

Optimierung und Variationsrechnung

Hermann Schichl

Sommersemester 2011

Inhalt

1	Einleitung	3
1.1	Terminologie	4
2	Anwendungen	7
2.1	Optimierung der Erzeugnisse einer Firma	7
2.2	Chemie – Verfahrenstechnik	7
2.3	Human Genome Project – Proteinfaltung	8
3	Optimalitätsbedingungen	9
3.1	Konvexe Analysis	9
3.2	Optima ohne Nebenbedingungen (im Inneren)	29
3.3	Optima mit Nebenbedingungen	32
3.4	Dualität	36
3.5	Karush-Kuhn-Tucker-Bedingungen	38
4	Liniensuche, Abstiegsverfahren	51
4.1	Abstiegsverfahren	51
4.2	Liniensuche	52
4.3	Optimierungsprobleme mit einfachen Schranken	59
4.4	Straf- und Barriereverfahren	61
5	Newtonartige Verfahren	69
5.0	Einschub: Nullstellen mehrdimensionaler nichtlinearer Gleichungssysteme	69
5.0.1	Problemstellung	69
5.0.2	Fixpunktverfahren	69
5.1	Quadratische Modelle	72
5.1.1	Gedämpftes Newton-Verfahren	73
5.1.2	Modifiziertes Newton-Verfahren	74
5.1.3	Diskretes Newton-Verfahren	74
5.1.4	Quasi-Newton-Verfahren	75
5.2	SQP-Verfahren	77
6	Variationsrechnung	83
6.1	Einführende Beispiele	83
6.2	Das Hamiltonsche Prinzip	85
6.3	Die Euler-Lagrange-Gleichung	85
6.4	Die zweite Variation – Jacobi-Felder	88

Inhalt

6.5	Der Satz von Noether	93
6.6	Geodäten	95
6.7	Anwendungen des Satzes von Noether	99
7	AMPL – A Mathematical Programming Language	105
7.1	LP – Ein einfaches Modell	105
7.2	LP - Ein komplexeres Problem	106
7.3	Mengen	108
7.4	Zweidimensionale Daten	108
7.5	Ganzzahligkeitsbedingungen	110
7.6	Nichtlineare Optimierung	111
7.7	Komplementaritäts-Nebenbedingungen	113

Vorbemerkungen

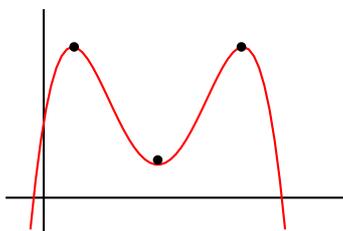
$f: D \rightarrow \mathbb{R}$ (oder Menge mit Totalordnung)

$D \subseteq \mathbb{R}^n$

gesucht: $\min f(x)$, sodass $x \in F \subseteq D$

Beispiel: $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ stetig, differenzierbar

Der Gradient ist im Minimum 0, falls es eines gibt, z. B. ein Polynom



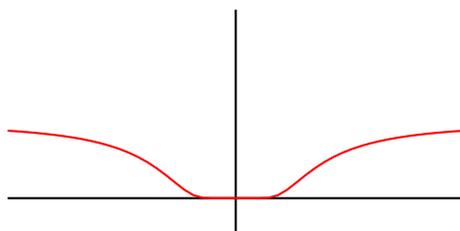
Was ist „das“ Minimum? Was heißt „das“? In einer Umgebung ist ein Tiefpunkt der kleinste, global jedoch nicht. Einen niedrigsten Punkt gibt es nicht einmal! Wir unterscheiden also ein *lokales Optimum* und ein *globales Optimum*.

Was passiert, wenn man als Definitionsmenge nicht ganz \mathbb{R}^n vorgibt? Dann kann es Randoptima geben, wo der Gradient nicht 0 ist.

Optimalitätsbedingungen

Unterscheidung: max, min, 2. Ableitung (nicht notwendig und hinreichend), z. B.

$$f(x) = \begin{cases} e^{-\frac{1}{x^2}} & x \neq 0 \\ 0 & x = 0 \end{cases}$$



Differenzierbare Funktionen mit Nebenbedingungen \Rightarrow Lagrangesche Multiplikatoren

1 Einleitung

Wir betrachten Funktionen $f: D \rightarrow X$, wobei $(X, <)$ eine totalgeordnete Menge ist, und suchen $\min_{x \in C} f(x)$ für $C \subseteq D$. Schreibweise:

$$\begin{array}{l} \min f(x) \\ \text{s.t. } x \in C \end{array}$$

In der Vorlesung ist $X = \mathbb{R}$ und $D \subseteq \mathbb{R}^n$. Die Menge C wird durch Gleichungen und Ungleichungen beschrieben. Wir betrachten die Situation

$$\begin{array}{l} \min f(x) \\ \text{s.t. } g(x) \leq 0 \\ h(x) = 0 \end{array}$$

$f: D \subseteq \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R} \dots$ Zielfunktion

$g: D \rightarrow \mathbb{R}^m \dots$ Ungleichungsbedingungen

$h: D \rightarrow \mathbb{R}^k \dots$ Gleichungsbedingungen

Man nennt g, h auch *Nebenbedingungen*.

$\mathcal{F} := \{x \in D \mid g(x) \leq 0, h(x) = 0\} \dots$ zulässige Menge ($v \leq 0 : \iff v_i \leq 0 \quad \forall i$)

$x \in \mathcal{F}$ heißt zulässiger Punkt

Ein *lokales Minimum* ist ein $\hat{x} \in \mathcal{F}$ mit

$$\exists \varepsilon > 0: f(x) \geq f(\hat{x}) \quad \forall x \in \mathcal{F} \cap B_\varepsilon(\hat{x})$$

Ein *globales Minimum* ist ein $\hat{x} \in \mathcal{F}$ mit

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

Diese beiden Situation sind äquivalent:

$$\begin{array}{l} \max f(x) \\ \text{s.t. } g(x) \leq 0 \\ h(x) = 0 \end{array} \iff \begin{array}{l} \min -f(x) \\ \text{s.t. } g(x) \leq 0 \\ h(x) = 0 \end{array}$$

1.1 Terminologie

Arten von Nebenbedingungen

- Ganzzahligkeitsbedingungen: $x_j \in \mathbb{Z}$ für ein $j \in \{1, \dots, n\}$
- einfache Nebenbedingungen, Schrankenbedingungen: $x_i \in [u_i, v_i]$ für $u_i, v_i \in \overline{\mathbb{R}} = \mathbb{R} \cup \{-\infty, \infty\}$
- lineare Nebenbedingung: g_j oder h_j sind affin (linear)
- quadratische Nebenbedingung: g_j oder h_j ist von der Form $x^\top Ax + b^\top x + c$
- nichtlineare Nebenbedingung: g_j, h_j sind nicht linear

Klassen von Optimierungsproblemen

- Sind alle Variablen ganzzahlig, dann liegt ein *kombinatorisches Optimierungsproblem* vor.
- Sind manche, aber nicht alle Variablen ganzzahlig, dann liegt ein *gemischt-ganzzahliges Optimierungsproblem* vor.
- Ist keine Variable ganzzahlig, so liegt ein *kontinuierliches Optimierungsproblem* vor.
- Unterteilung nach Zielfunktion und Nebenbedingungen:
 - Nur lineare Nebenbedingungen: linear eingeschränktes Problem
 - * Lineare Zielfunktion: Lineares Optimierungsproblem (lineares Programm)
 - * quadratische Zielfunktion: Quadratisches Optimierungsproblem
 - Nur lineare und quadratische Nebenbedingungen: quadratisch eingeschränktes Problem
 - * Lineare oder quadratische Zielfunktion: Quadratisch eingeschränktes quadratisches Problem (QCQP)
 - Nur Schrankenbedingungen: einfach eingeschränktes Problem, Problem mit Schrankenbedingungen
 - keine Nebenbedingungen: unbeschränktes Problem
 - Nebenbedingung oder Zielfunktion nicht linear: nichtlineares Problem
- Spezialfall: (M)IP ([Mixed] Integer Programme, [gemischt] ganzzahliges lineares Problem)
- Ist die Zielfunktion konstant, so heißt das Problem ein *Zulässigkeitsproblem*. In diesem Fall lässt man die Zielfunktion meist weg.

Bemerkung

Ist $x_i \in \mathbb{Z}$, dann kann man das in eine kontinuierliche Bedingung umschreiben:

$$\sin(\pi x_i) = 0$$

Spezialfall: $x_i \in \{0, 1\}$, einfacher $x_i(1 - x_i) = 0$

Sind g, h unendlichdimensional, dann spricht man von einem *semi-infiniten Problem*, ist D unendlichdimensional, dann von einem *infiniten Problem*.

Notation

$$\setminus a := [\underline{a}, \bar{a}] = \prod_{i=1}^{\ell} [a_i, \bar{a}_i]$$

$$g(x) := \nabla f(x) \dots \text{Gradient}$$

$$G(x) := \nabla^2 f(x) \dots \text{Hesse-Matrix}$$

2 Anwendungen

2.1 Optimierung der Erzeugnisse einer Firma

Eine Fabrik hat eine Maschine (Walzwerk) und kann damit zwei Produkte herstellen: Stahlbleche oder Schienen (aber nicht gleichzeitig). Eine Tonne Schienen bringt 30 € Gewinn, eine Tonne Stahlblech 25 €. Die maximal erzeugbare Menge pro Stunde ist 200 t Stahlblech bzw. 140 t Schienen. Die Maschine kann höchstens 40 Stunden lang ununterbrochen laufen. Pro Woche gibt es eine Nachfrage nach 6 000 t Stahlblech und 4 000 t Schienen.

Frage: Wie viele Tonnen Schienen und Stahlblech sollen in der Woche produziert werden?

x_B ... Stahlblech in Tonnen

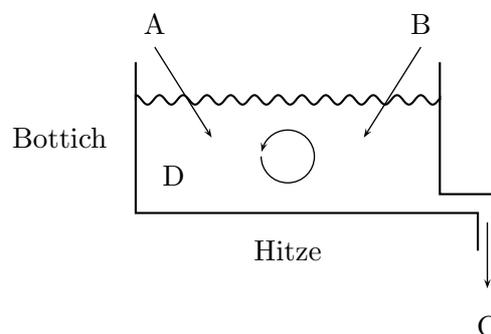
x_S ... Schienen in Tonnen

Gewinn:

$$\begin{aligned} & 30x_S + 25x_B \rightarrow \max \\ \text{s. t. } & 0 \leq x_B \leq 6000 \\ & 0 \leq x_S \leq 4000 \\ & \frac{1}{200}x_B + \frac{1}{140}x_S \leq 40 \end{aligned}$$

Es handelt sich dabei um ein lineares Optimierungsproblem (LP).

2.2 Chemie – Verfahrenstechnik



2 Anwendungen

Phasenübergänge in der Reaktion bestimmen die Effizienz des Herstellungsverfahrens. Die Phasen werden durch die Gibbs'sche freie Energie modelliert. Das ist eine recht komplizierte Funktion der Form

$$G = \sum_{p \in P} \sum_{c \in C} N_c^p \left(\frac{\Delta G_{p_i} f^c}{R_T} + \log \frac{N_c^p}{\sum_{c \in C} N_c^p} \right) + \sum_{c \in C} \sum_{p \in P} N_c^p \left(\sum_{c' \in C} \gamma_{cd} \tau_{cd} \psi_c^p \right)$$

($\gamma_{cd} = e^{-\alpha_{cd} \tau_{cd}}$) mit Nebenbedingungen.

Das globale Minimum solch einer Funktion beschreibt die Molaritäten in den einzelnen Stoffen in der Mischung in den verschiedenen Phasen einer Reaktionsgleichung.

Es handelt sich dabei um ein globales Optimierungsproblem.

2.3 Human Genome Project – Proteinfaltung

Die 3D-Struktur eines Proteins bestimmt seine chemischen Eigenschaften. Ein Protein besteht aus einer Sequenz von Aminosäuren, die jeweils aneinander durch eine Peptidbildung gebunden sind.

BILD

Die DNS besteht aus vier Basen (Nukleinsäuren): Adenin, Thymin, Guanin, Cytosin. Sie kodiert die Primärstruktur eines Proteins, d. h. die Reihenfolge der Aminosäuren im Protein.

Proteinfaltung:

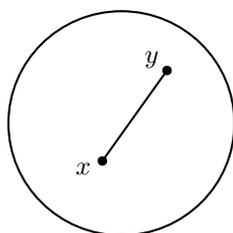
Berechne die 3D-Struktur eines Proteins (Tertiärstruktur) aus seiner Primärstruktur. Das geht so ähnlich wie bei der Gibbs'schen freien Energie durch globale Optimierung einer (nicht linearen) Energiefunktion.

3 Optimalitätsbedingungen

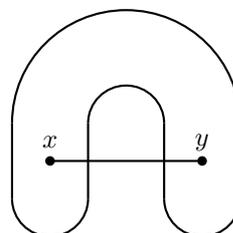
3.1 Konvexe Analysis

Eine Menge $C \subseteq \mathbb{R}^n$ heißt *konvex*, wenn für alle $x, y \in C$ gilt:

$$\overline{xy} := \{ty + (1-t)x \mid t \in [0, 1]\} \subseteq C$$



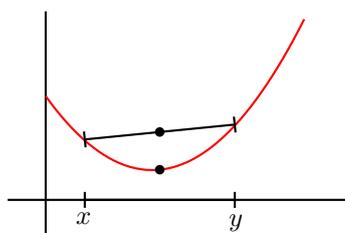
konvex



nicht konvex

Eine Funktion $f: C \rightarrow \mathbb{R}$ heißt *konvex*, falls für alle $x, y \in C$ gilt:

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



Eine Funktion f heißt *strikt konvex*, falls (*) gilt und Gleichheit in (*) schon $t \in \{0, 1\}$ erzwingt.

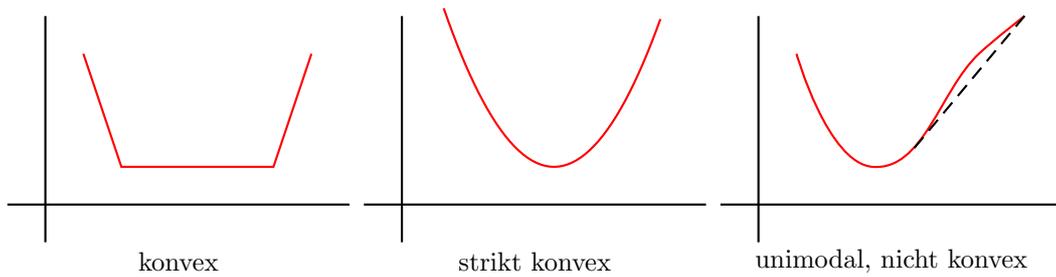
Eine Funktion f heißt *(strikt) konkav*, falls $-f$ (strikt) konvex ist.

Eine Funktion f heißt *quasikonvex* in C , falls $f(z) \leq \max(f(x), f(y))$ für alle $z \in \overline{xy}$ und $x, y \in C$ gilt.

Eine Funktion f heißt *unimodal*, falls $f(z) < \max(f(x), f(y))$ für alle $z \in \overline{xy}$ und $z \neq x, y \in C$ gilt.

Analog: quasikonkav

3 Optimalitätsbedingungen



Eine Funktion $F: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ heißt (strikt, quasi-) konvex (konkav, unimodal), wenn sie es komponentenweise ist.

Proposition 3.1.1

Sei $C \subseteq \mathbb{R}^n$ konvex, $F: C \rightarrow \mathbb{R}^m$ konvex. Dann gilt $C' := \{x \in C \mid F(x) \leq 0\}$ ist konvex.

Proposition 3.1.2

Sei $C \subseteq \mathbb{R}^n$ konvex, $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ sei stetig differenzierbar (C^1) mit Gradient g , dann gelten:

- (i) Genau dann ist f konvex in C , wenn $f(y) - f(z) \geq g(z)^\top(y - z) \quad \forall y, z \in C$.
- (ii) Ist f sogar C^2 und G die Hesse-Matrix, so ist f genau dann konvex, wenn $G(x)$ für alle $x \in \text{int } C$ positiv semidefinit ist.
- (iii) Ist $G(x)$ positiv definit für alle $x \in C$, so ist f strikt konvex.

Beweis.

- (i) \Rightarrow : Sei f konvex, $y, z \in C$

$$\begin{aligned}
 f(ty + (1-t)z) &\leq tf(y) + (1-t)f(z) \quad \forall t \in [0, 1] \\
 f(ty + (1-t)z) - f(z) &\leq t(f(y) - f(z)) \\
 f(z + t(y-z)) - f(z) &\leq t(f(y) - f(z)) \\
 f(z + t(y-z)) - f(z) &\leq f(y) - f(z) \quad \forall t \in [0, 1] \\
 t \rightarrow 0: \quad g(z)^\top(y-z) &\leq f(y) - f(z)
 \end{aligned}$$

\Leftarrow : Für alle $y, z \in C$ sei $g(z)^\top(y-z) \leq f(y) - f(z)$. Seien $x, y \in C$. Wir setzen

$$z := ty + (1 - t)x$$

$$\begin{aligned} tf(y) + (1 - t)f(x) &= t(f(y) - f(x)) + f(x) \\ &= t(f(y) - f(z)) + (1 - t)(f(x) - f(z)) + f(z) \\ &\geq tg(z)^\top(y - z) + (1 - t)g(z)^\top(x - z) + f(z) \\ &= g(z)^\top \underbrace{(ty + (1 - t)x - z)}_{=0} + f(z) \\ &= f(ty + (1 - t)x) \Rightarrow f \text{ ist konvex} \end{aligned}$$

(ii) Seien $y, z \in C$. Da f konvex ist und wegen (i) folgt

$$\begin{aligned} f(y) - f(z) &\geq g(z)^\top(y - z) \\ f(y) &= f(z) + g(z)^\top(y - z) + \int_0^t (y - z)^\top G(z + t(y - z)(1 - t)) dt \end{aligned}$$

\Leftarrow : Wegen $G \succeq 0$ gilt

$$(y - z)^\top G(z + t(y - z))(y - z) \geq 0$$

Also ist $\int_0^1 \dots dt \geq 0$ und daher $f(y) - f(z) \geq g(z)^\top(y - z)$, somit ist f konvex.

\Rightarrow : Sei f konvex und $h \in \mathbb{R}^n$ beliebig. Sei weiters $z \in \text{int}(C)$, dann gibt es $\lambda > 0$ mit $z + \lambda h \in \text{int}(C)$. Da f konvex ist, folgt aus (i)

$$f(z + \mu h) - f(z) - \mu g(z)^\top h \geq 0 \quad \forall \mu \in [0, 1]$$

Der Satz von Taylor liefert

$$f(z + \mu h) - f(z) - \mu g(z)^\top h = \frac{1}{2} \mu^2 h^\top G(z) h + \mu^2 R^2(z, \mu h) \|h\|^2 \geq 0$$

Für $\mu > 0$ folgt

$$\lim_{\mu \rightarrow 0} \frac{1}{2} h^\top G(z) h + \underbrace{R^2(z, \mu h) \|h\|^2}_{=0} \geq 0 \Rightarrow G \succeq 0$$

(iii) Sei $z \neq y$. Dann ist der Integrand stetig und an einer Stelle (z. B. $t = \frac{1}{2}$) strikt positiv, also ist das Integral strikt positiv. Daher gilt

$$f(y) - f(z) > g(z)^\top(y - z) \quad \forall y \neq z \in C$$

Verwende noch einmal den Beweis von (i), wo in $(**)$ \geq durch $>$ ersetzt wird, und erhalte f strikt konvex.

□

Die Umkehrung von (iii) gilt nicht. Beispiel: $x \mapsto x^4, \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$

3 Optimalitätsbedingungen

Proposition 3.1.3

- (i) Jede lineare Funktion $f(x) = c^\top x + \gamma$ ist konvex (und auch konkav).
- (ii) Der Durchschnitt konvexer Mengen ist konvex.
- (iii) Ist $C \subseteq \mathbb{R}^n$ konvex und $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $b \in \mathbb{R}^m$, dann sind folgende Mengen konvex:

$$C_1 = \{x \in C \mid Ax \geq b\}$$

$$C_2 = \{x \in C \mid Ax \leq b\}$$

$$C_3 = \{x \in C \mid Ax = b\}$$

Beweis.

