. Dann gibt es eine Hyperebene $H = \{x \in \mathbb{R}^n \mid a^\top x = \gamma\}$, die y enthält und $a^\top y < \inf_{x\in C} a^\top x$ erfüllt.*

(b) *Sei $C \subset \mathbb{R}^n$ eine konvexe Menge und sei $y \in \mathbb{R}^n$ ein Randpunkt von C. Dann gibt es eine Hyperebene, die y enthält und die C in einem ihrer abgeschlossenen Halbräume enthält.*

Hinweise:

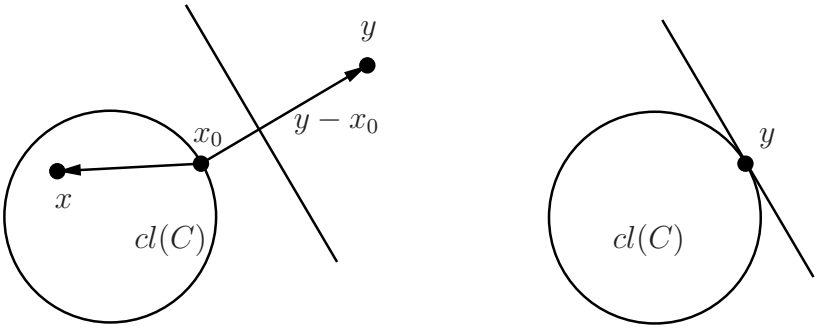
© 2003 by M. Gerdts

(i) Die abgeschlossenen Halbräume einer Hyperebene $H = \{x \in \mathbb{R}^n \mid a^\top x = \gamma\}$ sind gegeben durch

$$H_+ = \{x \in \mathbb{R}^n \mid a^\top x \geq \gamma\}, \quad H_- = \{x \in \mathbb{R}^n \mid a^\top x \leq \gamma\}.$$

(ii) Es gilt der **Projektionssatz**: Sei $\emptyset \neq M \subset \mathbb{R}^n$ eine abgeschlossene und konvexe Menge. Dann gibt es zu jedem Vektor $y \in \mathbb{R}^n$ einen eindeutigen Vektor $x_0 \in M$ mit $\|y - x_0\|_2 \leq \|y - x\|_2$ für alle $x \in M$. Notwendig und hinreichend für die Optimalität von x_0 ist, daß $(y - x_0)^\top (x - x_0) \leq 0$ für alle $x \in M$ gilt.

Projektionssatz und trennende Hyperebenen:



Beweis:

(a) Die Menge $\emptyset \neq M := cl(C)$ ist konvex und abgeschlossen. Der Projektionssatz liefert die eindeutige Existenz eines $x_0 \in M$ mit

$$\|y - x_0\|_2 \leq \|y - x\|_2 \qquad \forall x \in M$$

und

$$(y - x_0)^\top (x - x_0) \leq 0 \qquad \forall x \in M.$$

Definiere $\delta := \|y - x_0\|$. Da $y \notin M$ ist, gilt $\delta > 0$. Definiere $a := x_0 - y$. Dann gilt

$$-a^\top (x - x_0) \leq 0 \qquad \forall x \in M \qquad \Leftrightarrow \qquad a^\top x_0 \leq a^\top x \qquad \forall x \in M.$$

Es ist aber

$$a^\top x_0 = a^\top y + a^\top (x_0 - y) = a^\top y + (x_0 - y)^\top (x_0 - y) = a^\top y + \delta^2.$$

Insgesamt folgt die Behauptung aus

$$a^\top y + \delta^2 = a^\top x_0 \leq a^\top x \qquad \forall x \in M.$$

© 2003 by M. Gerdts

und durch $\gamma := a^\top y$ in der Definition der Hyperebene.

Insbesondere gilt also: $x \in C \Rightarrow a^\top x > a^\top y$, d.h. H trennt y und C.

(b) Sei $\{y_k\}$ eine gegen y konvergente Folge von Vektoren, die nicht im Abschluß von C enthalten sind, d.h. $y_k \notin cl(C)$ für alle k. Sei $\{a_k\}$ eine Folge von normierten Vektoren, die gemäß (a) konstruiert sind und für die gilt

$$a_k^\top y_k < \inf_{x \in C} a_k^\top x.$$

Da $\{a_k\}$ wegen $\|a_k\| = 1$ eine beschränkte Folge ist, gibt es eine konvergente Teilfolge $\{a_k\}$, $k \in I$, die gegen a konvergiert. Für a gilt für beliebiges $x \in C$ die Beziehung

$$a^\top y = \lim_{k \in I} a_k^\top y_k \leq \lim_{k \in I} a_k^\top x = a^\top x.$$

Mit $\gamma := a^\top y$ folgt also aus $x \in C$, daß $\gamma = a^\top y \leq a^\top x$ gilt, so daß $C \subseteq H_+$ gilt.

□

© 2003 by M. Gerdts

Kapitel C

Sonstiges

C.1 Linearisierung lokal lipschitzstetiger Funktionen

Wir beschäftigen uns intensiver mit der Linearisierung von lokal lipschitzstetigen Funktionen. In Abschnitt 4.4.1 wurde mit

$$\bar{f}(x; y, \lambda) := f(y) + \lambda^\top (x - y)$$

die Linearisierung von f in $y \in \mathbb{R}^n$ für $\lambda \in \partial_o f(y)$ eingeführt. Diese Linearisierung hängt vom gewählten Subgradienten ab und kann abhängig von λ eine mehr oder weniger gute Approximation an f darstellen, vgl. Abbildung C.1.

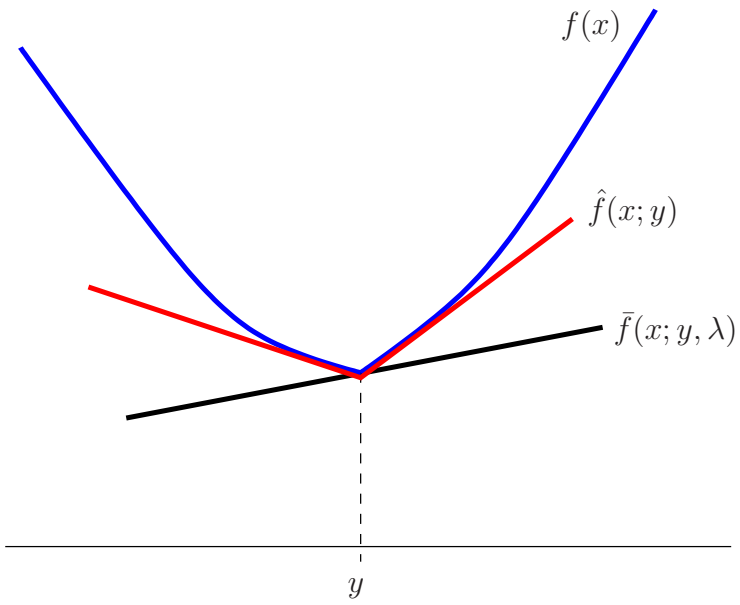


Abbildung C.1: Linearisierung und polyhedrale Approximation

Abbildung C.1 legt nahe, daß die Funktion

$$\hat{f}(x; y) := \max\{\bar{f}(x; y, \lambda) \mid \lambda \in \partial_o f(y)\}$$

in einer Umgebung von y eine sehr gute Approximation von f darstellt. Obwohl $\hat{f}(\cdot; y)$ nur stückweise linear ist, wird sie im folgenden als **Linearisierung von f in $y \in \mathbb{R}^n$** bezeichnet. Sie hat die folgenden Eigenschaften:

Hilfssatz C.1

Sei $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ lokal lipschitzstetig in y. Dann ist die Linearisierung $\hat{f}(\cdot; y)$ von f in y konvex und

(a) $\hat{f}(y; y) = f(y)$;

(b) $\hat{f}(x; y) = f(y) + f^o(y; x - y)$ *für alle* $x \in \mathbb{R}^n$;

(c) $\partial_c \hat{f}(y; y) = \partial_o f(y)$;

(d) Ist f konvex, so gelten

(i) $f(x) = \max\{\hat{f}(x; y) \mid y \in \mathbb{R}^n\}$;

(ii) $\hat{f}(x; y) \leq f(x)$ *für alle* $x \in \mathbb{R}^n$.