- (i) folgt aus Proposition 3.1.2 (i)
- (ii) ist klar
- (iii) folgt aus Proposition 3.1.1 (i) und (ii)

□

Theorem 3.1.4 (Existenz und Eindeutigkeit von Lösungen)

- (i) Sei $K \neq \emptyset$ kompakt und $f: K \rightarrow \mathbb{R}$ stetig. Dann hat das folgende Optimierungsproblem eine globale Lösung:

$$(O) \quad \begin{array}{ll} \min & f(x) \\ \text{s.t.} & x \in K \end{array}$$

- (ii) Sind K und f konvex, dann ist jede lokale Lösung des Optimierungsproblems (O) eine globale Lösung und die Menge $S(f, k)$ der globalen Minima ist konvex.
- (iii) Sei C konvex. Ist f unimodal in C (z. B. wenn f strikt konvex), dann hat das Optimierungsproblem (O) höchstens eine lokale Lösung.

Beweis.

- (i) folgt aus der Analysis-Vorlesung
- (ii) Seien f und K konvex und \hat{x} eine lokale Lösung von (O). Sei $x \in K$ beliebig, $x \neq \hat{x}$. Dann gilt

$$f(x) - f(\hat{x}) \geq \frac{f(\hat{x} + t(x - \hat{x})) - f(\hat{x})}{t} \quad \forall t \in]0, 1[$$

Für ausreichend kleines t ist die rechte Seite ≥ 0 . Daher gilt $f(x) \geq f(\hat{x})$, also ist \hat{x} globales Minimum. Sei \bar{x} ein weiteres globales Minimum:

$$0 = f(\bar{x}) - f(\hat{x}) \geq \frac{f(\hat{x} + t(\bar{x} - \hat{x})) - f(\hat{x})}{t} \quad \forall t \in]0, 1[$$

$$\Rightarrow f(\hat{x} + t(\bar{x} - \hat{x})) - f(\hat{x}) \leq 0$$

$$\Rightarrow f(\hat{x} + t(\bar{x} - \hat{x})) = f(\hat{x}), \text{ weil } \hat{x} \text{ global minimal ist}$$

Also ist auch $\hat{x} + t(\bar{x} - \hat{x})$ für alle $t \in]0, 1[$ ein globales Minimum und es gilt für $\hat{x}, \bar{x} \in S(f, k)$, dass $\hat{x} + t(\bar{x} - \hat{x}) \in S(f, k) \quad \forall t \in]0, 1[$, also ist $S(f, k)$ konvex.

(iii) Sei \hat{x} lokale Lösung von (O) und $x \in K \setminus \{\hat{x}\}$ beliebig, dann ist $f(\hat{x} + t(x - \hat{x})) \geq f(\hat{x})$ für genügend kleines $t \in]0, 1[$. Da f unimodal ist, gilt

$$f(\hat{x}) \leq f(\hat{x} + t(x - \hat{x})) < \max(f(\hat{x}), f(x)) \Rightarrow f(x) > f(\hat{x})$$

Daher existiert höchstens eine Lösung. □

Bemerkung: Niveaumenge $C(f, \gamma) := \{x \in K \mid f(x) = \gamma\}$

Hat f für ein γ eine nichtleere, kompakte Niveaumenge, so kann man 3.1.4 (i) auch anwenden. dann ist nämlich das Optimierungsproblem (O) äquivalent zu

$$\begin{aligned} \min f(x) \\ \text{s.t. } x \in C(f, \gamma) \end{aligned}$$

Theorem 3.1.5 (Abstrakte Optimalitätsbedingungen 1. Ordnung)

Sei C konvex und f sei C^1 auf C mit Gradient g .

(i) Wenn $\hat{x} \in C$ eine (lokale) Lösung des Optimierungsproblems

$$(*) \quad \begin{aligned} \min f(x) \\ \text{s.t. } x \in C \end{aligned}$$

ist, dann gilt

$$g(\hat{x})^\top (x - \hat{x}) \geq 0 \quad \forall x \in C$$

(ii) Wenn f konvex ist, dann gilt auch die Umkehrung.

Beweis.

(i) Sei $x \in C$, dann muss $\hat{x} + t(x - \hat{x}) \in C$ für alle $t \in [0, 1]$ gelten. Für t klein genug folgt

$$0 \leq \frac{f(\hat{x} + t(x - \hat{x})) - f(\hat{x})}{t} \xrightarrow{t \rightarrow 0} 0 \leq g(\hat{x})^\top (x - \hat{x})$$

3 Optimalitätsbedingungen

- (ii) Sei f konvex und $\hat{x} \in C$ so, dass für alle $x \in C$ gilt: $g(\hat{x})^\top(x - \hat{x}) \geq 0$. Wegen Proposition 3.1.2 (i) sehen wir

$$f(x) - f(\hat{x}) \geq g(\hat{x})^\top(x - \hat{x}) \geq 0 \Rightarrow f(x) \geq f(\hat{x})$$

Daher ist \hat{x} globales Optimum. □

Bemerkung: Ist $\hat{x} \in \text{int } C$, dann gibt es ε mit $B_\varepsilon(\hat{x}) \subseteq C$. Also gilt für $h \in \mathbb{R}^n$ beliebig, dass $g(\hat{x})^\top h \geq 0 \Rightarrow g(\hat{x})^\top h = 0 \quad \forall h \in \mathbb{R}^n \Rightarrow g(\hat{x}) = 0$. Liegt $\hat{x} \in \partial C$, dann wird die Sache interessanter.

Sei V ein Vektorraum. Eine Menge $K \subseteq V$ heißt *Kegel*, wenn $\mathbb{R}_+^0 \subseteq K$ gilt. Sei $M \subseteq V$. Der von M erzeugte Kegel K_M ist die Menge

$$K_M := \mathbb{R}_+^0 M = \{\lambda x \mid \lambda \geq 0, x \in M\}$$

Der zu M polare Kegel an $x \in M$ ist

$$P(M, x) := \{g \in V^* : \langle g, z - x \rangle \geq 0 \quad \forall z \in M\} \subseteq V^*$$

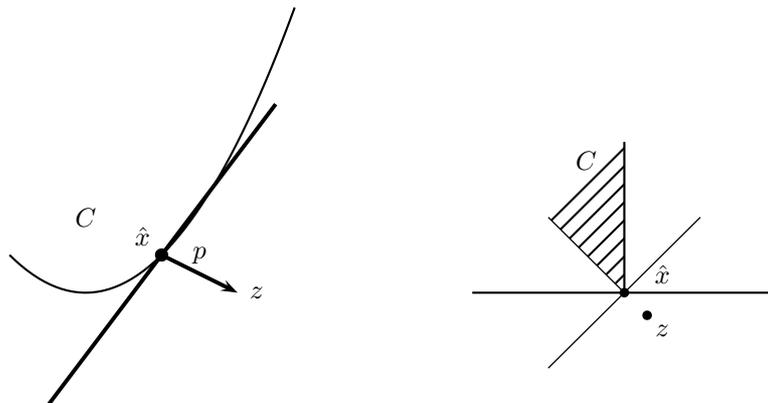
Bei uns ist $V = \mathbb{R}^n$ mit dem Standard-Skalarprodukt. Daher ist $V^* \cong \mathbb{R}^n$. Also ist $g(\hat{x})^\top(x - \hat{x}) \geq 0 \quad \forall x \in C$ gleichbedeutend mit $g(\hat{x}) \in P(C, \hat{x})$.

BILD???

Theorem 3.1.6 (Separationssatz)

Sei $C \subseteq \mathbb{R}^n, C \neq \emptyset$ konvex und abgeschlossen, $z \notin C$. Dann existieren $\hat{x} \in C$ und $p \in \mathbb{R}^n$, sodass

$$p^\top z < p^\top \hat{x} \leq p^\top x \quad \forall x \in C$$



Beweis. Sei $x_0 \in C$ und betrachte das Optimierungsproblem

$$\begin{aligned} \min & \|x - z\|_2 \\ \text{s.t. } & x \in C \\ & \|x - z\|_2 \leq \|x - x_0\|_2 \end{aligned}$$

Das Problem hat wegen 3.1.3 eine globale Lösung \hat{x} . Sei $p := \hat{x} - z \neq 0$, dann ist $p^\top \hat{x} - p^\top z = p^\top p > 0$. Sei $x \in C$ beliebig, $t \in]0, 1[$, dann ist $x' := \hat{x} + t(x - \hat{x}) \in C$.

$$\begin{aligned} 0 & \leq \|x' - z\|_2^2 - \|\hat{x} - z\|_2^2 \\ & = \|p + t(x - \hat{x})\|_2^2 - \|p\|_2^2 \\ & = 2tp^\top(x - \hat{x}) + t^2\|x - \hat{x}\|_2^2 \\ & \stackrel{t \neq 0}{\Rightarrow} 2p^\top(x - \hat{x}) + t\|x - \hat{x}\|_2^2 \geq 0 \\ & \stackrel{t \neq 0}{\Rightarrow} p^\top(x - \hat{x}) \geq 0 \\ & \stackrel{t \rightarrow 0}{\Rightarrow} p^\top x \geq p^\top \hat{x} \end{aligned}$$

□

Lemma 3.1.7 (Farkas)

Sei $A \in \mathbb{R}^{n \times m}$, $g \in \mathbb{R}^n$. Dann kann genau eine der folgenden Bedingungen erfüllt werden:

- (i) Es gibt $p \in \mathbb{R}^n$ mit $g^\top p < 0$ und $Ap \geq 0$.
- (ii) Es gibt $0 \leq q \in \mathbb{R}^m$ mit $g = A^\top q$.

BILDER

Beweis. Die Aussagen (i) und (ii) können nicht beide gelten: Sei (ii) erfüllt und $p \in \mathbb{R}^n$ mit (i)

$$0 > g^\top p = (A^\top q)^\top p = \underbrace{q^\top Ap}_{\geq 0} \geq 0$$

Widerspruch

Sei (ii) nicht erfüllbar, dann ist $g \notin C := \{A^\top q \mid q \geq 0\} \neq \emptyset$. Da C konvex ist, gibt es nach dem Separationssatz ein $p \in \mathbb{R}^n$ mit $p^\top g < p^\top x$ für alle $x \in C$. Wegen $0 \in C$ folgt $g^\top p < 0$.

3 Optimalitätsbedingungen

Setze $q := \frac{1}{\varepsilon} \cdot e_i$, wobei $\varepsilon > 0$ und e_i der i -te Einheitsvektor ist:

$$\begin{aligned} A^\top q &= \frac{1}{\varepsilon} A^\top e_i \in C \\ p^\top g &< \frac{1}{\varepsilon} p^\top A^\top e_i \\ \Rightarrow \varepsilon p^\top g &< e_i^\top A p = (A p)_i \\ \varepsilon \rightarrow 0 &\Rightarrow 0 \leq (A p)_i \\ &\Rightarrow A p \geq 0 \Rightarrow \text{(i)} \end{aligned}$$

□

Theorem 3.1.8 (Transpositionssatz)

Sei $B \in \mathbb{R}^{m \times n}$, (I, J, K) seien eine Partition der Menge $\{1, \dots, n\}$ mit $K \neq \emptyset$. In diesem Fall ist genau eine der folgenden Bedingungen erfüllt:

(i) Es gibt $p \in \mathbb{R}^n$ mit

$$(B p)_I = 0, \quad (B p)_J \geq 0, \quad (B p)_K > 0$$

(ii) Es gibt $q \in \mathbb{R}^m$ mit

$$B^\top q = 0, \quad q_{J \cup K} \geq 0, \quad q_K \neq 0$$

Beweis. Wir setzen $g := \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ mit $0 \in \mathbb{R}^n, 1 \in \mathbb{R}^m$

$$A := \begin{pmatrix} B_I & 0 \\ -B_I & 0 \\ B_J & 0 \\ B_K & e \end{pmatrix} \text{ mit } e = \begin{pmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\bar{p} := \begin{pmatrix} p \\ -\tau \end{pmatrix} \text{ mit } \tau \in \mathbb{R}, p \in \mathbb{R}^n$$

$$\bar{q} := \begin{pmatrix} u \\ v \\ w \\ z \end{pmatrix} \text{ mit } u \in I, v \in I, w \in J, z \in K$$

$$0 > g^\top \bar{p} = -\tau \Rightarrow \tau > 0$$

$$0 \leq A \bar{p} \iff \underbrace{(B p)_I \geq 0 - (B p)_I \geq 0}_{(B p)_I = 0} \quad (B p)_J \geq 0$$

$$(B p)_K - \tau e \geq 0$$

Aussage (i) im Lemma von Farkas mit g, \bar{p} ist äquivalent zu (i) im Transpositionssatz.

$$g = A^\top q \iff 0 = B_I^\top u - B_I^\top v + B_J^\top w + B_K^\top z$$

$$1 = e^\top z$$

$$\bar{q} \geq 0 \iff u \geq 0, v \geq 0, w \geq 0, z \geq 0$$

Es sei q so gebildet:

$$q_I := u - v$$

$$q_J := w$$

$$q_K := z$$

Aussage (ii) im Lemma von Farkas für g, A, \bar{q} ist äquivalent zu

$$0 = B_I^\top q_I + B_J^\top q_J + B_K^\top q_K = B^\top g$$

$$q_{J,K} \geq 0, e^\top q_K \implies q_K \neq 0$$

Da $B^\top q = 0$ homogen ist, kann man bei $q_K \neq 0$ immer durch Multiplikation mit einer positiven Konstante $e^\top q_K = 1$ erreichen. Daher ist (ii) im Lemma von Farkas äquivalent zu (ii) im Transpositionssatz. \square

Notation: Für $x, y \in \mathbb{R}^n$ sei

$$(\inf(x, y))_i := \inf(x_i, y_i)$$

$$(\sup(x, y))_i := \sup(x_i, y_i)$$

$$x^+ := \sup(x, 0)$$

$$x^- := \sup(-x, 0)$$

Definition 3.1.9. Wir sagen, zwei Vektoren $x, y \in \mathbb{R}^n$ sind *komplementär*, wenn eine der folgenden vier äquivalenten Bedingungen erfüllt ist:

(i) $\inf(x, y) = 0$

(ii) $x \geq 0, y \geq 0, x_i y_i = 0 \quad \forall i = 1, \dots, n$

(iii) $x \geq 0, y \geq 0, x^\top y = 0$

(iv) $x = z^+, y = z^-$ für ein $z \in \mathbb{R}^n$

Zwei Vektoren heißen *strikt komplementär*, falls kein $i \in \{1, \dots, n\}$ existiert mit $x_i = y_i = 0$. Das ist genau dann der Fall, wenn x, y komplementär sind und $x + y > 0$ ist.

Ein konvexer Polyeder ist eine Menge der Form

(*)
$$C := \{x \in \mathbb{R}^n \mid Ax \geq b\}$$

3 Optimalitätsbedingungen

für $A \in \mathbb{R}^{m \times n}, b \in \mathbb{R}^m$. Sie ist ein Schnitt endlich vieler Halbräume

$$H_{p,c} := \{x \in \mathbb{R}^n \mid p^\top x \geq c\}$$

Ist C zusätzlich beschränkt, also kompakt, dann heißt C *Polytop*.

Bemerkung: Die zulässige Menge eines linear beschränkten Optimierungsproblems ist ein konvexer Polyeder.

Theorem 3.1.10

- (i) Der Polyeder (*) ist abgeschlossen. Er ist genau dann leer, wenn es $y \in \mathbb{R}^n$ gibt mit

$$A^\top y = 0, y \geq 0, b^\top y > 0$$

- (ii) Der polare Kegel bei $x \in C$ ist gegeben durch

$$P(C, x) = \{A^\top y \mid \inf(y, Ax - b) = 0\}$$

Beweis.

- (i) Dass der Polyeder abgeschlossen ist, ist klar. Wir müssen noch zeigen, dass er nicht leer ist:

\Leftarrow : Sei $x \in C$ und y wie angegeben. Dann gilt

$$0 \leq (Ax - b)^\top y = \underbrace{x^\top A^\top y}_{=0} - \underbrace{b^\top y}_{>0} < 0$$

Widerspruch

\Rightarrow : Nehmen wir an, dass kein y wie angegeben existiert., d. h.

$$\nexists y: A^\top y = 0, y \geq 0, b^\top y > 0.$$

Sei $g := -b, p := y, A' = (-A, A, 1)^\top$

$$A'p > 0 \Rightarrow \underbrace{-A^\top y \geq 0, A^\top y \geq 0, y \geq 0}_{A^\top y = 0}$$

$$q^\top p < 0 \iff b^\top y > 0$$

Also gilt (i) im Lemma von Farkas nicht, also muss (ii) im Lemma von Farkas gelten.

$$\exists 0 \leq q = \begin{pmatrix} u \\ v \\ w \end{pmatrix} \text{ mit } A'^\top q = g \iff$$

$$\iff -b = (-A, A, 1)q = -Au + Av + w = A(v - u) + w$$

$$\text{Sei } x := u - v \Rightarrow Ax = b + w \geq b \Rightarrow x \in C \Rightarrow C \neq \emptyset$$

Damit ist (i) bewiesen.

$$(ii) \quad g \in P(C, x) \iff \exists z \in C: g^\top(z - x) < 0$$

Sei $p := \frac{z-x}{t}$ für $t > 0$ beliebig, dann gilt

$$(**) \quad g^\top p < 0, \quad 0 \leq Az - b = Ax - b + tAp$$

$$\Rightarrow g \notin P(C, x) \iff \exists p: g^\top p < 0, 0 \leq Ax - b + tAp \text{ für ein } t > 0$$

Sei J die Menge aller Indices j mit $(Ax - b)_j = 0$, dann kann $(**)$ für genügend kleines t erfüllt werden, wenn es ein $p \in \mathbb{R}^n$ gibt mit

$$g^\top p < 0, \quad A_{J:p} \geq 0$$

Das Lemma von Farkas sagt, dass so ein p genau dann existiert, wenn $g = A_I^\top, g \geq 0$ nicht lösbar ist. Also gilt $g \in P(C, x)$ genau dann, wenn $g \geq 0$ existiert mit $A_I^\top q = g$.

$$\text{Sei } y_i = \begin{cases} q_i & i \in I \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \Rightarrow g = A^\top y$$

$$y \geq 0, Ax - b \geq 0$$

$$y_i(Ax - b)_i = 0 \quad \forall i \iff \inf(y, Ax - b) = 0$$

□

Proposition 3.1.11

Ist das System $Ax = b, x \geq 0$ lösbar, dann hat es auch eine Lösung \hat{x} mit der Eigenschaft, dass die Spalten $A_{:K}$ mit $\hat{x}_K \neq 0$ linear unabhängig sind.

Beweis. Sei x eine Lösung mit minimaler Anzahl von Einträgen $x_j \neq 0$

$$K := \{k \mid x_k \neq 0\}$$

Sei $A_{:K} p_K = 0$ für ein $p_K \neq 0$, d. h. $\sum_{i \in K} A_{:i} p_i = 0$ (d. h. seien die Spalten linear abhängig). Wir ergänzen p_K zu einem Vektor $p \in \mathbb{R}^n$ durch $p_i := 0$ für $i \notin K$. Dann muss $Ap = 0$ sein.

Sei $k \in K$ gegeben mit $p_k \neq 0$.

$$\alpha := \min \left\{ \frac{x_k}{p_k} \mid p_k > 0 \right\} > 0$$

3 Optimalitätsbedingungen

Sei nun $\bar{x} := x - \alpha p \geq 0$

$$A\bar{x} = Ax - \underbrace{\alpha Ap}_{=0} = Ax = b$$

Also ist \bar{x} eine Lösung. Aber \bar{x} hat weniger Einträgen $\neq 0$ als x , denn sei j so, dass $\alpha = \frac{x_j}{p_j}$ dann folgt $\bar{x}_j = 0$ – Widerspruch dazu, dass x minimale Anzahl von Einträgen $\neq 0$ hat. Folglich ist $p = 0$ und $A_{:K}$ sind linear unabhängig. \square

Proposition 3.1.12

- (i) Eine konvexe Menge C enthält mit den Punkten x_0, \dots, x_m auch alle Punkte der Form

$$x = \sum_{k=0}^m \lambda_k x_k, \quad \lambda_i \geq 0, \quad \sum_{i=0}^m \lambda_i = 1,$$

also alle konvexen Linearkombinationen (Konvexkombinationen) der x_i .

- (ii) Ist C konvex mit $\text{int } C \neq \emptyset, x_1 \in \bar{C}, x_2 \in \text{int } C$, dann gilt:

$$\lambda x_1 + (1 - \lambda)x_2 \in \text{int } C \quad \forall \lambda \in]0, 1[$$

- (iii) ist C konvex mit $\text{int } C \neq \emptyset$, so ist auch \bar{C} konvex.

Beweis.