Beweis: (siehe [MN92], S. 76)

C.2 Abstiegsrichtungen

Der folgende Satz liefert eine für die Optimierung wichtige Eigenschaft der Linearisierung von f in einem Punkt y.

Satz C.1

Sei $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ lokal lipschitzstetig in y. d sei eine Abstiegsrichtung[1] *der Linearisierung $\hat{f}(\cdot; y)$ in y. Dann ist d auch eine Abstiegsrichtung von f.*

Beweis: (siehe [MN92], S. 78)
Da d Abstiegsrichtung von $\hat{f}(y; y)$ ist, gibt es ein $\bar{\alpha} > 0$ mit $\hat{f}(y + \alpha d; y) < \hat{f}(y; y)$ für alle $0 < \alpha \leq \bar{\alpha}$. Mit Hilfssatz 3.1 folgt

$$f(y) = \hat{f}(y; y) > \hat{f}(y + \alpha d; y) = f(y) + f^o(y; \alpha d) = f(y) + \alpha f^o(y; d)$$

bzw. $0 > f^o(y; d)$ für alle $0 < \alpha \leq \bar{\alpha}$. Hilfssatz 4.1, (a) liefert die Behauptung. □

Gemäß Satz 3.1 kann eine Abstiegsrichtung d von f in y dadurch bestimmt werden, daß eine Abstiegsrichtung der Linearisierung von f in y bestimmt wird. Eine ähnliche Vorgehensweise wurde bereits beim Schnittebenenverfahren angewendet, vgl. Abschnitte 4.4.3, 5.2. Der nächste Satz liefert ein Verfahren zur Bestimmung einer Abstiegsrichtung der Linearisierung $\hat{f}(\cdot; y)$ in y.

Satz C.2

Sei $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ lokal lipschitzstetig in y und $\hat{\lambda} \in \partial_o f(y)$ ein Subgradient mit minimaler

[1] Zur Definition der Abstiegsrichtung siehe Defnition 4.2.

© 2003 by M. Gerdts

Norm, d.h.

$$\|\hat{\lambda}\| = \min_{\lambda \in \partial_o f(y)} \|\lambda\|.$$

Dann hat das Problem

$$\min_{d \in \mathbb{R}^n} \hat{f}(y+d;y) + \frac{1}{2}\|d\|^2$$

die eindeutige Lösung $\hat{d} = -\hat{\lambda} \in \partial_o f(y)$. *Weiterhin gelten*

(a) $0 \notin \partial_o f(y) \quad \Leftrightarrow \quad \hat{d} \neq 0$;

(b) $0 \in \partial_o f(y) \quad \Leftrightarrow \quad \hat{f}(\cdot;y)$ *hat globales Minimum in* y.

Beweis: (siehe [MN92], S. 81)

Die Sätze 3.1 und 3.2 liefern ein Verfahren zur Bestimmung einer Abstiegsrichtung von f.

C.3 Linearisierung von restringierten Optimierungsproblemen

Wir betrachten Optimierungsprobleme der Form

$$\min f(x) \quad \text{unter} \quad x \in X \tag{C.1}$$

mit $X := X_G \cap X_A$ und

$$\begin{aligned} X_G &:= \{x \in \mathbb{R}^n \mid G(x) \leq 0\}, \quad G : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}, \\ X_A &:= \{x \in \mathbb{R}^n \mid Ax \leq b\}, \quad A \in \mathbb{R}^{m \times n},\ b \in \mathbb{R}^m. \end{aligned}$$

Es sei ein Punkt $y \in X_A$ gegeben. Zur Bestimmung einer Suchrichtung werden die Funktionen f und G im Optimierungsproblem durch ihre Linearisierungen in y, d.h. durch $\hat{f}(\cdot;y)$ bzw. $\hat{G}(\cdot;y)$, ersetzt:

Linearisiertes Problem:

$$\min_{d \in \mathbb{R}^n} \hat{f}(y+d;y) \quad \text{unter} \quad \hat{G}(y+d;y) \leq 0,\ y+d \in X_A. \tag{C.2}$$

Analog zum Trust-Region-Ansatz in Abschnitt 4.4.3 (vgl. auch Satz 3.2 und Hilfssatz 4.6) ergänzen wir die Zielfunktion des linearisierten Problems um den Term $\|d\|^2/2$, um eine eindeutige Lösung (falls überhaupt eine Lösung existiert) zu erhalten:

$$\min_{d \in \mathbb{R}^n} \hat{f}(y+d;y) + \frac{1}{2}\|d\|^2 \quad \text{unter} \quad \hat{G}(y+d;y) \leq 0,\ y+d \in X_A. \tag{C.3}$$

Das linearisierte Problem (C.2) kann als lokale Approximation von (C.1) angesehen werden. Allerdings gibt es Beispiele, bei denen das linearisierte Problem (und damit auch

© 2003 by M. Gerdts

(C.3)) keine Lösung besitzt, da der zulässige Bereich leer ist. Die folgenden Annahmen garantieren, daß der zulässige Bereich nichtleer ist.

Annahme C.1

(a) Die Funktionen f und G sind konvex.

(b) Es gibt ein $\tilde{x} \in \mathbb{R}^n$ mit $G(\tilde{x}) < 0$ und $A\tilde{x} \leq b$ (verallgemeinerte Slater-Bedingung).

Es zeigt sich, daß der Punkt $d = \tilde{x} - y$ zulässig ist, wenn Annahme 3.1 gilt. Denn mit Hilfssatz 3.1, (d), (ii) und der verallgemeinerte Slater-Bedingung folgt

$$\hat{G}(y + d; y) = \hat{G}(\tilde{x}; y) \leq G(\tilde{x}; y) < 0, \quad y + d = \tilde{x} \in X_A.$$

Numerisch implementierbare Verfahren erhält man, indem die Subdifferentiale, welche zur Bestimmung der jeweiligen Linearisierungen benötigt werden, durch geeignete Approximationen (Bundle-Idee) ersetzt werden.

C.4 Improvement-Funktion

Für das Optimierungsproblem

$$\min f(x) \quad \text{unter} \quad x \in X := \{x \in \mathbb{R}^n \mid g_i(x) \leq 0,\ i = 1, \ldots, m\}$$

ist die Improvement-Funktion durch $H(x, y) = \max\{f(x) - f(y), G(x)\}$ definiert, wobei $G(x) := \max\{g_i(x) \mid i = 1, \ldots, m\}$ ist.

Linearisierung von H in $y \in \mathbb{R}^n$:

$$\hat{H}(x; y) := \max\{\hat{f}(x; y) - \hat{f}(y; y), \hat{G}(x; y)\}.$$

Definition C.1 **(zulässige Richtung)**

Die Richtung $d \in \mathbb{R}^n$ heißt **zulässige Richtung** *für X in $y \in X$, falls es ein $\bar{\alpha} > 0$ gibt mit*

$$y + \alpha d \in X \qquad \forall 0 < \alpha \leq \bar{\alpha}.$$

Der folgende Satz stellt den Zusammenhang zwischen einer zulässigen Abstiegsrichtung und der Linearisierung der Improvement-Funktion her.

Satz C.3

Es sei $d \in \mathbb{R}^n$ eine Abstiegsrichtung von $\hat{H}(\cdot; x)$ in $x \in X = \{x \in \mathbb{R}^n \mid g_i(x) \leq 0\}$. Dann ist d auch eine Abstiegsrichtung von f in x und zulässig für X.