- (i) Übung

- (ii) Wegen $x_2 \in \text{int } C$ gibt es $\varepsilon > 0$ mit

$$D_\varepsilon := \{x \mid \|x - x_2\|_2 < \varepsilon\} \subseteq \text{int } C$$

Sei $y := \lambda x_1 + (1 - \lambda)x_2$ für $\lambda \in]0, 1[$. Weiters sei $z \in D_{(1-\lambda)\varepsilon}(y)$.

$$x_1 \in \bar{C} \Rightarrow \left\{ x \mid \|x - x_1\|_2 < \frac{(1-\lambda)\varepsilon - \|z - y\|_2}{\lambda} \right\} \cap C \neq \emptyset$$

Sei z_1 in dieser Menge. Dann ist $z_1 \in C$ und

$$\|z_1 + x_1\|_2 < \frac{(1-\lambda)\varepsilon - \|z - y\|_2}{\lambda}.$$

Wir definieren $z_1 := \frac{z - \lambda z_1}{1 - \lambda}$.

$$\|z_2 - x_2\|_2 = \left\| \frac{z - \lambda z_1}{1 - \lambda} - x_2 \right\|_2 = \left\| \frac{z - \lambda z_1 + y + \lambda x_2}{1 - \lambda} \right\|_2 =$$

$$= \frac{1}{1-\lambda} \|(z-y) + \lambda(x_1 - z_1)\|_2 \leq \frac{1}{1-\lambda} (\|z-y\|_2 + \lambda\|x_1 - z_1\|_2) < \varepsilon$$

Also muss $z_2 \in \text{int } C$ gelten.

$$z = \lambda z_1 + (1-\lambda)z_2 \Rightarrow z \in C \Rightarrow D_{(1-\lambda)\varepsilon}(y) \subseteq C$$

Also muss $y \in \text{int } C$ gelten.

(iii) Seien $x_1, x_2 \in \bar{C}$, weiters sei $z \in \text{int } C$. Dann gilt für alle $\lambda \in]0, 1[$

$$\lambda x_2 + (1-\lambda)z \in \text{int } C.$$

Sei nun $\mu \in]0, 1[$ beliebig, dann gilt

$$\mu x_1 + (1-\mu)(\lambda x_2 + (1-\lambda)z) \in \text{int } C$$

Für $\lambda \rightarrow 1$ folgt

$$\mu x_1 + (1-\mu)x^2 \in \overline{\text{int } C} \subseteq \bar{C}$$

□

Definition 3.1.13. Sei $S \subseteq \mathbb{R}^m$ beliebig. Der Durchschnitt aller konvexen Mengen, die S enthalten, heißt die *konvexe Hülle* von S , bezeichnet mit $\text{ch}(S)$.

Theorem 3.1.14 (Καραθεοδωρής)

Sei C die konvexe Hülle von $S \subseteq \mathbb{R}^n$. Dann ist jeder Punkt von C eine Konvexkombination von höchstens $n+1$ Punkten aus S . Liegt der Punkt in $\partial C \cap C$, dann genügen höchstens n Punkte aus S .

Beweis. Die Menge $C = \text{ch}(S)$ ist konvex und enthält S . Aus 3.1.12 (i) folgt: C enthält C_0 , die Menge aller endlichen Konvexkombinationen von Elementen aus S . Außerdem gilt $S \subseteq C_0$ und C_0 ist konvex. Also folgt $C_0 \supseteq C$ und $C = C_0$.

Sei $x \in C$, dann gilt für $x_0, \dots, x_m \in S$

$$x = \sum_{k=0}^m \lambda_k x_k, \quad \lambda_i \geq 0, \quad \sum_{k=0}^m \lambda_k = 1$$

Sei

$$p := \begin{pmatrix} \lambda_0 \\ \vdots \\ \lambda_m \end{pmatrix}, \quad b := \begin{pmatrix} X \\ 1 \end{pmatrix}, \quad A := \begin{array}{c|ccc} x_0 & & & x_m \\ & \cdots & & \\ 1 & & & 1 \end{array},$$

dann folgt $Ap = b, p \geq 0$.

Nach 3.1.11 gibt es eine Lösung p , sodass die Spalten $A_{:,k}$ mit $p_k \neq 0$ linear abhängig sind (Jede solche Lösung ist eine Konvexkombination für x aus Elementen

3 Optimalitätsbedingungen

von S .) Die Matrix A hat $n + 1$ Zeilen, also ist jede Spalte von A ein Vektor aus \mathbb{R}^{n+1} . In \mathbb{R}^{n+1} gibt es höchstens $n + 1$ linear unabhängige Vektoren in einer Menge. Also existiert eine Konvexkombination aus höchstens $n + 1$ Elementen.

Sei $x \in \partial C \cap C$. Angenommen, n Elemente reichen nicht aus, d. h.

$$x = \sum_{k=0}^n p_k x_k, p_k > 0, \begin{pmatrix} x_k \\ 1 \end{pmatrix}$$

sind linear unabhängig. Also bilden $A_{:k}$ eine Basis des \mathbb{R}^{n+1} . Sei $\begin{pmatrix} q \\ 0 \end{pmatrix}$ mit $q \in \mathbb{R}^n$

beliebig, dann ist $\begin{pmatrix} q \\ 0 \end{pmatrix} = A\beta$ für $\beta = \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \vdots \\ \beta_n \end{pmatrix}$, d. h.

$$q = \sum_{k=0}^n x_k \beta_k, 0 = \sum_{k=0}^n \beta_k$$

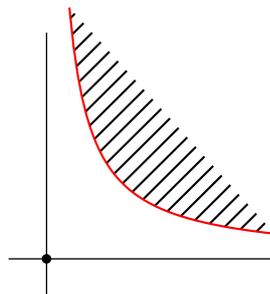
Daher gilt

$$x + \alpha q = \sum_{k=0}^n (p_k + \alpha \beta_k) x_k, \quad \sum_{k=0}^n (p_k + \alpha \beta_k) = 0$$

Wegen $p_k > 0$ gilt $p_k + \alpha \beta_k \geq 0$ für alle k , wenn $|\alpha|$ klein genug ist. Also ist $x + \alpha q \in C$ für α klein genug, d. h. $x \in \text{int } C$ – Widerspruch. \square

Bemerkung: Die konvexe Hülle einer abgeschlossenen Menge ist nicht unbedingt abgeschlossen.

Beispiel: Die Menge $Y = \{y \mid y = \frac{1}{x}\} \cup \{0\} \subseteq \mathbb{R}^2$ ist abgeschlossen, aber $\text{ch}(Y) = \{(x, y) \mid x > 0, y > 0\} \cup \{0\}$ ist nicht abgeschlossen.



Definition 3.1.15. Die *abgeschlossene konvexe Hülle* von S ist die kleinste abgeschlossene konvexe Menge, die S enthält, bezeichnet mit $\text{cch}(S)$ (also der Durchschnitt aller abgeschlossenen Mengen, die S enthalten).

Theorem 3.1.16

Die (abgeschlossene) konvexe Hülle einer kompakten Menge $S \subseteq \mathbb{R}^n$ ist kompakt.

Beweis.

1. Schritt: $\text{cch}(S) = \text{ch}(S)$

Sei $x \in \text{cch}(S)$, d. h. es gibt eine Folge x_k mit $x_k \in \text{cch}(S)$ und $\lim_{k \rightarrow \infty} x_k = x$.
Aus Theorem 3.1.14 folgt

$$x_k = \sum_{\ell=0}^n \lambda_{k\ell} y_{k\ell} \quad y_{k\ell} \in S$$

$$1 = \sum_{\ell=0}^n \lambda_{k\ell} \quad \lambda_{k\ell} \geq 0$$

Da S kompakt ist, gibt es eine Teilfolge $y_{k_{1\ell}}$, sodass $y_{k_{10}} \rightarrow \hat{y}_0$ konvergiert. Es gibt für $s \geq n$ eine Teilfolge $y_{k_{n\ell}}$ von $y_{k_{n-1\ell}}$, sodass $y_{k_{n0}} \rightarrow \hat{y}_s$ konvergiert.

Wir wählen eine Teilfolge y_{r_0} von $y_{k_{n\ell}}$, sodass $\lambda_{r_0\ell} \rightarrow \hat{\lambda}_0$ konvergieren und weitere Teilfolgen für $s \geq 0$ von $y_{r_{s-1\ell}}$, sodass $\lambda_{r_{s\ell}} \rightarrow \hat{\lambda}_s$ konvergiert. Dann gilt für diese Teilfolge r_n , dass

$$y_{r_n\ell} \rightarrow \hat{y}_\ell \quad \forall \ell \in \{0, \dots, n\}$$

$$\lambda_{r_n\ell} \rightarrow \hat{\lambda}_\ell \quad \forall \ell \in \{0, \dots, n\}$$

$$x = \lim_{r_n \rightarrow \infty} \sum_{\ell=0}^n \lambda_{r_n\ell} y_{r_n\ell} = \sum_{\ell=0}^n \hat{\lambda}_\ell \hat{y}_\ell$$

$$1 = \lim_{r_n \rightarrow \infty} \sum_{\ell=0}^n \lambda_{r_n\ell} = \sum_{\ell=0}^n \hat{\lambda}_\ell$$

Also gilt $x \in \text{ch}(S)$, d. h. $\text{ch}(S)$ ist abgeschlossen.

2. Schritt: $\text{ch}(S)$ ist beschränkt

Da S kompakt ist, gibt es $w \in \mathbb{R}$ sodass $\|y\| \leq w$ für alle $y \in S$ gilt. Sei $x \in \text{ch}(S)$, dann folgt

$$x \in \text{ch}(S) \Rightarrow x = \sum_{\ell=0}^n \lambda_\ell x_\ell \in S, \quad \sum_{\ell=0}^n \lambda_\ell = 1$$

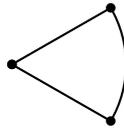
$$\|x\| = \left\| \sum_{\ell=0}^n \lambda_\ell x_\ell \right\| \leq \sum_{\ell=0}^n \lambda_\ell \underbrace{\|x_\ell\|}_{\leq w}$$

Also ist $\text{ch}(S)$ beschränkt, d. h. $\text{cch}(S) = \text{ch}(S)$.

□

Definition 3.1.17. Ein Punkt $z \in S$ einer konvexen Menge heißt *Extremalpunkt*, wenn aus $z \in \overline{xy}$ und $x, y \in S$ folgt, dass $z \in \{x, y\}$ ist.

3 Optimalitätsbedingungen



Proposition 3.1.18

Sei C konvex.

- (i) Ist die Funktion $-f$ unimodal in C (speziell, wenn f strikt konkav ist), dann ist jede (lokale) Lösung des folgenden Optimierungsproblems extrem in C :

$$\begin{aligned} \min f(x) \\ \text{s.t } x \in C \end{aligned}$$

- (ii) Ist f konkav in C , dann ist jeder Extrempunkt der Lösungsmenge $S(f, C)$ des folgenden Optimierungsproblems extrem in C :

$$\begin{aligned} \min f(x) \\ \text{s.t } x \in C \end{aligned}$$

Beweis.

- (i) Sei \hat{x} eine lokale Lösung, die nicht extremal in C ist. Dann gibt es $x, y \in C$ mit $\hat{x} = tx + (1-t)y, t \in]0, 1[, x \neq y$. Da \hat{x} lokale Lösung ist, gibt es t', t'' mit $0 < t' < t < t'' < 1$, sodass $f(\hat{x}) \leq f(x'), f(\hat{x}) \leq f(x'')$ mit $x' = t'x + (1-t')y, x'' = t''x + (1-t'')y$. Da $-f$ unimodal ist, gilt $\hat{x} \in \text{int } \overline{x'x''}$. Deshalb folgt $-f(\hat{x}) \leq \max(-f(x'), -f(x''))$ und $f(\hat{x}) > \min(f(x'), f(x''))$ – Widerspruch. Also ist \hat{x} extremal in C .

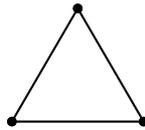
- (ii) Sei f konkav und \hat{x} extremal in $S(f, C)$. Angenommen, \hat{x} sei nicht extrem in C . Dann gibt es $x \neq y \in C$ und $t \in]0, 1[$ mit $\hat{x} = tx + (1-t)y$.

Da f konkav ist, gilt $f(\hat{x}) \geq tf(x) + (1-t)f(y) \geq \min(f(x), f(y))$. Da \hat{x} globale Lösung ist, gilt $f(\hat{x}) \leq \min(f(x), f(y))$. Also ist $f(\hat{x}) = \min(f(x), f(y))$, d. h. $f(\hat{x}) = f(x)$ oder $f(\hat{x}) = f(y)$. Damit folgt aber $x \in S(f, C)$ oder $y \in S(f, C)$. Sei o. B. d. A. $y \in S(f, C)$. Dann folgt $f(y) = f(\hat{x}) \geq tf(x) + (1-t)f(y)$, also $tf(y) \geq tf(x)$, weil $t \neq 0$ ist. Das heißt $x \in S(f, C)$ und $\hat{x} \in \text{int } \overline{xy}$ – Widerspruch dazu, dass \hat{x} extremal in $S(f, C)$ ist.

□

Theorem 3.1.19 (Satz von Krein-Milmann)

- (i) Sei $C \subseteq \mathbb{R}^n$ konvex, abgeschlossen und nicht leer. Weiters existiere $u \in \mathbb{R}^n$, sodass $x \geq u$ für alle $x \in C$ gilt. Dann enthält C mindestens einen Extrempunkt.
- (ii) Jede kompakte konvexe Menge $C \subseteq \mathbb{R}^n$ ist die abgeschlossene konvexe Hülle ihrer Extrempunkte.



Bemerkung: Aussage (ii) gilt in jedem lokalkonvexen Vektorraum. In \mathbb{R}^n kann man abgeschlossen weglassen.

Beweis.

- (i) Ist $u \in C$, dann ist u extremal.

Sei $u \notin C$. Nach dem Separationssatz existieren $p \in \mathbb{R}^n$ und $\hat{x} \in C$ mit $p^\top u < p^\top \hat{x} \leq p^\top x$ für alle $x \in C$.

Sei $M := \{x \in C \mid p^\top x = p^\top \hat{x}\}$. Für $n = 1$ ist alles klar (konvexe Mengen sind dann Intervalle und Extrempunkte die endlichen Intervallgrenzen). Für $n > 1$ gibt es $i \in \{1, \dots, n\}$ mit $p_i \neq 0$.

$$\bar{C} := \left\{ x \in \mathbb{R}^{n-1} \mid \exists y \in \mathbb{R}: (x_1, \dots, x_{i-1}, y, x_i, \dots, x_n)^\top \in M \right\}$$

Die Menge \bar{C} ist konvex, weil M konvex ist, und abgeschlossen, weil $\bar{C} = \text{pr}_{\mathbb{R}^{n-1}} M$ als Projektion einer abgeschlossenen Menge abgeschlossen ist.

Induktion liefert, dass \bar{C} einen Extrempunkt \bar{x} enthält. Sei \bar{x} jener Punkt in M mit

$$y = \frac{1}{p_i} \cdot \left(p^\top \bar{x} - \sum_{\substack{j=1 \\ i \neq j}}^n p_{ij} \bar{x}_j \right)$$

Wir zeigen, dass \bar{x} extremal in M ist. Dazu betrachten wir das Optimierungsproblem

$$(*) \quad \begin{array}{ll} \min & p^\top x \\ \text{s.t.} & x \in C \end{array}$$

3 Optimalitätsbedingungen

Sei $z_1, z_2 \in M$ mit $\bar{x} \in \overline{z_1 z_2}$ und sei $\varphi: M \rightarrow \bar{C}$ bijektiv.

$$\begin{aligned} \varphi(\bar{x}) &\in \overline{\varphi(z_1)\varphi(z_2)}, \varphi(\bar{x}) = \bar{x} \\ \Rightarrow \varphi(\bar{x}) &= \varphi(z_1) \text{ oder } \varphi(\bar{x}) = \varphi(z_2) \\ \Rightarrow \bar{x} &= z_1 \text{ oder } \bar{x} = z_2 \end{aligned}$$

Wegen $\bar{x} \in M$ gilt $p^\top \bar{x} = p^\top \hat{x}$, und wegen $\bar{x} \in C$ ist \bar{x} ein globales Optimum des Problems (*). Die Zielfunktion von (*) ist linear, also auch konkav. Aus 3.1.18 (ii) folgt mit $M = S(p^\top x, C)$, dass \bar{x} extremal in C ist.

- (ii) Sei o. B. d. A. $C \neq \emptyset$ und C_0 sei die abgeschlossene konvexe Hülle der Extrempunkte von C . Da C konvex und abgeschlossen ist, gilt $C_0 \subseteq C$. Da C kompakt ist, ist C auch beschränkt, d. h. es gibt u wie in (ii). Also gibt es einen Extrempunkt von C und $C_0 \neq \emptyset$. Angenommen, $C_0 \neq C$, dann gibt es $z \in C$ mit $z \notin C_0$. Nach dem Separationssatz existiert $p \in \mathbb{R}^n$ mit $p \neq 0$ und $\hat{x} \in C_0$, sodass $p^\top z < p^\top \hat{x} \leq p^\top x$ für alle $x \in C_0$ gilt. Wir betrachten das Optimierungsproblem

$$\begin{aligned} \min p^\top x \\ \text{s.t. } x \in C \end{aligned}$$

Es gibt mindestens eine Lösung, weil $p^\top x$ stetig und C kompakt ist. Sei $M = S(p^\top x, C)$. Da M beschränkt, nicht leer und konvex ist, gibt es einen Extrempunkt \bar{x} in M , der auch extremal in C ist, d. h. $\bar{x} \in C_0$ und $p^\top \bar{x} \leq p^\top x$ für alle $x \in C$. wegen $z \in C$ muss jedoch $p^\top \bar{x} \geq p^\top \hat{x} > p^\top z$ gelten – Widerspruch. Also ist $C_0 = C$.

□

Theorem 3.1.20

Ist f stetig und quasikonvex auf der kompakten, konvexen Menge $C \subseteq \mathbb{R}^n$, dann hat das Optimierungsproblem

$$\begin{aligned} (*) \quad \min f(x) \\ \text{s.t. } x \in C \end{aligned}$$

eine globale Lösung, die extremal in C ist.

Beweis. Da C kompakt ist, hat (*) eine globale Lösung \hat{x} . Nach Krein-Milman ist C die abgeschlossene konvexe Hülle der Extrempunkte. Nach dem Satz von Carathéodory ist $\hat{x} = \sum_{i=1}^n \lambda_i x_i$ mit $x_i \in C$, $\lambda_i \geq 0$, $\sum_{i=1}^n \lambda_i = 1$, und die x_i sind auch Extrempunkte von C .

Da f quasikonkav ist, gilt $f(\hat{x}) \geq \min(f(x_0), \dots, f(x_n))$ und $f(\hat{x}) \leq f(z)$ für alle $z \in C$. Also gibt es ein i mit $f(\hat{x}) = f(x_i)$, d. h. x_i ist auch globale Lösung und extremal in C . □

Theorem 3.1.21

- (i) Ein Punkt x im Polyeder $C = \{x \in \mathbb{R}^n \mid Ax \geq b\}$ ist extremal genau dann, wenn die Matrix A_J : mit $J = \{i \mid (Ax)_i = b_i\}$ Rang n hat ($A \in \mathbb{R}^{m \times n}$).
- (ii) Ein Polyeder hat höchstens endlich viele Extrempunkte. Diese werden Ecken des Polyeders genannt.

Beweis.

- (i) Seien $y, z \in C \setminus \{x\}$ mit $x \in \overline{yz}$. Dann gilt $x = ty + (1-t)z$ für ein $t \in]0, 1[$.

$$\begin{aligned} 0 &\leq t(Ay - b)_i + (1-t)(Az - b)_i = (Ax - b)_i = 0 \quad i \in J \\ &\Rightarrow (Ay - b)_i = 0 \text{ und } (Az - b)_i = 0 \text{ für } i \in J \\ &\Rightarrow (Ay)_i = (Az)_i = (Ax)_i = b_i \text{ für } i \in J \\ &\Rightarrow A_J y = A_J z = A_J x = b_j \end{aligned}$$

Hat A_J : Rang n , so folgt daraus $x = y = z$, also ist x extremal, wenn $\text{rk } A_J = n$ ist.

Gilt andererseits, dass A_J : nicht rang n hat, dann existiert $w \neq 0$ mit $A_J w = 0$. Wir betrachten $x \pm \varepsilon \cdot w$

$$(A(x \pm \varepsilon w))_i = (Ax)_i = (Ax)_i + \varepsilon \cdot (Aw)_i \begin{cases} = b_i & i \in J \\ \geq b_i & i \notin J, \varepsilon \text{ klein genug} \end{cases}$$

Also ist $x \pm \varepsilon w \in C$ und $x \in \overline{(x - \varepsilon w)(x + \varepsilon w)}$, d. h. x ist nicht extremal.

- (ii) Jeder Extrempunkt von C erfüllt eine Gleichung der Form $A_J x = b_j$ für eine Indexmenge J , sodass A_J : Rang n hat. Jede dieser Gleichungen hat aber höchstens eine Lösung. Aus $\{1, \dots, m\}$ kann man aber höchstens endlich viele Indexmengen auswählen.

□

Korollar

Ein lineares Optimierungsproblem hat stets eine globale Lösung in einer Ecke des zulässigen Bereichs, falls dieser nicht leer und beschränkt ist.

Theorem 3.1.22

- (i) Ist $C \subseteq \mathbb{R}^n$ ein Polyeder, dann ist jedes affine Bild von $C' = \{Bx + b \mid x \in C\}$ ebenfalls ein Polyeder.

3 Optimalitätsbedingungen

- (ii) Eine Menge ist genau dann ein Polytop (affine Hülle einer endlichen Menge), wenn sie ein kompakter Polyeder ist.

Beweis.

- (i) Sei $C_{n+1} \subseteq \mathbb{R}^{n+1}$ ein Polyeder. Wir zeigen, dass für

$$\pi_n : \mathbb{R}^{n+1} \rightarrow \mathbb{R}^n, \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_{n+1} \end{pmatrix} \mapsto \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}$$

die Menge $\pi_n(C_{n+1})$ ein Polyeder ist.

Fourier-Motzkin-Elimination:

$$C_{n+1} = \left\{ \begin{pmatrix} x \\ \xi \end{pmatrix} \mid x \in \mathbb{R}^n, \xi \in \mathbb{R}, Ax + a\xi \geq d \right\}$$

Es gilt o. B. d. A. $a_i \in \{-1, 0, 1\}$ für alle i , $I := \{i \mid a_i = 1\}$, $J := \{i \mid a_i = 0\}$, $K := \{i \mid a_i = -1\}$. Für welche $x \in \mathbb{R}^n$ existiert ein ξ , sodass $\begin{pmatrix} x \\ \xi \end{pmatrix} \in C_{n+1}$ gilt?

Das ist dann der Fall, wenn

$$x \in C_n := \{x \mid A_J x \geq d_J, (A_K x - d_K) \geq (-A_i x + d_i) \quad \forall k \in K, \forall i \in I\}$$

$$\begin{aligned} Ax - d &\geq -a\xi \\ A_k x - d_k &\geq \xi \geq -A_i x + d_i \\ A_i x - d_i &\geq -\xi \\ &\Rightarrow \xi \geq -A_i x + d_i \end{aligned}$$

Offensichtlich ist C_n ein Polyeder. Sei

$$C' := \{y \in \mathbb{R}^m \mid Ax \geq d, y = Bx + b, x \in \mathbb{R}^n\}$$

(Das ist das affine Bild von C für $C = \{x \in \mathbb{R}^n \mid Ax \geq d\}$.) Wir betrachten

$$C'' := \left\{ \begin{pmatrix} y \\ x \end{pmatrix} \mid Ax \geq d, y = Bx + b \right\}$$

Offensichtlich ist C'' ein Polyeder. C' ist die Projektion von C'' auf die ersten m Komponenten. Wegen Induktion und F-M-Elimination folgt, dass auch C' ein Polyeder ist.

3.2 Optima ohne Nebenbedingungen (im Inneren)

- (ii) Ist C ein kompakter Polyeder, so besitzt C endlich viele Ecken (Theorem 3.1.21). Außerdem ist C die konvexe Hülle aller Extrempunkte (Theorem 3.1.19, 3.1.16). Folglich ist C ein Polytop.

Sei C ein Polytop. Sei A die Matrix, deren Spalten aus den endlich vielen Punkten gebildet wird, die C konvex erzeugen. Dann ist

$$C = \{Ax \mid x \geq 0, e^\top x = 1\}$$

(d. h. die Menge aller Konvexkombinationen). Die Menge C ist als affines Bild eines Polyeders wegen (i) wieder ein Polyeder. Kompaktheit folgt aus Theorem 3.1.16.

□

3.2 Optima ohne Nebenbedingungen (im Inneren)

Theorem 3.2.1 (Unrestringierte Optimalitätsbedingungen)

- (i) Sei $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ eine C^1 -Funktion. Ist $\hat{x} \in \mathbb{R}^n$ ein lokales Optimum von f , dann gilt $g(\hat{x}) = 0$.
- (ii) Ist f sogar C^2 und \hat{x} ein lokales Optimum, dann ist $G(\hat{x})$ positiv semidefinit, falls \hat{x} ein Minimum ist, und negativ semidefinit, falls \hat{x} ein Maximum ist.
- (iii) Ist f eine C^2 -Funktion und $\hat{x} \in \mathbb{R}^n$ mit $g(\hat{x}) = 0$ und gilt $G(\hat{x})$ ist positiv (negativ) definit, so ist \hat{x} ein Minimum (Maximum).

Beweis.

- (i) Sei $f_k(y) := f(\hat{x}_1, \dots, \hat{x}_{k-1}, y, \hat{x}_{k+1}, \dots, \hat{x}_n)$. Da \hat{x} lokales Extremum von f ist, ist \hat{x}_k lokales Extremum von f_k . Daher gilt $f'_k(\hat{x}_k) = 0$. Wegen $f'_k(\hat{x}_k) = \frac{\partial f}{\partial x_k}(\hat{x})$ ist $g(\hat{x}) = 0$.
- (ii) Der Satz von Taylor besagt, dass

$$(*) \quad \frac{f(\hat{x} + h) - f(\hat{x})}{\|h\|^2} = \frac{1}{2} \left(\frac{h}{\|h\|} \right)^\top G(\hat{x}) \left(\frac{h}{\|h\|} \right) + R(h) \quad (\lim_{h \rightarrow 0} R(h) = 0)$$

Falls $G(\hat{x})$ positiv definit ist, folgt, dass $\frac{h}{\|h\|} \in S^{n-1}$, wobei S^{n-1} die kompakte Einheitssphäre im \mathbb{R}^n ist. daher nimmt $\frac{1}{2}w^\top G(\hat{x})w$ für $w \in S^{n-1}$ ein Minimum an. Sei ν dieser Wert. Es gilt $\nu > 0$. Sei h so klein, dass $|R(h)| < \frac{\nu}{2}$. Dann folgt aus (*), dass $f(\hat{x} + h) > f(\hat{x})$ ist. Also ist \hat{x} lokales Minimum. Für Maximum betrachte $-f$.

3 Optimalitätsbedingungen

- (iii) Ist $G(\hat{x})$ nicht positiv semidefinit, dann existiert ein y mit $y^\top G(\hat{x})y < 0$, $\|y\| = 1$. Für beliebiges $\lambda \neq 0$ folgt

$$\left(\frac{\lambda y}{\|\lambda y\|}\right)^\top G(\hat{x}) \left(\frac{\lambda y}{\|\lambda y\|}\right) = y^\top G(\hat{x})y = \alpha < 0$$

Sei λ so klein, dass $|R(\lambda y)| < \frac{\alpha}{2}$ ist. Dann folgt aus (*), dass $f(\hat{x} + \lambda y) < f(\hat{x})$ – Widerspruch dazu, dass \hat{x} ein lokales Minimum ist.

□

Bemerkung:

- (i) Die \hat{x} mit $g(\hat{x}) = 0$ heißen *kritische Punkte* von f .
- (ii) Eine C^1 -Funktion f heißt *gleichmäßig konvex* in C , falls ein $\alpha > 0$ existiert mit

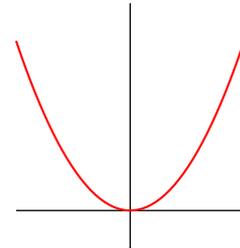
$$f(y) - f(x) - g(x)^\top (y - x) \geq \alpha \|y - x\|_2^2$$

Für solche Funktionen ist \hat{x} genau dann ein Minimum, wenn $g(\hat{x}) = 0$ gilt.

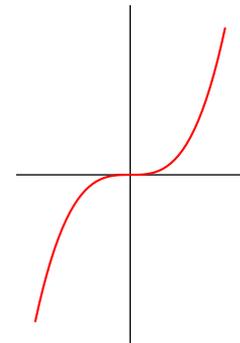
Definition 3.2.2. Sei f eine C^1 -Funktion und $g(\hat{x}) = 0$, und es gebe eine Umgebung U von \hat{x} , sodass $f|_U$ gleichmäßig konvex ist. Dann ist \hat{x} ein lokales Minimum, und wir nennen ein solches \hat{x} ein *nicht degeneriertes* oder *starkes Minimum* von f .

Beispiele

- $f: x \mapsto x^2$
 $f'(0) = 0$
 $f''(0) > 0$
 Die hinreichenden Optimalitätsbedingungen gelten.



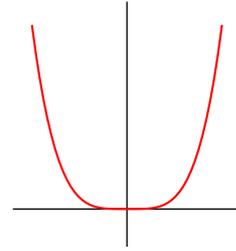
- $\hat{f}: x \mapsto x^3$
 $\hat{f}'(0) = 0$
 $\hat{f}''(0) > 0$
 Die notwendigen Optimalitätsbedingungen 2. Ordnung sind erfüllt, \hat{f} hat bei 0 aber kein Minimum, weil $\hat{f}'''(0) \neq 0$ ist.



3.2 Optima ohne Nebenbedingungen (im Inneren)

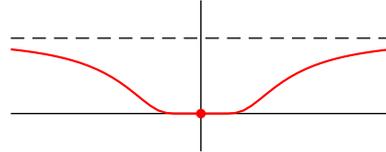
- $\hat{f}: x \mapsto x^4$
 $\hat{f}'(0) = 0$
 $\hat{f}''(0) = 0$

Die Funktion hat aber bei 0 ein lokales Minimum, das die hinreichenden Optimalitätsbedingungen 2. Ordnung nicht erfüllt.

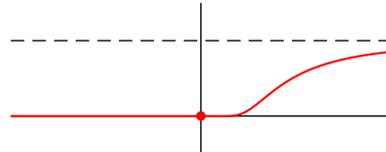


- $h: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$
 $h(x) = \begin{cases} e^{-\frac{1}{x^2}} & x \neq 0 \\ 0 & x = 0 \end{cases}$

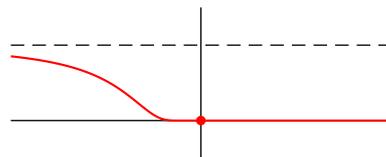
Die Funktion h ist C^∞ und es gilt $h^{(n)}(0) = 0 \quad \forall n$, also ist h glatt bei 0.



- $\tilde{h}(x) = \begin{cases} e^{-\frac{1}{x^2}} & x > 0 \\ 0 & x \leq 0 \end{cases}$
 Auch \tilde{h} ist C^∞ .



- $\tilde{\tilde{h}}(x) = \begin{cases} e^{\frac{1}{x^2}} & x > 0 \\ 0 & x \leq 0 \\ e^{-\frac{1}{x^2}} & x < 0 \end{cases}$

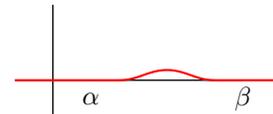


Auch $\tilde{\tilde{h}}$ ist C^∞ .

Sowohl h als auch $\tilde{\tilde{h}}$ erfüllen alle notwendigen Optimalitätsbedingungen (jeder Ordnung), h hat bei 0 ein lokales Minimum, $\tilde{\tilde{h}}$ nicht.

- $\tilde{k}(x) = \begin{cases} 0 & x \geq 0 \\ e^{-\frac{1}{x^2}} & x < 0 \end{cases}$

- $k_{\alpha,\beta}(x) = \tilde{k}(\alpha-\beta)\tilde{k}(x-\alpha)$ für $\beta > \alpha$
 Auch $k_{\alpha,\beta}$ ist C^∞ und hat kompakten Träger.



3.3 Optima mit Nebenbedingungen

Theorem 3.3.1 (Lagrangesche Multiplikatoren)

Sei $U \subseteq \mathbb{R}^n$ offen, $f: U \rightarrow \mathbb{R}, F: U \rightarrow \mathbb{R}^m$ seien C^1 . Weiters sei \hat{x} lokales Minimum des Optimierungsproblems

$$\begin{aligned} \min f(x) \\ \text{s.t. } F(x) = 0 \end{aligned}$$

Gilt $\text{rk}(F'(\hat{x})) = m$ (dann muss $m \geq n$ sein!), so gibt es einen Vektor $\hat{y} \in \mathbb{R}^m$ mit

$$g(\hat{x}) + F'(\hat{x})^\top \hat{y} = 0$$

Die \hat{y} heißen *Lagrangesche Multiplikatoren*.

Beweis. Da \hat{x} lokales Minimum ist, muss $F(\hat{x}) = 0$ gelten. F' ist stetig und $F'(\hat{x})$ hat maximalen Rang. Wir teilen $x = (s, t)$ so, dass wir in einer Umgebung von \hat{x} die variable s durch t ausdrücken können, d. h. $s = h(t)$, sodass $F(h(t), t) = 0 \quad \forall t$. Wir setzen $\varphi(t) := f(h(t), t)$ und erhalten

$$\nabla f(\hat{t}) = \frac{\partial f(\hat{x})}{\partial s} \nabla h(\hat{t}) + \frac{\partial f(\hat{x})}{\partial t} = 0,$$

weil \hat{x} ein lokales Minimum ist (Theorem ??).

$$\frac{\partial F(\hat{x})}{\partial s} \nabla h(\hat{t}) + \frac{\partial F(\hat{x})}{\partial t} = 0 \Rightarrow \nabla h(\hat{t}) = - \left(\frac{\partial F(\hat{x})}{\partial s} \right)^{-1} \cdot \frac{\partial F(\hat{x})}{\partial t}$$

Also gilt

$$(*) \quad \nabla \varphi(\hat{t}) = - \frac{\partial f(\hat{x})}{\partial s} \left(\frac{\partial F(\hat{x})}{\partial s} \right)^{-1} \cdot \frac{\partial F(\hat{x})}{\partial t} + \frac{\partial f(\hat{x})}{\partial t} = 0$$

Wir setzen

$$\hat{y}^\top := - \frac{\partial f(\hat{x})}{\partial s} \left(\frac{\partial F(\hat{x})}{\partial s} \right)^{-1}$$

Wegen (*) gilt dann

$$\frac{\partial F(\hat{x})}{\partial s}^\top \hat{y} + \frac{\partial f(\hat{x})}{\partial s}^\top = 0$$

und wegen der Definition von \hat{y} ist

$$\frac{\partial F(\hat{x})}{\partial t}^\top \hat{y} + \frac{\partial f(\hat{x})}{\partial t}^\top = 0$$

Also folgt

$$g(\hat{x}) + F'(\hat{x})^\top \hat{y} = 0$$

□

Bemerkung: Die Bedingung $\text{rk } F'(\hat{x}) = m$ ist eine Forderung an die Nebenbedingung. Solche Forderungen nennt man auch *Constraint qualification*. Sind sie nicht erfüllt, d.h. $\text{rk } F'(\hat{x}) < m$, dann gibt es ein \hat{y} mit $F'(\hat{x})^\top \hat{y} = 0$ und $\hat{y} \neq 0$, d.h. $0 \cdot g(\hat{x}) + F'(\hat{x})^\top \hat{y} = 0$

Korollar 3.3.2 (Lagrangesche Multiplikatorregel ohne CQ)

Sei $U \subseteq \mathbb{R}^n$ offen, $f: U \rightarrow \mathbb{R}$, $F: U \rightarrow \mathbb{R}^r$ seien C^1 . Weiters sei \hat{x} lokal inimal für

$$\begin{aligned} \min f(x) \\ \text{s.t. } F(x) = 0 \end{aligned}$$

Dann gibt es $\kappa \geq 0$ und $\hat{y} \in \mathbb{R}^r$, nicht beide gleich 0, mit

$$\kappa g(\hat{x}) + F'(\hat{x})^\top \hat{y} = 0$$

Beweis.

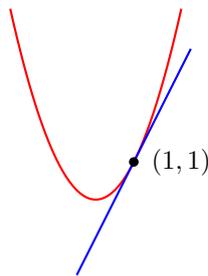
Fall 1: $\text{rk } F'(\hat{x}) = m$, dann ist $\kappa = 1$ und \hat{y} wie im Theorem

Fall 2: $\text{rk } F'(\hat{x}) < m$, dann ist $\kappa = 0$ und \hat{y} wie in der Bemerkung vor dem Korollar

□

Beispiel

$$\begin{aligned} \min ax + by \quad a, b \in \mathbb{R} \\ \text{s.t. } x^2 - y = 0 \\ 2x - y - 1 = 0 \\ \mathcal{F} = \{(1, 1)\} \end{aligned}$$



$f(1, 1) = a + b$ und $(1, 1)$ ist lokales Minimum

$$F'(1, 1) = \begin{pmatrix} 2 & -1 \\ 2 & -1 \end{pmatrix}, \quad \text{rk } F'(1, 1) = 1 < 2, \quad g(1, 1) = \begin{pmatrix} a & b \\ a & b \end{pmatrix}$$

3 Optimalitätsbedingungen

Gälte $g(\hat{x}) + F'(\hat{x})^\top \hat{y} = 0$, dann würde folgen

$$\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 2 & -1 \\ 2 & -1 \end{pmatrix}^\top \cdot \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{cases} a = -2(y_1 + y_2) \\ b = y_1 + y_2 \end{cases}$$

Das lässt sich nur dann nach (y_1, y_2) lösen, wenn $a = -2b$ ist, d. h. nur in einem speziellen Fall der Zielfunktion gilt die Lagrangesche Multiplikatorenregel. Mit $\kappa = 0$ ist z. B. $\hat{y} = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$ ein Multiplikator.

Nehmen wir an, dass die CQ gelten. Dann muss ein lokales Minimum \hat{x} erfüllen

$$\begin{aligned} F(\hat{x}) &= 0 \\ g(\hat{x}) + F'(\hat{x})^\top \hat{y} &= 0 \quad \text{für ein } \hat{y} \end{aligned}$$

$L(x, y) := f(x) + y^\top \cdot F(x) \dots$ Lagrange-Funktion

$$\nabla L(x, y) = \begin{pmatrix} g(x) + F'(x)^\top y \\ F(x) \end{pmatrix}$$

Das \hat{x} lokales Minimum (mit QF) ist, impliziert die Existenz von \hat{y} mit $\nabla L(\hat{x}, \hat{y}) = 0$. Also ist (\hat{x}, \hat{y}) ein kritischer Punkt von L . Im Allgemeinen ist (\hat{x}, \hat{y}) kein Maximum oder Minimum, sondern oft ein Sattelpunkt (im konvexen Fall immer), z. B.

$$\begin{aligned} \min & 100x^2 \\ \text{s.t. } & x^2 = 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} L(x, y) &= 100x^2 + yx^2 = (100 + y)x^2 \\ \nabla L(x, y) &= \begin{pmatrix} 2x(100 + y) \\ x^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

$$(x, y) = (0, 0) \Rightarrow x = 0, y \text{ beliebig} \Rightarrow L(0, 0) = 0$$

$$L(\varepsilon, \delta) = (100 + \delta) \cdot \varepsilon^2 \geq 0 \Rightarrow (0, 0) \text{ ist Minimum}$$

$$(x, y) = (0, -100) \Rightarrow L(0, -100) = 0$$

$$L(\varepsilon, \delta - 100) = \delta \cdot \varepsilon^2 \Rightarrow (0, -100) \text{ ist Sattelpunkt}$$

$$(x, y) = (0, -200) \Rightarrow L(0, -200) = 0$$

$$L(\varepsilon, \delta - 200) = (\delta - 100) \cdot \varepsilon^2 \leq 0 \Rightarrow (0, -200) \text{ ist lokales Maximum}$$

Im Folgenden sei mit $\nabla_x L(x, y)$ der Teil des Gradienten bezeichnet, der nach x abgeleitet entsteht. Dieser wird auch *reduzierter Gradient* von L genannt.

Theorem 3.3.3 (Optimalitätsbedingungen 1. Ordnung für lineare Nebenbedingungen)

Ist die Funktion f auf dem Polyeder $C := \{x \in \mathbb{R}^n \mid Ax \geq 0\}$ mit $A \in \mathbb{R}^{m \times n}, b \in \mathbb{R}^m$ eine C^1 -Funktion, dann gilt:

- (i) Ist \hat{x} eine lokale Lösung des Optimierungsproblems

$$\begin{aligned} \min f(x) \\ \text{s.t. } Ax \geq b, \end{aligned}$$

dann existiert $\hat{y} \in \mathbb{R}^m$ mit

$$\begin{aligned} g(\hat{x}) &= A^\top \hat{y} \\ \inf(\hat{y}, A\hat{x} - b) &= 0 \end{aligned}$$

- (ii) Ist f konvex in C , dann ist jeder Punkt x , für den ein \hat{y} wie in (i) existiert, globale Lösung des Optimierungsproblems.