Beweis: (vgl. [MN92], S. 88)

Sei d eine Abstiegsrichtung von $\hat{H}(\cdot; x)$ in $x \in X$. Dann gibt es ein $\bar{\alpha} > 0$ mit $\hat{H}(x +$

© 2003 by M. Gerdts

$\alpha d; x) < \hat{H}(x; x) = 0$ für alle $0 < \alpha \leq \bar{\alpha}$. Aus der Definition von $\hat{H}$ folgt dann, daß $\hat{f}(x + \alpha d; x) < \hat{f}(x; x)$ für alle $0 < \alpha \leq \bar{\alpha}$ gilt, d.h. d ist eine Abstiegsrichtung von $\hat{f}$ in x. Mit Satz 3.1 folgt, daß d auch Abstiegsrichtung von f in x ist.
Weiterhin folgt aus der Definition von $\hat{H}$ ebenfalls, daß

$$\hat{G}(x + \alpha d; x) = \max\{\hat{g}_i(x + \alpha d; x) \mid i = 1, \ldots, m\} < 0 \qquad \forall 0 < \alpha \leq \bar{\alpha} \tag{C.4}$$

gilt. Falls $g_i(x) < 0$ für ein $1 \leq i \leq m$ gilt, folgt aus der Stetigkeit von g_i, daß es ein $\bar{\alpha}_i > 0$ mit $g_i(x+\alpha d) \leq 0$ für alle $0 < \alpha \leq \bar{\alpha}_i$ gibt. Falls $g_i(x) = 0$ für ein $1 \leq i \leq m$ gilt, folgt aus (C.4) die Beziehung $\hat{g}_i(x + \alpha d; x) < 0$ für alle $0 < \alpha \leq \bar{\alpha}$, d.h. d ist eine Abstiegsrichtung von $\hat{g}_i$ in x. Mit Satz 3.1 folgt, daß d auch Abstiegsrichtung von g_i in x ist, d.h. es gibt ein $\bar{\alpha}_i > 0$ mit $g_i(x + \alpha d) < g_i(x) = 0$ für alle $0 < \alpha \leq \bar{\alpha}_i$. Mit $\delta := \min_{i=1,\ldots,m}\{\bar{\alpha}, \bar{\alpha}_i\}$ folgt schliesslich $x + \alpha d \in X$ für alle $0 < \alpha \leq \delta$. □

Satz C.4

Das Problem

$$\min \hat{H}(x + d; x) + \frac{1}{2}\|d\|^2$$

hat die eindeutige Lösung $\hat{d} = -\hat{\lambda}$ *mit* $\|\hat{\lambda}\| = \min_{\lambda \in \partial_o \hat{H}} \|\lambda\|$.

Beweis: (siehe [MN92], S. 89)

© 2003 by M. Gerdts

© 2003 by M. Gerdts

Literaturverzeichnis

[Alt02] Walter Alt. *Nichtlineare Optimierung: Eine Einführung in Theorie, Verfahren und Anwendungen.* Vieweg, Braunschweig/Wiesbaden, 2002.

[BL00] J. M. Borwein and A. S. Lewis. *Convex Analysis and Nonlinear Optimization: Theory and Examples.* Springer, New York-Berlin-Heidelberg, 2000.

[BM68] J. Bracken and G. P. McCormick. *Selected Applications of Nonlinear Programming.* John Wiley & Sons, New York-London-Sydney-Toronto, 1968.

[BS79] M. S. Bazaraa and C. M. Shetty. *Nonlinear Programming: Theory and Algorithms.* John Wiley & Sons, 1979.

[Cla83] Frank H. Clarke. *Optimization and Nonsmooth Analysis.* John Wiley & Sons, New York, 1983.

[Dem91] Jean-Pierre Demailly. *Gewöhnliche Differentialgleichungen.* Vieweg, Braunschweig, 1991.

[GK99] Carl Geiger and Christian Kanzow. *Numerische Verfahren zur Lösung unrestringierter Optimierungsaufgaben.* Springer, Berlin-Heidelberg-New York, 1999.

[GK02] Carl Geiger and Christian Kanzow. *Theorie und Numerik restringierter Optimierungsaufgaben.* Springer, Berlin-Heidelberg-New York, 2002.