Beweis.

- (i) Sei p gegeben mit $Ap \geq 0$. Wir setzen $z := \hat{x} + p$. Dann gilt

$$Az = A\hat{x} + Ap \geq b \Rightarrow z \in C \Rightarrow g(\hat{x})^\top (z - \hat{x}) = g(\hat{x})^\top p \geq 0$$

Also existiert kein p mit $Ap \geq 0$ und $g(\hat{x})^\top p < 0$. Also existiert nach dem Lemma von Farkas ein \hat{y} mit $A^\top \hat{y} = g(\hat{x})$ und $\hat{y} \geq 0$.

Der Rest von (i) folgt aus 3.1.10 (polarer Kegel).

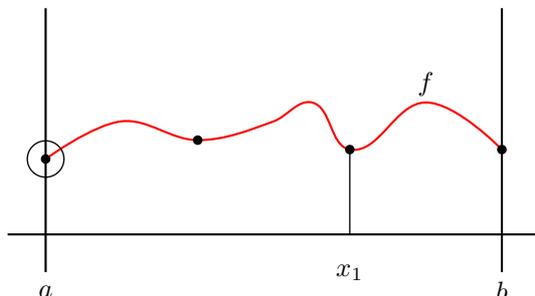
- (ii) Ist f konvex, dann folgt aus (i), dass

$$g(\hat{x})^\top \cdot (x - \hat{x}) \geq 0 \quad \forall x \in C$$

Also ist \hat{x} globale Lösung des Optimierungsproblems. □

Beispiel

$$\begin{aligned} \min f(x) \quad f: \searrow \rightarrow \mathbb{R} \\ \text{s.t. } x \in [a, b] \end{aligned}$$



$$\begin{aligned} f'(x_1) &= 0 \\ f'(a) &\geq 0 \\ f'(b) &\leq 0 \end{aligned}$$

3 Optimalitätsbedingungen

Äquivalentes Optimierungsproblem:

$$\begin{aligned} \min f(x) \\ \text{s.t. } \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} x \geq \begin{pmatrix} a \\ -b \end{pmatrix} \end{aligned}$$

$$\Rightarrow g(\hat{x}) = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}^\top \begin{pmatrix} \hat{y}_1 \\ \hat{y}_2 \end{pmatrix} - \hat{y}_1 + \hat{y}_2$$

$$\begin{aligned} \hat{y}_1, \hat{y}_2 &\geq 0 \\ \hat{y}_1(x - a) &= 0 \\ \hat{y}_2(-x + b) &= 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \hat{x} \in]a, b[&\Rightarrow \hat{y}_1 = \hat{y}_2 \Rightarrow g(\hat{x}) = f'(\hat{x}) = 0 \\ \hat{x} = a &\Rightarrow \hat{y}_2 = 0, \hat{y}_1 \geq 0 \Rightarrow g(a) = f'(a) = \hat{y}_1 \geq 0 \\ \hat{x} = b &\Rightarrow \hat{y}_1 = 0, \hat{y}_2 \geq 0 \Rightarrow g(b) = f'(b) = -\hat{y}_2 \leq 0 \end{aligned}$$

3.4 Dualität

$$\begin{aligned} \min f(x) \\ \text{(OI) s.t. } F(x) \geq 0 \\ x \in C \end{aligned}$$

Es sind $f, F \in C^1$ konvex und C konvex. Wir betrachten daher die Lagrange-Funktion

$$L(x, y) = f(x) + y^\top F(x)$$

Die zulässige Menge

$$\mathcal{F} := \{x \in C \mid F(x) \geq 0\}$$

ist konvex, und jedes Minimum ist ein globales.

Proposition 3.4.1

Gibt es für das Problem (OI) einen Punkt $x \in C$ und ein $y \geq 0 \in \mathbb{R}^m$ mit $g(x) + F'(x)^\top y = 0$, dann gilt

$$\min\{f(t) \mid t \in \mathcal{F}\} \geq L(x, y)$$

Beweis. Sei $z \in \mathcal{F}$. Dann gilt

$$\begin{aligned} f(z) - f(x) &\geq g(x)^\top(z - x) = -y^\top F'(x)(z - x) \geq -(y^\top F(z) - y^\top F(x)) \geq y^\top F(x) \\ \Rightarrow f(z) &\geq f(x) + y^\top F(x) = L(x, y) \end{aligned}$$

□

Wir konstruieren das Optimierungsproblem

$$\begin{aligned} &\max L(x, y) \\ \text{(OD)} \quad &\text{s.t. } g(x) + F'(x)^\top y = 0 \\ &x \in C, y \geq 0 \end{aligned}$$

und nennen es das zu (OI) *duale Optimierungsproblem*.

Sei (\bar{x}, \bar{y}) eine Lösung von (OD) und \hat{x} eine Lösung von (OI). Dann gilt $L(\bar{x}, \bar{y}) \leq f(\hat{x})$. Wir definieren $\Delta := f(\hat{x}) - L(\bar{x}, \bar{y})$, die *Dualitätslücke* von (OI) und (OD). Gilt $\Delta = 0$, dann ist $\bar{x} = \hat{x}$ und es gibt $\hat{y} = y$ mit

$$(**) \quad g(\hat{x}) + F'(\hat{x})^\top \hat{y} = 0$$

Außerdem wissen wir, dass

$$\begin{aligned} L(\hat{x}, \hat{y}) &= f(\hat{x}) + \hat{y}^\top F(\hat{x}) \\ &= f(\hat{x}) \end{aligned}$$

$$\iff \hat{y}^\top F(\hat{x}) = 0$$

$$(*) \quad \iff \inf(\hat{y}, -F(\hat{x})) = 0$$

Wenn wir einen Punkt finden, der (*) und (**) erfüllt, dann ist er optimale Lösung von (OI) und (OD). Ist $\Delta = 0$, dann kann man die Lösung eines Optimierungsproblems finden, indem man Gleichungen löst.

Theorem 3.4.2 (Hinreichende Optimalitätsbedingungen für konvexe Probleme)

Sei $C \subseteq \mathbb{R}^n$ konvex, $f: C \rightarrow \mathbb{R}, F: C \rightarrow \mathbb{R}^m$ seien konvexe C^1 -Funktionen. Gibt es $\hat{x} \in C$ und $\hat{y} \in \mathbb{R}^m$ mit

$$\begin{aligned} g(\hat{x}) + F'(\hat{x})^\top \hat{y} &= 0 \\ \inf(\hat{y}, -F(\hat{x})) &= 0, \end{aligned}$$

dann ist \hat{x} globale Lösung von (OI) und (\hat{x}, \hat{y}) globale Lösung von (OD) und die Dualitätslücke $\Delta = 0$.

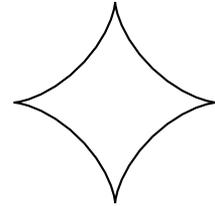
Beweis. Folgt aus der Diskussion und der Konvexität von f und F . □

3.5 Karush-Kuhn-Tucker-Bedingungen

Theorem 3.5.1 (Allgemeine Optimalitätsbedingungen 1. Ordnung für konkave Nebenbedingungen)

Sei \hat{x} eine (lokale) Lösung des Optimierungsproblems

$$\begin{aligned} \min f(x) \\ \text{s.t. } Ax \geq b \\ F(x) \geq 0 \end{aligned}$$



mit $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $b \in \mathbb{R}^m$ und $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, $F: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^r$ beide C^1 auf $C_0 := \{x \in \mathbb{R}^n \mid Ax \geq b\}$. Ist F konvex, dann existiert $\hat{y} \in \mathbb{R}^m$ und $\hat{z} \in \mathbb{R}$ mit

$$\begin{aligned} g(\hat{x}) &= A^\top \hat{y} + F'(\hat{x})^\top \hat{z} \\ \inf(\hat{y}, A\hat{x} - b) &= 0 \\ \inf(\hat{z}, F(\hat{x})) &= 0 \end{aligned}$$

Diese drei Gleichungen werden *Karush-Kuhn-Tucker-Bedingungen* genannt.

Beweis. Sei F konvex, x ein zulässiger Punkt, $g := g(x)$. Es sei $p \in \mathbb{R}^n$, sodass

$$\begin{aligned} g^\top p &< 0 \\ (Ap)_J &\geq 0 \quad J := \{i \in \{1, \dots, m\} \mid (Ax)_i = b_i\} \\ (F'(x))_K &\geq 0 \quad K := \{i \in \{1, \dots, n\} \mid F(x)_i = 0\} \end{aligned}$$

Sei $\alpha > 0$ klein genug, dann gilt

$$A(x + \alpha p) = Ax + \alpha Ap \geq b$$

$$F(x + \alpha p) \geq F(x) + \alpha F'(x)p \geq 0$$

1. Fall: $F_i(x) > 0, \alpha \geq \frac{F_i(x)}{|F'(x)p_i|}$

2. Fall: $F_i(x) = 0 \Rightarrow (F'(x)p)_i \geq 0$

Also ist $x + \alpha p$ zulässig, wenn α klein genug ist.

$$f(x + \alpha p) = f(x) + \alpha g^\top p + o(\alpha) < f(x) \quad \text{für } \alpha \text{ klein genug}$$

Folglich kann x kein lokales Minimum sein.

Ist x' lokales Minimum, dann kann es kein solches p geben. Aus dem Lemma von Farkas folgt: Es existiert ein Vektor

$$q = \begin{pmatrix} \tilde{y}_J \\ \tilde{z}_K \end{pmatrix} \quad \text{mit } g = A_J^\top \tilde{y}_J + F'(\hat{x})_K \tilde{z}_K, \quad \tilde{y}_J \geq 0, \tilde{z}_K \geq 0$$

3.5 Karush-Kuhn-Tucker-Bedingungen

$$\tilde{y}_i := \begin{cases} \tilde{y}_i & \text{für } i \in J \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad \tilde{z}_j := \begin{cases} \tilde{z}_j & \text{für } j \in K \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

Folglich ist $g = A^\top \hat{y} + F'(\hat{x})^\top \hat{z}$ und

$$\left. \begin{array}{l} \inf(\hat{y}, A\hat{x} - b) = 0 \\ \inf(\hat{z}, F(\hat{x})) = 0 \end{array} \right\} \text{Komplementaritätsbedingungen}$$

□

Bemerkung: Das spezielle an Theorem 3.5.1 ist, dass keine CQ (Rangbedingungen usw.) benötigt werden. Andere (nichtlineare) Ungleichungsnebenbedingungen verwandelt man zur Herleitung der Theorie in Gleichungsnebenbedingungen durch Einführung von *Schlupfvariablen*:

$$\begin{aligned} a(x) &\leq b(x) \\ w &:= b(x) - a(x) \end{aligned}$$

Dann ist $w + a(x) - b(x) = 0$ und $w \geq 0$.

Theorem 3.5.2 (Allgemeine Optimalitätsbedingungen 1. Ordnung)

Sei \hat{x} lokale Lösung des Optimierungsproblems

$$\begin{aligned} \text{(OP)} \quad & \min f(x) \\ & \text{s.t. } C(x) \geq 0 \\ & F(x) = 0, \end{aligned}$$

wobei $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, $C: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$, $F: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ alle C^1 -Funktionen sind und C zusätzlich konvex sei. Dann gibt es $0 \leq \kappa \in \mathbb{R}$, $\hat{y} \in \mathbb{R}^n$, $\hat{z} \in \mathbb{R}^m$ mit

$$\begin{aligned} \kappa g(\hat{x}) &= C'(\hat{x})^\top \hat{y} + F'(\hat{x})^\top \hat{z} \\ \inf(\hat{y}, C(\hat{x})) &= 0 \\ F(\hat{x}) &= 0 \end{aligned}$$

und entweder $\kappa = 1$ oder $\kappa = 0$, $\hat{z} \neq 0$.

Definition 3.5.3. Seien zwei Optimierungsprobleme

$$\begin{array}{ll} (*) & \min f_1(x) \\ & \text{s.t. } x \in \mathcal{F}_1 \end{array} \qquad \begin{array}{ll} (**) & \min f_2(x) \\ & \text{s.t. } x \in \mathcal{F}_2 \end{array}$$

gegeben. Das Problem $(**)$ nennt man eine *Relaxation* von $(*)$, wenn $\mathcal{F}_1 \subseteq \mathcal{F}_2$ und $f_1(x) \geq f_2(x)$ für alle $x \in \mathcal{F}_1$ gilt.

3 Optimalitätsbedingungen

Lemma 3.5.4

Betrachten wir (*) und (**) wie in Definition 3.5.3 und sei (**) eine Relaxation von (*) mit $\mathcal{F}_1 \neq \emptyset$, $\mathcal{F}_1, \mathcal{F}_2$ kompakt.

- (i) Ist (**) lösbar, dann auch (*) und es gilt $f_1(\hat{x}_1) \geq f_2(\hat{x}_2)$, wobei \hat{x}_1 eine globale Lösung von (*) und \hat{x}_2 eine globale Lösung von (**) ist.
- (ii) Ist \hat{x} die globale Lösung von (**) und gelten $\hat{x} \in \mathcal{F}_1$ und $f_1(\hat{x}) = f_2(\hat{x})$, dann ist \hat{x} auch globale Lösung von (*).

BILD

Beweis.

- (i) Es gilt $f_1(\hat{x}_1) \geq f_2(\hat{x}_2)$. Lösbarkeit folgt aus Bekanntem.
- (ii) Sei $x \in \mathcal{F}_1$. Dann gilt

$$f(x) \geq f_2(x) \geq f_2(\hat{x}) = f_1(\hat{x})$$

Also ist \hat{x} eine globale Lösung von (*).

□

BILD

Beweis von 3.5.2. Wir betrachten das Optimierungsproblem

$$\begin{aligned} \min f(x) \\ \text{s.t. } Ax &\geq b \\ F(x) &= 0 \\ x &\in U \end{aligned}$$

Dabei ist U eine kompakte konvexe Umgebung von \hat{x} , in der \hat{x} globales Minimum ist.

$$\begin{aligned} A &:= C'(\hat{x})_J \\ b &:= C'(\hat{x})_J \hat{x} \\ J &:= \{i \mid C(\hat{x})_i = 0\} \end{aligned}$$

3.5 Karush-Kuhn-Tucker-Bedingungen

- Idee: (OP) ist eine Relaxation von $(\widehat{\text{OP}})$ und \hat{x} ist eine globale Lösung von $(\widehat{\text{OP}})$. Außerdem ist \hat{x} zulässig für (OP) und die Zielfunktion für (OP) und $(\widehat{\text{OP}})$ stimmen überein.

Sei x zulässig für $(\widehat{\text{OP}})$, dann ist $F(x) = 0$. Es gilt $C(x) = C(\hat{x} + (x - \hat{x})) \geq C(\hat{x}) + C'(\hat{x}) \cdot (x - \hat{x})$, weil C konvex ist. Für genügend kleines U gilt daher

$$\begin{aligned} C(x)_J &\geq C(\hat{x})_J + C'(\hat{x})_{J:(x-\hat{x})} = Ax - b \geq 0 \\ C(x)_{CJ} &\geq C(\hat{x})_{CJ} + C'(\hat{x})_{CJ:(x-\hat{x})} \cdot (x - \hat{x}) \geq 0 \end{aligned}$$

Also ist x zulässig für (OP).

- Idee: Bedingungen des Satzes für $(\widehat{\text{OP}})$:

$$\begin{aligned} \kappa g(\hat{x}) &= A^\top \tilde{y} + F'(\hat{x})^\top \tilde{z} \\ \inf(\tilde{y}, A\hat{x} - b) &= 0 \\ F(\hat{x}) &= 0 \quad \kappa = 1 \vee \kappa = 0 \wedge \hat{z} \neq 0 \end{aligned}$$

$\kappa g(\hat{x}) = C'(\hat{x})^\top \hat{y} + F'(\hat{x})^\top \hat{z}$, wobei $\hat{z} = \tilde{z}$

$$\hat{y} := \begin{cases} \tilde{y}_i & i \in J \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad \inf(\hat{y}, C(\hat{x})) = 0 \text{ ist richtig, weil für die Komponenten } i \in J:$$

$\hat{y}_i C(\hat{x})_i = \tilde{y}_i \cdot 0 = 0$ für $i \notin J$: weil $\hat{y}_i = 0 \Rightarrow 0 \cdot C(\hat{x})_i = 0$

Also müssen wir den Satz nur für $(\widehat{\text{OP}})$ beweisen, d. h. C ist o. B. d. A. linear.

- Idee: Wir reduzieren das Problem auf den Fall $\text{rk } F'(\hat{x}) = r$.

Ist nämlich $\text{rk } F'(\hat{x}) < r$, dann gibt es $0 \neq \hat{z} \in \mathbb{R}^r$ mit $F'(\hat{x})^\top \hat{z} = 0$. Dann setzen wir $\kappa = 0$, $\hat{y} = 0$. Mit diesen Wahlen sind alle Bedingungen erfüllt.

Sei nun $\text{rk } F'(\hat{x}) = r$. Daher gibt es eine Menge R , sodass $F'(\hat{x})_{:R}$ regulär ist. Sei S eine Matrix mit Einträgen in $\{0, 1\}$ und der Eigenschaft $Bs = s_T$ mit $T = \{1, \dots, n\} \setminus R$ für alle $s \in \mathbb{R}^n$ und $B \in \mathbb{R}^{(n-r)}$. Wir betrachten die Funktion

$$\Phi: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n, \quad \Phi(x) := \begin{pmatrix} F(x) \\ Bx - B\hat{x} \end{pmatrix}$$

Es gilt

$$\begin{aligned} \Phi(\hat{x}) &= 0 \\ \Phi'(\hat{x}) &= \begin{pmatrix} F'(\hat{x}) \\ B \end{pmatrix} = \left(\begin{array}{c|c} F'(\hat{x})_{:R} & F'(\hat{x})_{:r} \\ \hline 0 & I \end{array} \right) \text{ ist regulär.} \end{aligned}$$

Der Satz über inverse Funktionen liefert eine Umgebung V von \hat{x} und eine Umgebung W von 0, sodass $\Phi: V \rightarrow W$ bijektiv ist, Φ^{-1} ist C^1 und $\Phi^{-1}(0) = \hat{x}$.

3 Optimalitätsbedingungen

Zu einem gegebenen Vektor p mit $F'(\hat{x})p = 0$ definieren wir

$$S(\alpha) := \Phi^{-1} \begin{pmatrix} 0 \\ \alpha Bp \end{pmatrix} - \hat{x}$$

ist C^1 und existiert für kleine $|\alpha|$.

$$S(0) = \Phi^{-1}(0) - \hat{x} = 0$$

also folgt

$$\gamma(\alpha) := \begin{pmatrix} F(\hat{x} + S(\alpha)) \\ BS(\alpha) \end{pmatrix} = \Phi(\hat{x} + S(\alpha)) = \Phi \left(\Phi^{-1} \begin{pmatrix} 0 \\ \alpha Bp \end{pmatrix} \right) = \begin{pmatrix} 0 \\ \alpha Bp \end{pmatrix}$$

Also ist $F(\hat{x} + S(\alpha)) = 0$ für $|\alpha|$ klein.

$$BS(\alpha) = \alpha Bp$$

$$S(0) = 0$$

Das heißt $\hat{x} + S(\alpha)$ läuft entlang der Nebenbedingung $F(x) = 0$ in Richtung p .

$$\begin{aligned} \gamma'(\alpha) &= \begin{pmatrix} F'(\hat{x} + s(\alpha))s'(\alpha) \\ Bs'(\alpha) \end{pmatrix} \\ \gamma'(0) &= \begin{pmatrix} F'(\hat{x})s'(0) \\ Bs'(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} F'(\hat{x}) \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ Bp \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Also gilt $s'(0) = p$, d. h. p ist Tangentialvektor von $\hat{x} + s(\alpha)$ bei \hat{x} .

Angenommen, p erfüllt

$$\left. \begin{aligned} g^\top p &< 0 \\ (Ap)_J &> 0 \\ F'(\hat{x})p &= 0 \end{aligned} \right\} \textcircled{*}$$

Dann gilt nach dem Satz von Taylor

$$A \cdot (\hat{x} + s(\alpha)) = A(\hat{x} + s(0) + \alpha s'(0) + o(\alpha)) = A\hat{x} + \alpha Ap + o(\alpha)$$

Also ist $\hat{x} + s(\alpha)$ zulässig, wenn α klein genug ist.

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\alpha} f(\hat{x} + s(\alpha)) &= g^\top (\hat{x} + s(\alpha))s'(\alpha) \\ \frac{d}{d\alpha} \Big|_{\alpha=0} f(\hat{x} + s(\alpha)) &= g^\top p < 0 \end{aligned}$$

Also wird f lokal kleiner bzw. \hat{x} ist kein lokales Minimum für $\alpha \mapsto f(\hat{x} + s(\alpha))$, daher auch kein lokales Minimum, also keine Lösung von (R). Da \hat{x} lokal optimal ist, gibt es folglich kein p , das $\textcircled{*}$ erfüllt.

3.5 Karush-Kuhn-Tucker-Bedingungen

Wir wenden jetzt den Transpositionssatz an:

$$\bar{B} = \left(\begin{array}{c} -g^\top \\ A_J \\ F'(\hat{x}) \end{array} \right) \left. \begin{array}{l} \\ \\ \end{array} \right\} \begin{array}{l} K \\ I \end{array}$$

Gleichung $\textcircled{*}$ ist äquivalent zu (i) im Transpositionssatz, und für (ii) definieren wir

$$q = \left(\begin{array}{c} K \\ \tilde{y}_J \\ \bar{z} \end{array} \right) \left. \begin{array}{l} \\ \\ \end{array} \right\} \begin{array}{l} K \\ I \end{array}$$

Es gibt also q mit $B^\top q = 0$, $q_K \geq 0$, $q_K \neq 0$, d. h.

$$-\kappa g + A_J^\top \tilde{y}_J + F'(\hat{x})^\top \bar{z} = 0, \kappa \geq 0, \tilde{y}_J \geq 0, (\kappa, \tilde{y}_J) \neq (0, 0)$$

Es sei $\tilde{y}_J := 0$, dann ist $\kappa g = A^\top \tilde{y} + F'(\hat{x})^\top \bar{z}$

Sei $\kappa = 0 = z$, dann folgt:

$$A^\top \tilde{y} = 0 \Rightarrow b^\top y = (A\hat{x})^\top \tilde{y} = \hat{x}^\top A^\top \tilde{y} = 0$$

Also gilt für alle zulässige $x \in U$, dass

$$(Ax - b)^\top \tilde{y} = x^\top \underbrace{A^\top \tilde{y}}_{=0} - \underbrace{b^\top \tilde{y}}_{=0} = 0, \quad Ax - b \geq 0, \tilde{y} \geq 0, \tilde{y} \neq 0$$

Also gibt es i , sodass für alle $x \in U$ gilt: $(Ax - b)_i = 0$; wir definieren

$$K := \{i \mid (Ax)_i = b_i \quad \forall x \in U\} \neq \emptyset$$

Dann ist $A_K x = b_K$ lösbar.

Sei L so gewählt, dass A_L : linear unabhängige Zeilen hat und $L \subseteq K$ maximal ist mit dieser Eigenschaft.

$$M := \{1, \dots, m\} \setminus K$$

Dann ist $A_K x = b_K$ genau dann wenn $A_L x = b_L$ und die Menge der zulässigen Punkte des Optimierungsproblems kann auch für $x \in U$ beschrieben werden durch

$$(**) \quad \begin{array}{l} A_M x \geq b_M \\ A_L x \geq b_L \\ F(x) = 0 \end{array}$$

Wir beweisen noch einmal für das System der Nebenbedingung (**). Wir erhalten $\kappa, \bar{y}_M, \bar{y}_L, \bar{z}$ mit

$$\begin{array}{l} \kappa g(\hat{x}) = A_M^\top \bar{y}_M + A_L^\top \bar{y}_L + F'(\hat{x})^\top \bar{z} \\ \inf(\bar{y}_M, A_M \hat{x} - b_M) = 0 \\ A_L \hat{x} = b_L, F(\hat{x}) = 0 \\ K \geq 0, \bar{y}_M \geq 0, (\kappa, \bar{y}_M) \neq (0, 0) \end{array}$$

3 Optimalitätsbedingungen

Sei $\kappa = 0$ und $\bar{y}_L = 0 = \bar{z}_L$. Dann gilt $A_M^\top \bar{y}_M = 0$ und es gibt $j \in M$, sodass für alle $x \in U$ gilt: $(Ax - b)_j = 0$. Also ist $j \in K$ und $j \in K \cap M = \emptyset$ – Widerspruch! Daher gilt $\kappa \neq 0$ oder $(\bar{y}_L, \bar{z}) \neq (0, 0)$.

Sei $\kappa = 0$ und $\bar{z} = 0$, dann ist $\bar{y}_L \neq 0$ und $\bar{y}_M = 0$, weil dann gilt

$$A_L^\top \bar{y}_L + A_M^\top \bar{y}_M = 0$$

Wegen des Arguments von vorhin folgt für alle j mit $\bar{y}_j \neq 0$, dass

$$j \in K \Rightarrow j \notin M \Rightarrow \bar{y}_M = 0 \Rightarrow A_L^\top \bar{y}_L = 0$$

Also ist $\bar{y}_L = 0$, weil A_L : linear unabhängige Zeilen hat. Folglich ist für $\kappa = 0$ automatisch $\bar{z} \neq 0$.

Es bleibt zu zeigen, dass $\bar{y} \geq 0$ möglich ist: Wir zeigen, dass es $y \geq 0$ gibt mit

$$A^\top y = a_M^\top \bar{y}_M + A_L^\top \bar{y}_L$$

Wir wissen, dass $Ap \geq 0$, $A_K p \neq 0$ inkonsistent sind, weil

$$Ap \geq 0 \Rightarrow A \underbrace{(\bar{x} + p)}_x \geq b \Rightarrow \underbrace{A_K \hat{x}}_{b_K} + A_K p = b_K \Rightarrow A_K p = 0$$

Speziell sind daher $Ap \geq 0$ und $\bar{y}_K^\top A_K p < 0$ inkonsistent.

Nach dem Lemma von Farkas gibt es $q \geq 0$ mit

$$A^\top q = A_K^\top \bar{y}_K = A_L^\top \bar{y}_L$$

Sei nun $y_M := \bar{y}_M + q_M$ und $y_K := q_K$, dann ist

$$A^\top y = a_M^\top \bar{y}_M + A_L^\top \bar{y}_L$$

Ist $\kappa \neq 0$, so setzen wir $\hat{y} := \frac{y}{\kappa}$, $\hat{z} := \frac{\bar{z}}{\kappa}$; ist $\kappa = 0$, so setzen wir $\hat{y} := y$, $\hat{z} := \bar{z}$.

□

Korollar 3.5.5

Ist die Situation von 3.5.2 gegeben und gilt die CQ

$$\left. \begin{array}{l} C'(\hat{x})_J^\top y_J + F'(\hat{x})^\top z = 0 \\ y_J \geq 0 \end{array} \right\} \Rightarrow z = 0$$

mit $J = \{i \mid C(\hat{x})_i = 0\}$, dann gilt $\kappa = 1$.

Lässt man $y_J \geq 0$ weg und gilt immer noch

$$C'(\hat{x})_J^\top y_J + F'(\hat{x})^\top z = 0 \Rightarrow z = 0$$

Das ist genau dann der Fall, wenn $F'(\hat{x})$ vollen Rang hat.

Korollar 3.5.6

Unter den Annahmen von Theorem 3.5.2 und einer der obigen CQ folgt, dass es $\hat{y} \in \mathbb{R}^m$ und $\hat{z} \in \mathbb{R}^r$ gibt mit

$$\begin{aligned} g(\hat{x}) &= C'(\hat{x})^\top \hat{y} + F'(\hat{x})^\top \hat{z} \\ \inf(\hat{y}, C(\hat{x})) &= 0 \\ F(\hat{x}) &= 0 \end{aligned}$$

Diese Gleichungen werden *Kuhn-Tucker-Bedingungen* genannt. Ein zulässiger Punkt des Optimierungsproblems

$$\begin{aligned} \min f(x) \\ \text{s.t. } C(x) &\geq 0 \\ F(x) &= 0 \end{aligned}$$

heißt *Kuhn-Tucker-Punkt*, wenn er die Kuhn-Tucker-Bedingungen erfüllt.

Theorem 3.5.7 (Notwendige Optimalitätsbedingungen 2. Ordnung)

Sei das Optimierungsproblem

$$\begin{aligned} \min f(x) \\ \text{s.t. } F(x) &= 0 \\ x \in [\underline{x}, \bar{x}] &= \prod_{i=1}^n [\underline{x}_i, \bar{x}_i] \end{aligned}$$

mit C^2 -Funktionen f, F gegeben. Sei weiters \hat{x} eine lokale Lösung dieses Optimierungsproblems und sei

$$J_0 := \{k \mid \hat{x}_k = \underline{x}_k \text{ oder } \hat{x}_k = \bar{x}_k\}$$

Ist die CQ von Korollar 3.5.5 erfüllt, dann erfüllt die Hesse Matrix \hat{G} der Lagrange-Funktion

$$L(x, z) = f(x) + z^\top F(x)$$

bei \hat{x}, \hat{z} die folgenden äquivalenten Bedingungen:

- (i) $F'(\hat{x})s = 0, s_{J_0} = 0 \Rightarrow s^\top \hat{G}s \geq 0$
- (ii) Für eine (und daher jede) Matrix z_0 , deren Spalten den raum aller Vektoren s mit

$$F'(\hat{x})s = 0, s_{J_0} = 0$$

aufspannen, gilt, dass $z_0^\top \hat{G} z_0$ positiv semidefinit ist.

3 Optimalitätsbedingungen

Beweis.

- (i) Das Optimierungsproblem ist ein Spezialfall des Problems in Theorem 3.5.2. Wir untersuchen die Menge der Lösungen mit $F(x) = 0, x_{J_0} = \hat{x}_{J_0}$. Diese Menge kann man parametrisieren durch eine Funktion $x(s)$ mit $s \in S := \{s \in \mathbb{R}^n \mid F'(\hat{x})s = 0, s_{J_0} = 0\}$.

$$\begin{aligned} 0 \leq f(x(s)) - f(\hat{x}) &= L(x(s)) - L(\hat{x}) \\ &= L(\hat{x}, \hat{z}) + L'(\hat{x}, \hat{z})(x(s) - \hat{x}) + \frac{1}{2}(x(s) - \hat{x})^\top L''(\hat{x}, \hat{z})(x(s) - \hat{x}) + \\ &\quad + o(\|s\|^2) - L(\hat{x}, \hat{z}) \\ &= \frac{1}{2}(x(s) - \hat{x})^\top L''(\hat{x}, \hat{z})(x(s) - \hat{x}) + o(\|s\|^2) \\ &= \frac{1}{2}s^\top \hat{G}s + o(\|s\|^2) \end{aligned}$$

Wegen der Kuhn-Tucker-Bedingung gilt $\nabla_x L(\hat{x}, \hat{z})(x(s) - \hat{x}) = 0$ und wegen der Komplementärbedingung

$$C(x) = \begin{pmatrix} \bar{x} - x \\ x - \underline{x} \end{pmatrix} =: \begin{pmatrix} \hat{y}_1 \\ \hat{y}_2 \end{pmatrix} \Rightarrow \underbrace{g(\hat{x})}_{=\nabla_x(L\hat{x}, \hat{z})} = F'(\hat{x})^\top \hat{z} = \hat{y}_1 - \hat{y}_2 \quad \hat{y}_1, \hat{y}_2 \geq 0$$

$$\begin{aligned} \inf(\hat{y}_1, \hat{x} - \underline{x}) &= 0 \\ \inf(\hat{y}_2, \bar{x} - \hat{x}) &= 0 \\ (x(J) - \hat{x})_{J_0} &= 0 \quad \hat{y}_{i_{\{1, \dots, m\} \setminus J_0}} = 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \nabla_x(L(\hat{x}, \hat{z}))_i &= 0 \quad \text{falls } i \notin J_0 \\ (X(J) - \hat{x})_i &= 0 \quad \text{falls } i \in J_0 \\ \Rightarrow \nabla_x L(\hat{x}, \hat{z})_{x(J) - \hat{x}} &= 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow 0 &\leq \frac{1}{2}(x(s) - \hat{x})^\top \nabla_{xx} L(\hat{x}, \hat{z})(x(s) - \hat{x}) + o(\|s\|^2) \\ \Rightarrow 0 &\leq \frac{1}{2}s^\top \hat{G}s + o(\|s\|^2) \end{aligned}$$

Setze für $s = \varepsilon_s$ und lasse $\varepsilon \rightarrow \forall \varepsilon$

$$\begin{aligned} \Rightarrow 0 &\leq \frac{1}{2}\varepsilon_s^\top \hat{G}\varepsilon_s + o(\|\varepsilon_s\|^2) \\ \Rightarrow 0 &\leq \frac{1}{2}s^\top \hat{G}s + \frac{1}{\varepsilon^2}o(\|\varepsilon_s\|^2) \\ \Rightarrow 0 &\leq \frac{1}{2}s^\top \hat{G}s \quad \forall s \text{ wie gegeben} \Rightarrow \text{(i)} \end{aligned}$$

(i) \iff (ii) Gilt (i), dann erfüllt der Vektor $s = z_0 p$ für alle p die Bedingung (i), also

$$p^\top \underbrace{\hat{z}_0^\top \hat{G} z_0}_{\Rightarrow \hat{z}_0^\top \hat{G} z_0 \geq 0} p \geq 0$$

Umgekehrt kann jeder Vektor s , der die linke Seite von (i) erfüllt, als $s = z_0 p$ geschrieben werden.

□

Proposition 3.5.8

Sei \hat{x} ein Kuhn-Tucker-Punkt für das Problem

$$\begin{aligned} \min f(x) \\ \text{s.t. } F(x) = 0 \\ x \in [\underline{x}, \bar{x}] \end{aligned}$$

Der Multiplikator für F sei \hat{z} . und

$$\hat{y} := g(\hat{x}) - F'(\hat{x})^\top \hat{z}$$

Wir setzen

$$D := \text{diag} \left(\sqrt{\frac{2|\hat{y}_i|}{\bar{x}_i - \underline{x}_i}} \right)$$

Gilt für eine C^1 -Funktion $\varphi: \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}$ mit

$$\varphi(0) = 0, \varphi'(0) = \hat{z}^\top,$$

dass die *augmentierte Lagrange-Funktion*

$$\hat{L}(x) := f(x) - \varphi(F(x)) + \frac{1}{2} \|D(x - \hat{x})\|_2^2$$

konvex ist in $[\underline{x}, \bar{x}]$, dann ist \hat{x} die globale Lösung für das Problem. Ist \hat{L} sogar strikt konvex, dann ist \hat{x} die eindeutige globale Lösung.

Bemerkung: Wegen der Schlupfvariablen-Technik ist dieses Optimierungsproblem äquivalent zu jenem in Theorem 3.5.2.

Beweis.

$$\begin{aligned} \hat{L}(\hat{x}) &= f(\hat{x}) \\ \hat{L}'(x) &= g(x) - \varphi'(F(x)) \cdot F'(x) + (x - \hat{x})^\top D^2 \\ \hat{L}'(\hat{x}) &= g(\hat{x}) - \hat{z}^\top \cdot F'(\hat{x}) = \hat{y}^\top \end{aligned}$$

3 Optimalitätsbedingungen

Die Konvexität von \hat{L} in $[\underline{x}, \bar{x}]$ ergibt

$$\begin{aligned}\hat{L}(x) &\geq \hat{L}(\hat{x}) + \hat{L}'(\hat{x})(x - \hat{x}) \\ \hat{L}(x) &\geq f(\hat{x}) + \hat{y}^\top(x - \hat{x})\end{aligned}$$

Ist x zulässig, also $F(x) = 0$, so gilt

$$f(x) = \hat{L}(x) - \frac{1}{2}\|D(x - \hat{x})\|_2^2 \geq f(\hat{x}) + \hat{y}^\top(x - \hat{x}) - \frac{1}{2}\|D(x - \hat{x})\|_2^2$$

zu zeigen:

$$\begin{aligned}\hat{y}^\top(x - \hat{x}) - \frac{1}{2}\|D(x - \hat{x})\|_2^2 &\geq 0 \\ &= \frac{1}{2} \sum_k 2\hat{y}_k(x_k - \hat{y}_k) - D_{kk}^2(x_k - \hat{x}_k)^2 \\ &= \frac{1}{2} \sum_k 2\hat{y}_k(x_k - \hat{x}_k) \left(1 - \frac{\|\hat{y}_k\|}{(\bar{x}_k - \underline{x}_k)y_k}(x_k - \hat{x}_k)\right) \\ &= \sum_k \hat{y}_k(x_k - \hat{x}_k) \left(1 - \frac{\text{sgn } \hat{y}_k}{\bar{x}_k - \underline{x}_k}(x_k - \hat{x}_k)\right) \quad (*)\end{aligned}$$

1. Fall: $\hat{y}_k = 0 \Rightarrow (*) = 0$

2. Fall: $\hat{y}_k > 0 \Rightarrow \hat{x}_k = \underline{x}_k$ (\hat{y}_k ist Lagrange-Multiplikator)

$$\left(1 - \frac{1}{\bar{x}_k - \underline{x}_k}(x_k - \underline{x}_k)\right) \cdot y_k(x_k - \underline{x}_k) \geq 0$$

3. Fall: $\hat{y}_k < 0 \Rightarrow$

$$y_k(x_k - \bar{x}_k) \left(1 - \frac{-1}{\bar{x}_k - \underline{x}_k}(x_k - \bar{x}_k)\right) \geq 0$$

Also ist immer $(*) \geq 0$ und $f(x) \geq f(\hat{x})$, d. h. \hat{x} ist globales Minimum.

Ist \hat{L} strikt konvex, so gilt für $x \neq \hat{x}$

$$\hat{L}(x) > f(\hat{x}) + \hat{y}^\top(x - \hat{x})$$

Also gilt $f(x) > f(\hat{x})$ und \hat{x} ist eindeutig. □

Theorem 3.5.9 (Hinreichende Optimalitätsbedingungen 2. Ordnung)

Wir betrachten wieder das Optimierungsproblem

$$\begin{aligned}\min & f(x) \\ \text{s.t.} & F(x) = 0 \\ & x \in [\underline{x}, \bar{x}]\end{aligned}$$

Sei $J = \{k \mid \hat{y}_k \neq 0\}$, $K = \{k \mid \hat{y}_k = 0\}$ (\hat{y}, \hat{z} wie in Proposition 3.5.8).

Ein Kuhn-Tucker-Punkt \hat{x} , der eine der folgenden äquivalenten Bedingungen erfüllt, ist ein lokales Minimum:

3.5 Karush-Kuhn-Tucker-Bedingungen

- (i) $F'(\hat{x})s = 0, s_j = 0 \Rightarrow s^\top \hat{G}s > 0$ oder $s = 0$
- (ii) Für eine (jede) Matrix Z , deren Spalten eine Basis des Teilraumes aller s mit $F'(\hat{x})s = 0$ und $s_j = 0$ bilden, ist $z^\top \hat{G}z \succ 0$.
- (iii) Für eine (jede) Matrix A , deren Zeilen eine Basis des Zeilenraumes von $F'(\hat{x})_{:K}$ bilden, existiert $\beta \geq 0$, sodass $\hat{G}_{kk} + \beta A^\top A \succ 0$ ist.

Gilt $J = J_0$, so spricht man von *striktter Komplementarität*. Ein Kuhn-Tucker-Punkt, der die äquivalenten Bedingungen erfüllt, heißt *starkes lokales Minimum*.

Bemerkung:

$$\bar{y}_K = \begin{cases} = 0 & x_k \in]\underline{x}_k, \bar{x}_k[\\ \geq 0 & x_k = \underline{x}_k \\ \leq 0 & x_k = \bar{x}_k \end{cases}$$

$$\begin{aligned} k \in J &\Rightarrow \hat{y}_K \neq 0 \\ &\Rightarrow \hat{x}_k = \underline{x}_k \vee \hat{x}_k = \bar{x}_k \\ &\Rightarrow k \in J_0 \\ &\Rightarrow J \subseteq J_0 \end{aligned}$$

Beweis. Wir beweisen, dass aus (ii) lokale Optimalität folgt:

$$A = BF'(\hat{x})_{:K} \quad B \text{ passende Matrix}$$

Wir setzen $\varphi(s) := \hat{z}^\top s - \frac{\beta}{2} \|Bs\|_2^2$

$$\begin{aligned} \hat{L}''(x) &= G(x) - F'(x)^\top \varphi''(F(x))F'(x) - \varphi'(F(x)) \cdot F''(x) + D^2 \\ \varphi'(s) &= \hat{z}^\top - \beta s^\top B^\top B \\ \varphi''(s) &= -\beta B^\top B \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \hat{L}''(x) &= G(x) + \beta F'(x)^\top B^\top B F'(x) - \hat{z}^\top F''(\hat{x}) + \beta F(x)^\top B^\top B \cdot F''(x) + D^2 \\ \hat{L}''(x) &= \underbrace{G(\hat{x}) - \hat{z}^\top F''(\hat{x})}_{=: \hat{G}} + \beta F'(\hat{x})^\top B^\top B F'(\hat{x}) + D^2, \quad F(\hat{x}) \neq 0 \end{aligned}$$

Da $H_{kk} = \hat{G}_{kk}(\hat{x}) + \beta A^\top A$ positiv definit ist, ist auch $\hat{L}''(\hat{x})_{kk}$ positiv definit.