[GM78] P. E. Gill and W. Murray. Numerically stable methods for quadratic programming. *Mathematical Programming*, 14:349–372, 1978.

[HUL93] Jean-Baptiste Hiriart-Urruty and Claude Lemarechal. *Convex Analysis and Minimization Algorithms II.* Springer, Berlin-Heidelberg-New York, 1993.

[Kiw85] Krzysztof C. Kiwiel. Methods of Descent for Nondifferentiable Optimization. volume 1133 of *Lecture Notes in Mathematics*, Berlin-Heidelberg-New York.Tokyo, 1985. Springer.

[Kiw86] K. C. Kiwiel. A method for solving certain quadratic programming problems arising in nonsmooth optimization. *IMA Journal of Numerical Analysis*, 6:137–152, 1986.

[Kiw87] K. C. Kiwiel. A Constraint Linearization Method for Nondifferentiable Convex Minimization. *Numerische Mathematik*, 51:395–414, 1987.

[KL94] Willi Kortüm and Peter Lugner. *Systemdynamik und Regelung von Fahrzeugen*. Springer, Berlin-Heidelberg-New York, 1994.

[LRWW98] J. C. Lagarius, J. A. Reeds, M. H. Wright, and P. E. Wright. Convergence Properties of the Nelder-Mead Simplex Method in Low Dimensions. *SIAM Journal on Optimization*, 9:112–147, 1998.

[LSB81] C. Lemarechal, J. J. Strodiot, and A. Bihain. On a Bundle Algorithm for Nonsmooth Optimization. In O. L. Mangasarian, R. R. Meyer, and S. M. Robinson, editors, *Nonlinear Programming 4*, pages 245–282, New York, 1981. Academic Press.

[LV98] Ladislav Luksan and Jan Vlcek. A bundle-Newton method for nonsmooth unconstrained minimization. *Mathematical Programming*, 83:373–391, 1998.

[MÖ2] M. M. Mäkelä. Survey of Bundle Methods for Nonsmooth Optimization. *Optimization Methods and Software*, 17(1):1–29, 2002.

[McK98] K. I. M. McKinnon. Convergence of the Nelder-Mead Simplex Method to a Nonstationary Point. *SIAM Journal on Optimization*, 9:148–158, 1998.

[Mif79] R. Mifflin. A stable method for solving certain constrained least-squares problems. *Mathematical Programming*, 16(2):141–158, 1979.

[Mif82] R. Mifflin. A modification and an extension of Lemarechal's algorithm for nonsmooth minimization. *Mathematical Programming Study*, 17:77–90, 1982.

[MN92] M. M. Mäkelä and P. Neittaanmäki. *Nonsmooth Optimization: Analysis and Algorithms with Applications to Optimal Control*. World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., Singapoore, 1992.

[NM65] J. A. Nelder and R. Mead. A Simplex Method for Function Minimization. *Computer Journal*, 7:308–313, 1965.

[PCB02] C. J. Price, I. D. Coope, and D. Byatt. A Convergent Variant of the Nelder-Mead Algorithm. *Journal of Optimization Theory and Applications*, 113(1):5–19, 2002.

[Sch89] Helga Schramm. Eine Kombination von Bundle- und Trust-Region-Verfahren zur Lösung nichtdifferenzierbarer Optimierungsprobleme. volume 30 of *Bayreuther Mathematische Schriften*, Bayreuth, 1989.

© 2003 by M. Gerdts

[Sho85] N. Z. Shor. Minimization Methods for Non-Differentiable Functions. volume 3 of *Springer Series in Computational Mathematics*, Berlin-Heidelberg-New York, 1985. Springer.

[Yua85] Y. Yuan. On the superlinear convergence of a trust region algorithm for nonsmooth optimization. *Mathematical Programming*, 31:269–285, 1985.

[Zow85] J. Zowe. Nondifferentiable optimization. In K. Schittkowski, editor, *Computational Mathematical Programming*, volume F15 of *NATO ASI Series*, pages 323–355, Berlin-Heidelberg-New York, 1985. Springer.

© 2003 by M. Gerdts