Durch Vertauschen von \underline{x}, \bar{x} kann D_{JJ} beliebig groß gewählt werden, also ist $L''(x)$ positiv definit. Folglich ist \hat{L} konvex und nach Proposition ?? ist \hat{x} ein lokales Minimum.

- (iii) \Rightarrow (i) Sei s so, dass $F'(\hat{x})s = 0$ und $s_j = 0$ gilt. Aus $As_k = 0$ folgt $s_k^\top \hat{G}_{kk}s_k = s_k^\top (\hat{G}_{kk} + \beta A^\top A)s_k > 0$, falls $s_k \neq 0$ ist. Wegen $s_j = 0$ gilt nämlich $s^\top \hat{G}s = s_k^\top \hat{G}_{kk}s_k$.

3 Optimalitätsbedingungen

(i)⇒(ii) Gilt $s \neq 0$, so gibt es $p \neq 0$ mit $s = Zp$, falls $F'(\hat{x}) = 0$ und $s_J = 0$ ilt. Gilt $p \neq 0$, so ist auch $s \neq 0$.

$$0 < s^\top \hat{G}s = p^\top z^\top \hat{G}Zp$$

(ii)⇒(iii) Die Zeilen von A sind linear unabhängig, also existiert P mit $AP = I$. Da $\hat{z}^\top \hat{G}Z$ positiv definit ist, existiert L (obere Dreiecksmatrix) mit $z^\top \hat{G}z = LL^\top$ (L ist regulär). Wir definieren:

$$N := \hat{G}ZL^{-\top}$$

$$M := P^\top (\hat{G} - NN^\top)_{kk} P$$

Sei nun $x \in \setminus^n$, $w := Ax_k$. Der Vektor s mit $s_J = 0$ und $s_K := x_k - Pw$ erfüllt

$$As_k = w - w = 0$$

und daher erfüllt s die linke Seite von (i). Jedes solche s kann so konstruiert werden. Daher ist $s = Zp$ (nach (ii)) und

$$\begin{aligned} x_k^\top \hat{G}_{kk} x_k &= (s_k + Pw)^\top \hat{G}_{kk} (s_k + Pw) \\ &= s_k^\top \hat{G}_{kk} s_k + 2(Pw)^\top \hat{G}_{kk} s_k + (Pw)^\top \hat{G}_{kk} (Pw) \\ s_k^\top \hat{G}_{kk} s_k &= s^\top \hat{G}s = p^\top Z^\top \hat{G}Zp = p^\top LL^\top p \\ \hat{G}_{kk} s_k &= \hat{G}_{:K} s = \hat{G}_{:K} Zp = N_{:K} L^\top p \\ \Rightarrow xx^\top \hat{G}_{kk} x_k &= p^\top LL^\top p + 2(Pw)^\top N_{:K} L^\top p + (Aw)^\top \hat{G}_{kk} (Pw) \\ &= \|L^\top p + N_{:K}^\top Pw\|_2^2 + w^\top Mw \end{aligned}$$

Ist $\beta > \|M\|_2$, dann gilt $w^\top Mw > -\beta w^\top w$ für $w \neq 0$

$$x_k^\top (\hat{G}_{kk} + \beta A^\top A) x_k = x_k^\top \hat{G}_{kk} x_k + \beta w^\top w = \|L^\top p + N_{:K}^\top Pw\|_2^2 + w^\top (M + \beta Z)w$$

Also ist $\hat{G}_{kk} + \beta A^\top A$ positiv definit. □

Man nennt $Z^\top \hat{G}Z$ die *reduzierte Hesse-Matrix* der Lagrange-Funktion L .

Bemerkung: Die Lücke zwischen notwendigen und hinreichender Bedingung 2. Ordnung:

notwendig: (i) $F'(\hat{x}) \geq 0$, $s_{J_0} = 0 \Rightarrow s^\top \hat{G}s \geq 0$

hinreichend: (i) $F'(\hat{x})s = 0$, $s_J = 0 \Rightarrow s^\top \hat{G}s > 0 \vee s = 0$

1. Lücke: positiv semidefinit vs. positiv definit

2. Lücke: J_0 vs. J

Wir wissen: $J \subseteq J_0$

Man benötigt also die positive Definitheit auf mehr Vektoren als man die positive Semidefinitheit erhält (ausgenommen es gilt strikte Komplementarität).

4 Liniensuche, Abstiegsverfahren

4.1 Abstiegsverfahren

Abstiegsverfahren dienen zur Lösung von Optimierungsproblemen ohne Nebenbedingungen bzw. mit Schrankenbedingungen. Eine Folge von zulässigen Punkten $(x_\ell)_\ell$ ist eine *Abstiegsfolge*, wenn für alle ℓ gilt:

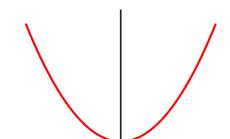
$$f(x_{\ell+1}) < f(x_\ell)$$

Dabei ist f die Zielfunktion und $f_\ell := f(x_\ell)$. Manchmal schreiben wir auch f für f_ℓ und \bar{f} für $f_{\ell+1}$. Für eine Abstiegsfolge tritt immer eines der folgenden Resultate ein:

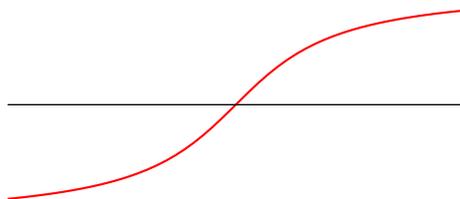
- (i) Es gibt eine Teilfolge mit $\|x_{\ell_n}\| \rightarrow \infty$.
- (ii) Es gibt eine konvergente Teilfolge (im Fall von Nebenbedingungen), deren Grenzwert nicht zulässig ist.
- (iii) Der $\liminf_{\ell \rightarrow \infty} f_\ell = \hat{f}$ ist endlich.

Die Menge $\hat{D} = \{x \in \mathcal{F} : f(x) = \hat{f}\}$ enthält eine Folge von Punkten \hat{x}_ℓ und $\|x_\ell - \hat{x}_\ell\| \rightarrow 0$ für $\ell \rightarrow \infty$.

Bemerkung: Für $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ sieht ein starkes lokales Minimum so aus: In einer kleinen Umgebung hat f die Form einer Parabel.



Lokal sieht ein Minimum wie eine Nullstelle 2. Ordnung aus, d. h. der Gradient hat in diesem Fall eine Nullstelle 1. Ordnung.



4 Liniensuche, Abstiegsverfahren

Um die Konvergenz des Gradienten und den Abstieg im Funktionswert in Relation zu setzen, ist es vernünftig, $f - \bar{f}$ und $\|g\|^2$ in Relation zu setzen.

Proposition 4.1.1

Für jede Abstiegsfolge gilt:

- (i) Gibt es eine Konstante $\sigma > 0$ mit

$$\frac{1}{\sigma} \cdot \sum_{k=0}^{\ell-1} \frac{f_k - f_{k-1}}{\|g_k\|^2} \geq 0 \quad \forall \ell > 0$$

oder

$$\frac{f_\ell - f_{\ell+1}}{\|g_\ell\|^2} \quad \text{für unendlich viele } \ell \geq 0,$$

dann gilt

$$\inf_{\ell \geq 0} \|g_\ell\| = 0 \quad \text{oder} \quad \lim_{\ell \rightarrow \infty} f_\ell = -\infty$$

- (ii) Gibt es $\delta > 0$ mit

$$\frac{f_\ell - f_{\ell+1}}{\|g_\ell\|^2} \geq \delta \quad \forall \ell \geq 0,$$

dann gilt

$$\lim_{\ell \rightarrow \infty} \|g_\ell\| = 0 \quad \text{oder} \quad \lim_{\ell \rightarrow \infty} f_\ell = -\infty$$

Bemerkung: Heißt das schon, dass die Abstiegsfolge konvergiert, wenn sie beschränkt ist?

BILD

Im konvexen Fall (genauer: wenn \mathcal{F} konvex, beschränkt und f gleichmäßig konvex sind) genügt $\|g_\ell\| \rightarrow 0$ schon, um zu zeigen, dass $(x_\ell)_\ell$ konvergiert, und zwar sogar gegen ein Minimum.

4.2 Liniensuche

Liniensuchverfahren erzeugen einen Suchpfad $x + s(\alpha)$ mit $s: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^n, \alpha \geq 0, s(0) = 0$. Man nennt s den *Suchpfad* und α den *Schrittweitenparameter*. Entlang des Suchpfades wird ein Punkt \bar{x} gesucht, sodass $f - \bar{f}$ groß genug ist, d. h. es wird das $\bar{\alpha}$ bestimmt mit $\bar{x} = x + s(\bar{\alpha})$. Der Suchpfad muss jedenfalls die sog. *Abstiegsbedingung* erfüllen:

$$g^\top s(\alpha) \leq -\varepsilon \alpha \quad \forall \alpha \geq 0, \varepsilon > 0, g \neq 0$$

$$f(x + s(\alpha)) \stackrel{\text{Taylor}}{=} f + \underbrace{g^\top s(\alpha)}_{\leq -\varepsilon \alpha} + o(s(\alpha))$$

Die Optimierungsmethode bestimmt die Wahl des Suchpfades. Die Liniensuchmethode bestimmt die Wahl des Schrittweitenparameters.

Eine Liniensuche heißt *linear*, wenn für die *Suchrichtung* $p \neq 0$ gilt:

$$s(\alpha) = \alpha \cdot p$$

Die Abstiegsbedingung ist dann

$$\begin{aligned} g^\top s(\alpha) &= g^\top \alpha p = \alpha g^\top p \leq -\varepsilon \alpha \quad \forall \alpha \geq 0 \\ \iff g^\top p &\leq -\varepsilon \\ \iff g^\top p &< 0 \end{aligned}$$

Nichtlineare Liniensuche

Parabolisch: $s(\alpha) = \alpha p + \alpha^2 q$

Hyperbolisch: $s(\alpha) = -\alpha Z(\alpha D + E)^{-1} z^\top g$, D, E diagonal, Z Matrix

Proposition 4.2.1

Ist $g \neq 0$, dann erfüllt der Suchpfad die Abstiegsbedingung, wenn

- (i) linear: $\exists B \succ 0$ mit $P = -B^{-1}g$
- (ii) parabolisch: $g^\top p < 0, g^\top q \leq 0$
- (iii) hyperbolisch: $h := Z^\top g \neq 0, \min_{k_i \neq 0} D_{ii} = 0, \min_{k_i \neq 0} E_{ii} > 0$

Beweis. kurze Rechnung

□

Eine Liniensuche heißt *exakt*, wenn

$$\bar{\alpha} = \operatorname{argmin}_{\alpha} f(x + s(\alpha)),$$

d. h. $\bar{\alpha}$ ist jenes α , für das $f(x + s(\alpha))$ minimal ist.

Die einfachsten nichttrivialen Funktionen sind die quadratischen:

$$f(x + \alpha p) = f(x) + \underbrace{\alpha g(x)^\top p}_{:=a} + \frac{\alpha^2}{2} \underbrace{p^\top G(x) p}_{:=b} = f(x) + \alpha a + \frac{\alpha^2}{2} b$$

4 Liniensuche, Abstiegsverfahren

Diese Funktion ist minimal bei $\alpha = -\frac{a}{b}$ für $b > 0$.

$$\begin{aligned}\bar{f} = f(Z) &= f\left(x - \frac{a}{b}p\right) \\ &= f - \frac{a}{b}g^\top p + \frac{a^2}{2b^2}p^\top Gp \\ &= f - \frac{g^\top p}{p^\top Gp}g^\top p + \frac{(g^\top p)^2}{2(p^\top Gp)^2}p^\top Gp \\ &= f - \frac{1}{2} \cdot \frac{(g^\top p)^2}{p^\top Gp}\end{aligned}$$

Für die Suchrichtung $s = p$ ist das

$$\begin{aligned}&= f - \frac{1}{2} \cdot \frac{(g^\top s)^2}{\underbrace{s^\top Gs}} \\ &=: \|s\|_G^2 \rightarrow \|s\|_G = \sqrt{s^\top Gs}\end{aligned}$$

d. h. $\bar{f} - f = -\frac{1}{2} \cdot \frac{(g^\top s)^2}{\|s\|_G^2}$

Im quadratischen Fall ist eine Liniensuche exakt, wenn

$$\bar{f} - f = -\frac{1}{2} \cdot \frac{(g^\top s)^2}{\|s\|_G^2}$$

Man kann $\|s\|_G$ berechnen, wenn die Hesse-Matrix G bekannt ist.

Alle Normen sind \mathbb{R}^n äquivalent. daher kann man $\|\cdot\|_G$ durch $\|\cdot\|_2$ abschätzen. Das führt zu folgender Definition: Eine Liniensuche heißt *effizient*, wenn es ein $\varepsilon > 0$ gibt, sodass für alle Schritte gilt:

$$\bar{f} - f \leq -\varepsilon \frac{(g^\top s)^2}{\|s\|^2}$$

Theorem 4.2.2

Sei $(x_\ell)_\ell$ eine Abstiegsfolge, die von einer effizienten Liniensuche-Strategie stammt. Gilt

$$\sup_\ell \frac{g_\ell^\top s_\ell}{\|g_\ell\| \cdot \|s_\ell\|} < 0,$$

so folgt

$$\lim_{\ell \rightarrow \infty} \|g_\ell\| = 0, \quad \lim_{\ell \rightarrow \infty} f_\ell = -\infty$$

Konvergieren die x_ℓ gegen ein lokales Minimum, dann ist die Konvergenz mindestens lokal Q -linear.

Ist nun die schwächere Voraussetzung

$$\liminf_{\ell \rightarrow \infty} \frac{g_\ell^\top s_\ell}{\|g_\ell\| \cot \|s_\ell\|} < 0$$

gegeben, dann ist

$$\inf_{\ell \geq 0} \|g_\ell\| = 0 \quad \text{oder} \quad \lim_{\ell \rightarrow \infty} f_\ell = -\infty$$

Beweis. folgt aus Proposition 4.1.1. □

Der *Goldstein-Quotient* ist definiert als

$$\mu(x) := \frac{f(x + s(\alpha))}{g^\top s(\alpha)} \quad \text{für } \alpha > 0$$

Wegen der Abstiegsbedingung gilt (lokal)

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

und außerdem $g^\top s(\alpha) < 0$ für kleines α , d. h. $\mu(\alpha) > 0$. Gilt also umgekehrt $g^\top s(\alpha) < 0$ und $\mu(\alpha) > 0$, so ist auch $f(x + s(\alpha)) < f(x)$. Nehmen wir an, dass $s(\alpha)$ stetig differenzierbar ist, dann folgt

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{f(x + s(\alpha)) - f(x)}{g^\top s(\alpha)} = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{g^\top s'(\alpha) - 0}{g^\top s'(\alpha)} = 1$$

Also gilt $\mu(\alpha) \rightarrow 1$ für $\alpha \rightarrow 0$ und $\mu(\alpha) \rightarrow 0$ für $\alpha \rightarrow \infty$ (falls f beschränkt ist und $g^\top s(\alpha) \leq -\varepsilon \quad \forall \alpha$), d. h. die Gleichung

$$\mu(\alpha) = \mu^* \quad \text{mit } \mu^* \in]0, 1[$$

hat mindestens eine Lösung $\alpha^* > 0$.

Theorem 4.2.3

Sei $0 < \mu' \leq \mu'' < 1 < \mu'''$, dann ist jede Liniensuche mit

$$(*) \quad \mu' \leq \frac{\bar{f} - f}{g^\top s} \leq \mu''$$

oder

$$(**) \quad \frac{\bar{f} - f}{g^\top s} \geq \mu'''$$

effizient. Die Gleichung (*) wird auch *Goldstein-Bedingung* genannt.

Bemerkung: BILDER

Gleichung (*) ist eine Bedingung an die Länge der Schritte, μ' sorgt dafür, dass sie nicht zu lang werden, und μ'' dafür, dass sie nicht zu kurz werden.

Die Goldstein-Bedingung kann ausschließen, dass die Schrittweite der exakten Liniensuche zulässig ist. Das ist aber kein Problem.

BILDER

4 Liniensuche, Abstiegsverfahren

Der *Wolfe-Quotient* ist definiert durch

$$\eta(\alpha) := \frac{g^\top(x + s(\alpha))s(\alpha)}{g^\top s(\alpha)}$$

Er gibt die Abweichung von der exakten Liniensuche an. Für die gilt nämlich $\bar{g}^\top s = 0$.

Theorem 4.2.4

Jede Liniensuche, die Schritte erzeugt mit

$$(***) \quad \mu' \leq \frac{\bar{f} - f}{g^\top s} \quad \text{und} \quad \frac{\bar{g}^\top s}{g^\top s} \leq \eta'$$

mit $0 < \mu' \leq \eta' < 1$ ist effizient, und (***) wird Wolfe-Bedingung genannt.

Nachteil: Man muss am Testpunkt \bar{x} auch den Gradienten (nicht nur den Funktionswert) bestimmen.

Liniensuche

- muss die Abstiegsbedingung erfüllen, d. h. die Richtung muss mit g einen Winkel $> 90^\circ (= \pi/2)$ einschließen.
- sollte effizient sein, d. h. entweder (*) oder (***) erfüllen.

Algorithmus 4.2.5 Armijo-Liniensuche

Anfangspunkt x , Suchrichtung s , $\sigma > 0$

$$h(\alpha) := f(x + \alpha s)$$

$$\rho = \sigma \cdot \|g\|_2$$

Bestimme die kleinste Zahl $j \geq 0$, sodass $h(-2^{-j}) \leq h(0) - \rho 2^{-j}$ gilt.

Dann sei $\alpha = 2^{-k}$ mit $k = \operatorname{argmin}_{0 \leq i \leq j} h(2^{-i})$ (argmin ist das Argument, das den Ausdruck minimiert)

return α

Algorithmus 4.2.6 Halbierende Liniensuche mit Goldstein-Bedingung

gegeben $x, s(\alpha)$ mit $g^\top s(\alpha) \leq -\varepsilon \quad \forall \alpha > 0$
 $h(\alpha) := f(x + s(\alpha))$
 $\mu(\alpha) := \frac{h(\alpha) - h(0)}{g^\top s(\alpha)}$
wähle $0 < \mu' < \mu'' < 1 < \mu'''$
 $j = -1$
while $\mu < \mu' \vee (\mu > \mu'' \wedge \mu < \mu''')$ **do**
 $\alpha = 2^{-k}$ mit $k = \operatorname{argmin}_{0 \leq i \leq j} h(2^{-i})$
end while
return α

Algorithmus 4.2.7 Halbierende Liniensuche mit Wolfe-Bedingung

Sei $x, s(\alpha)$ mit $g^\top s(\alpha) \leq -\varepsilon \quad \forall \alpha$
 $h(\alpha) := f(x + s(\alpha))$
 $g(\alpha) := g(x + s(\alpha))$
 $\eta(\alpha) := \frac{g(\alpha)^\top s(\alpha)}{g(0)^\top s(\alpha)}$
 $\mu(\alpha) := \frac{h(\alpha) - h(0)}{g(0)^\top s(\alpha)}$
wähle $0 < \mu' \leq \eta' < 1$
 $j = -1$
while $\mu < \mu' \vee \eta > \eta'$ **do**
 $j = j + 1$
 $\mu = \mu(2^{-j})$
 $\eta = \eta(2^{-j})$
end while
 $\alpha = 2^{-k}$ mit $k = \operatorname{argmin}_{0 \leq i \leq j} h(2^{-i})$
return α

Theorem 4.2.8

Sei x^* ein lokales Optimum der C^2 -Funktion f mit $G(x^*) \succeq 0$. Konvergiert $(x_k)_k \rightarrow x^*$ superlinear, so folgt

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{f(x_{k+1}) - f(x_k)}{g(x_k)^\top s_k} = \frac{1}{2} \qquad \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{g(x_{k+1})^\top s_k}{g(x_k)^\top s_k} = 0$$

Algorithmus 4.2.9 Interpolierende und einklammernde Liniensuche

```

 $k(\alpha) := f(x + s(\alpha))$ 
wähle  $\underline{f} \ll f(x)$ ,
 $\alpha_0 > 0, \alpha_{-1} > 0, \beta_{-1} = 1, \sigma \ll 1, \tau_1 > 1, 0 < \tau_2 < \tau_3 \leq \frac{1}{2}$ 
Setze  $B = true, k = 0$ 
while  $k \leq k_{\max} \wedge B = true$  do
  if  $h(\alpha_k) \leq \underline{f}$  then
    return  $\alpha_k$ 
  end if
  if  $h(\alpha_k) > h(0) + \alpha_k h'(0) \geq h(\alpha_{k-1})$  then
     $\alpha_k = \alpha_{k-1}$ 
     $b_k = \alpha_k$ 
     $B = false$ 
  end if
  if  $|h'(\alpha_k)| \leq -\sigma$  then
    return  $\alpha_k$ 
  end if
  if  $h'(\alpha_k) \geq 0$  then
     $a_k := \alpha_k$ 
     $b_k := \alpha_{k-1}$ 
     $B = false$ 
  end if
   $\mu := \frac{h(\alpha_k) - h(0)}{g^+ s(\alpha)}$ 
  if  $\mu \leq 2\alpha_k - \alpha_{k-1}$  then
     $\alpha_{k+1} = \mu$ 
  else
    wähle  $\alpha_{k+1} \in [2\alpha_k - \alpha_{k-1}, \min(\mu, \alpha_k + \tau, (\alpha_k - \alpha_{k-1}))]$ 
  end if
   $k = k + 1$ 
end while
if  $k > k_{\max}$  then
  print Fehler: Konnte keine Schrittweite finden!
end if
for  $j = k \rightarrow j - \max$  do
  wähle  $\alpha_j \in [a_j - \tau_2(b_j - a_j), b_j - \tau_3(b_j - a_j)]$ 
  if  $h(\alpha_j) > h(0) + \rho\alpha_j h'(0) \vee h(\alpha_j) \geq h(a_j)$  then
     $a_{j+1} = a_j$ 
     $b_{j+1} = \alpha_j$ 
  else
    if  $h'(\alpha_j) \leq -\sigma h'(0)$  then
      return  $\alpha_j$ 
    end if
     $a_{j+1} = \alpha_j$ 
    if  $(b_j - a_j)h'(\alpha_j) \geq 0$  then
       $b_{j+1} = \delta_j$ 
    end if
  end if
58 end if
end for
print Fehler: Konnte keine Schrittweite finden!

```

4.3 Optimierungsprobleme mit einfachen Schranken

Wenn der Algorithmus positiv endet, so erzeugt er eine Schrittweite, die die Wolfe-Bedingung erfüllt, d. h. er ist sehr gut dazu geeignet, Punkte für Algorithmen wie BFGS zu erzeugen (siehe nächster Abschnitt).

4.3 Optimierungsprobleme mit einfachen Schranken

BILD

Liniensuchen müssen auf den Rand achten, weil sie sonst den zulässigen Bereich verlassen. In diesem Abschnitt betrachten wir das Problem

$$\begin{array}{ll} \min & f(x) \\ \text{s.t.} & x \in [u, v] \\ & u_i \in \mathbb{R} \cup \{-\infty\} \\ & v_i \in \mathbb{R} \cup \{+\infty\} \end{array} \quad (\text{BCP})$$

Wiederholung

Am Punkt x heißt die Nebenbedingung *aktiv*, wenn $x_i \geq u_i$ oder $x_i = v_i$, sonst *nicht aktiv*.

Soll eine Liniensuche den zulässigen Bereich nicht verlassen, so muss im linesren fall für die Suchrichtung gelten, dass

$$p_i \begin{cases} \geq 0 & x_i = u_i \\ \leq 0 & x_i = v_i \end{cases}$$

Theorem 4.3.1

Sei \hat{x} eine lokale Lösung von (BCP). Es gilt für $\hat{g} = g(\hat{x})$

$$\hat{g}_i \begin{cases} \geq 0 & \hat{x}_i = u_i < v_i \\ \leq 0 & \hat{x}_i = v_i > u_i \\ = 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

(Dies ist ein Spezialfall der Optimalitätsbedingungen 1. Ordnung.)

Wir definieren den *reduzierten Gradienten*

$$(g_{\text{red}}(x))_i = \begin{cases} 0 & x_i = u_i = v_i \\ g_i(x)_- & x_i = u_i < v_i \\ g_i(x)_+ & x_i = v_i > u_i \\ g_i(x) & \text{sonst} \end{cases}$$

Dann vereinfacht sich die Optimalitätsbedingung 1. Ordnung zu

$$g_{\text{red}}(\hat{x}) = 0$$

4 Liniensuche, Abstiegsverfahren

Zwei Möglichkeiten zur Liniensuche im einfach begrenzten Gebiet sind offensichtlich. Beide hängen von der folgenden Menge ab:

$$\begin{aligned} S &= \{\alpha \mid x + s(\alpha) \text{ ist in einer Komponente aktiv, in der } x \text{ nicht aktiv ist}\} \\ &= \{\alpha \mid \exists j: ((x_j + s(\alpha)_j = u_j \wedge x_j \neq u_j) \vee (x_j + s(\alpha)_j = v_j \wedge x_j \neq v_j))\} \setminus \{0\} \end{aligned}$$

Für einen linearen Suchpfad mit Suchrichtung p gilt

$$S = \left\{ \frac{u_i - x_i}{p_i} \mid p_i > 0 \right\} \cup \left\{ \frac{v_i - x_i}{p_i} \mid p_i < 0 \right\}$$

Es gilt $\bar{\alpha} = \inf S > 0$. Bei Schrittweite $\bar{\alpha}$ trifft die Liniensuche zum ersten Mal den Rand.

Methode 1: Begrenzung der Liniensuche auf den zulässigen Bereich

Die Algorithmen zur Liniensuche werden nur dahingehend abgeändert, dass die höchste zulässige Schranke $\bar{\alpha}$ ist. Bei Algorithmus 4.2.9 wird z. B. $b_{-1} = b_0 = \bar{\alpha}$ gesetzt.

Bemerkung: Es ist leicht möglich, durch Veränderungen an Algorithmus 4.2.9 (und auch an dem Algorithmus davor) das $\bar{\alpha}$ im Verlauf der Liniensuche zu bestimmen.

Methode 1: Geknickter Suchpfad

Man ändert $s(\alpha)$ zu $s_k(\alpha)$, indem $s(\alpha)$ in den zulässigen Bereich projiziert wird:

$$s_k(\alpha)_j := \begin{cases} u_j - x_j & x_j + s(\alpha)_j < u_j \\ v_j - x_j & x_j + s(\alpha)_j > v_j \\ s(\alpha)_j & \text{sonst} \end{cases}$$

Selbst falls $s(\alpha)$ linear war, ist $s_k(\alpha)$ ein nichtlinearer Suchpfad. Die Abstiegsbedingung ist etwas Lokales, also wenn $s(\alpha)$ die Abstiegsbedingung erfüllt, dann auch $s_k(\alpha)$, weil $s(\alpha) = s_k(\alpha)$ für $\alpha \leq \bar{\alpha}$ gilt. Dieser Suchpfad $s_k(\alpha)$ kann anstelle von $s(\alpha)$ in die Algorithmen zur Liniensuche (z. B. 4.2.9) eingesetzt werden. (Er macht an jedem $\alpha \in S$ einen Knick.) Man muss bei den 2. Methoden besonders beachten, dass es passieren kann, dass $s_k(\alpha') = s_k(\hat{\alpha}) \quad \forall \alpha' \geq \bar{\alpha}$. Außerdem muss in den Abbruchbedingungen der Algorithmen der Gradient g durch den reduzierten Gradienten g_{red} ersetzt werden.

BILD

Ein Problem, das im einfach beschränkten Fall auftreten kann, ist das sogenannte *Zigzagging*. Das hängt mit der Wahl der Suchrichtung zusammen: Der Suchpfad wechselt in jedem Schritt die Aktivität und konvergiert nur langsam in die Ecke.

Aktive-mengen-Verfahren verschaffen da Abhilfe. Diese Verfahren halten als Zusatzinformation eine Menge A derjenigen Indices, die als aktiv bei der Lösung angenommen werden, im Speicher und betrachten danach in jedem Schritt das veränderte Problem

$$(BCA) \quad \begin{aligned} \min \quad & f(x) \\ \text{s.t.} \quad & x_k \in [u_k, v_k], k \notin A \\ & x_k = u_k \text{ oder } x_k = v_k, k \in A \end{aligned}$$

Nach jedem Schritt steht dann die Entscheidung an, ob die Menge A verändert werden soll oder nicht. Falls $g_{\text{red}} = 0$ für (BCP) gilt, ist man fertig. Bei der Veränderung von A ist, um Zigzagging zu vermeiden, darauf zu achten, dass ein Index, der nicht in A liegt, also am Ende des Schrittes aktiv wird (also zu A hinzukommt), wenigstens einige Schritte lang in A verbleibt.

Theorem 4.3.2

Sei f eine C^1 -Funktion auf $[u, v]$. Wenn die Suchrichtung p_n einer linearen Liniensuche die Bedingung

$$\inf \frac{\text{grad}(x_k)^\top p_k}{\|\text{grad}(x_k)\| \cdot \|p_k\|} < 0$$

erfüllen und die Folge der Iterationspunkte x_k beschränkt ist, dann gilt

$$\inf_{\ell \geq 0} \|\text{grad}(x_\ell)\| = 0$$

Gilt außerdem

$$\lim_{\ell \rightarrow \infty} x_\ell = \hat{x},$$

dann erfüllt \hat{x} die Optimalitätsbedingungen 1. Ordnung und für großes ℓ gilt

$$x_{\ell,i} = \hat{x}_i \quad \text{falls } g(\hat{x})_i \neq 0$$

Hat also ein Aktives-Mengen-Verfahren die richtige Menge A gefunden (was nach endlich vielen Schritten möglich ist), dann ist (BCA) äquivalent zu (BCP) und daher wird das Verfahren ab diesem Zeitpunkt im Wesentlichen wie ein unrestringiertes Verfahren konvergieren. (Ausgenommen in degenerierten Fällen, in denen $g(\hat{x})_i = 0$ und $(\hat{x}_i = u_i \vee \hat{x}_i = v_i)$ gilt)

4.4 Straf- und Barriereverfahren

$$(O1) \quad \begin{aligned} \min \quad & f(x) \\ \text{s.t.} \quad & F(x) = 0 \quad f, F \in C^1 \\ & x \in [u, v] \end{aligned}$$

4 Liniensuche, Abstiegsverfahren

$$(O2) \quad \begin{array}{ll} \min & f(x) \\ \text{s.t.} & F(x) = 0 \\ & G(x) \leq 0 \\ & x \in [u, v] \end{array} \quad f, F, G \in C^1$$

$$(O3) \quad \begin{array}{ll} \min & f(x) \\ \text{s.t.} & G(x) \leq 0 \\ & x \in [u, v] \end{array} \quad f, G \in C^1$$

Alle drei Formulierungen sind äquivalent (Schlupfvariablen und $h(x) = 0 \iff h(x) \leq 0, -h(x) \leq 0$). Für (O3) gibt es möglicherweise strikt zulässige Punkte \tilde{x} mit $G(\tilde{x}) < 0$ im Inneren von \mathcal{F} .

4 Klassen von Verfahren

$$(*) \quad \left\{ \begin{array}{l} \bullet \text{ augmentierte Lagrange-Verfahren} \\ \bullet \text{ Strafmethode} \end{array} \right.$$

$$(**) \quad \left\{ \begin{array}{l} \bullet \text{ reduzierte Gradientenmethoden} \\ \bullet \text{ Barriere-Verfahren} \end{array} \right.$$

- (*) Sind Verfahren, die für (O1)- und (O2)-Formulierungen brauchbar sind. Sie erzeugen Punktfolgen, die die Bedingungen nur im Grenzwert der Abstiegsfolge approximativ erfüllen.
- (**) Sind Verfahren, die nur zulässige Punkte erzeugen. Das ist i. Allg. nur möglich für (O3), wenn strikt zulässige Punkte existieren, oder für (O2), wenn die Gleichungsnebenbedingungen linear sind. In seltenen Fällen ist das auch für nichtlineare Gleichungsnebenbedingungen approximativ möglich.

Wozu verschiedene Verfahren?

- Meist sind die (*)-Verfahren schneller, die (**)-Verfahren zulässiger.
 - Die (**)-Verfahren erzeugen Folgen von zulässigen Punkten, d. h. selbst wenn das Verfahren aus Zeitgründen vorzeitig gestoppt werden muss, wird ein Lösungspunkt erzeugt, der die Nebenbedingung erfüllt. Das ist besonders wichtig für Anwendungen mit „harten“ Nebenbedingungen, d. h. solchen, die gar nicht verletzt werden dürfen, weil sonst die Lösung unbrauchbar wird.
- (*)-Verfahren sind problemlos anwendbar, wenn die Nebenbedingungen „weich“ sind, d. h. leichte Verletzungen der Nebenbedingungen nicht schlimm sind. Auch wenn das Ergebnis abgewartet werden kann, kann man (*)-Verfahren ohne Probleme verwenden.

Strafverfahren

Traditionellerweise werden diese Methoden auf Problem (O1) angewendet.

Bemerkung: Das ist auf zwei Arten möglich:

- Schlupfvariable
- $G(x) \leq 0 \iff G(x)_+ = 0$, aber $G(x)_+$ ist i. Allg. nicht C^1

Man wählt eine *Straffunktion*

$$\varphi: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}_+, \quad \varphi(0) = 0, \varphi'(0) \geq 0$$

$$f_\sigma(x) := f(x) + \sigma\varphi(\|F(x)\|)$$

Dabei sollte $\sigma\varphi$ schneller wachsen als f außerhalb von \mathcal{F} fällt. Man nennt σ den *Strafparameter*. Die Strafverfahren lösen dann das *Strafproblem*

$$(PP) \quad \begin{array}{ll} \min & f_\sigma(x) \\ \text{s.t.} & x \in [u, v] \end{array}$$

Ist $\sigma \gg 0$, so wird jede Unzulässigkeit hart bestraft, also wird (PP) Lösungen haben, deren Unzulässigkeit klein ist.

Beispiel

$$\begin{array}{ll} \min & f(x) = x_1^2 + \alpha x_2^2 \\ \text{s.t.} & F(x) = x_1^2 - x_2 = 0 \end{array} \quad (\alpha > -1 \text{ fix})$$

$$\Rightarrow x_1^2 = x_2 \Rightarrow f(x) = x_1^2 + \alpha x_1^2 = \underbrace{(1 + \alpha)}_{>0} x_1^2 \Rightarrow \hat{x} = (0, 0) \text{ ist Lösung}$$

$$\|F(x)\| = |x_1^2 - x_2| \Rightarrow f_\sigma(x) = f(x) + \sigma\varphi(\|F(x)\|) = x_1^2 + \alpha x_2^2 + \sigma\varphi(|x_1^2 - x_2|)$$

Etwa

$$\varphi_1(s) = s: \quad f_\sigma^1(x) = x_1^2 + \alpha x_2 + \sigma|x_1^2 - x_2|$$

$$\varphi_2(s) = s^2: \quad f_\sigma^2(x) = x_1^2 + \alpha x_2 + \sigma(x_1^2 - x_2)^2$$

$$f_\sigma^2(x):$$

$$\nabla f_\sigma^2(x) = \begin{pmatrix} 2x_1 + 2\sigma(x_1^2 - x_2) \cdot 2x_1 \\ \alpha - 2\sigma(x_1^2 - x_2) \end{pmatrix} = 0 \Rightarrow \begin{pmatrix} x_1 = 0, x_2 = \frac{\alpha}{-2\sigma} \\ 2\sigma(x_1^2 - x_2) + 1 = 0 \end{pmatrix} \Rightarrow x_\sigma = \left(0, -\frac{\alpha}{2\sigma}\right)$$

Im Grenzwert $\sigma \rightarrow \infty$ wird die exakte Lösung gefunden. Für σ endlich ist die Lösung nur eine Approximation der Genauigkeit $O(\sigma^{-1})$: $\hat{x} = x_\sigma + O(\sigma^{-1})$.

Man nennt φ_2 eine *inexakte Straffunktion*, weil für alle Strafparameter die Lösung $x_\sigma \neq \hat{x}$ ist.

4 Liniensuche, Abstiegsverfahren

$f_\sigma^1(x)$: (unangenehmer, weil $\|\cdot\|$ nicht C^1 ist)

$$x_2 = x_1^2 - z, \quad f_\sigma^1(x_1, z) = (1 + \alpha)x_1^2 - \alpha z + \sigma|z|$$

Ist $\sigma < |\alpha|$, dann ist f_σ^1 nach unten unbeschränkt. Für $\sigma > |\alpha|$ gilt

$$\min_{z, x_1} f_\sigma^1(x_1, z) = \underbrace{\min_{x_1} (1 + \alpha)x_1^2}_{\bar{x}_1=0} + \underbrace{\min_z \sigma|z| - \alpha z}_{\bar{z}=0} \Rightarrow \bar{x}_2 = \bar{x}_1^2 - \bar{z} = 0$$

Für $\sigma > |\alpha|$ ist $\bar{x} = \hat{x}$. Deshalb nennt man φ_1 eine *exakte Straffunktion*, weil für σ groß genug das Strafproblem dieselbe Lösung wie das ursprüngliche Problem hat.

Sei $(X, \|\cdot\|)$ ein normierter Raum. Dann ist der Dualraum $(X^*, \|\cdot\|^*)$ ein normierter Raum mit $\|z\|^* = \sup\{|z(x)| \mid \|x\| = 1\}$. Es gilt dann $|z^\top x| \leq \|z\|^* \|x\|$ und $\|\cdot\|^*$ heißt die zu $\|\cdot\|$ duale Norm.

Theorem 4.4.1 (i) Sei \hat{x} ein starkes lokales Minimum für (O1). Weiters sei z der Lagrange-Multiplikator für die Gleichungs-Nebenbedingungen, sodass

$$(**) \quad y = g(\hat{x}) - F'(\hat{x})^\top z$$

die Komplementaritätsbedingung

$$\begin{aligned} y_i &\geq 0 && \text{für } x_i = u_i < v_i \\ y_i &\leq 0 && \text{für } x_i = v_i > u_i \\ y_i &= 0 && \text{sonst} \end{aligned}$$

erfüllt. Gilt für φ

$$\varphi(0) = 0, \sigma\varphi'(0) > \|z\|^*,$$

dann ist \hat{x} eine Lösung es Strafproblems (PP).

(ii) Jede Lösung \bar{x} mit $F(\bar{x}) = 0$ löst (O1).

(iii) Sei \bar{x} eine Lösung von (PP), dann gibt es \bar{z} , sodass y gemäß (**) die Komplementaritätsbedingung erfüllt. Ist außerdem $\varphi'(0)\sigma > \|z\|^*$, dann gilt $F(\bar{x}) = 0$ und \bar{x} löst (O1).

Bemerkung: Theorem 4.4.1 besagt, dass für $\varphi'(0) > 0$ ein Strafparameter σ existiert (der groß genug ist), dass eine Lösung von (PP) auch eine Lösung von (O1) ist. Umgekehrt kann man jedes starke lokale Minimum so finden. Die Straffunktionen mit $\varphi'(0) > 0$ sind die exakten Straffunktionen. Nachteil der exakten Straffunktionen ist, wie gesagt, die mangelnde Differenzierbarkeit.

2 Probleme bei Strafverfahren

- Wahl von φ
- Wahl von σ

Wahl von σ : Ist σ zu groß, dann hat f_σ die Form eines sehr tiefen und steilen Tales, dessen „Boden“ der zulässige Bereich ist. Für großes σ sehen die Höhenlinien von f_σ etwa so aus:

BILD

Die Höhenunterschiede am Boden des Tales sind sehr klein im Vergleich mit den Höhenunterschieden an den „Bergflanken“.

$$\nabla f_\sigma(x) = \nabla f(x) + \sigma \varphi'(\|F(x)\|) \cdot \nabla \|F(x)\|$$

Ist σ sehr groß, dann dominiert der F -Term den ∇f numerisch, d. h. die Suchrichtungen nehmen vor allem Rücksicht auf die Zulässigkeit und nicht auf die Optimalität, d. h. sie sind meist fast orthogonal auf die Teilmannigfaltigkeit $F(x) = 0$. Daher macht der Suchalgorithmus sehr viele sehr kleine Zickzack-Schritte.

Ist σ zu klein, dann hat die Lösung von (PP) meist nichts mit der Lösung von (O1) zu tun und ist oftmals nicht einmal in der Nähe.

BILDER

Die Zulässigkeit wird dann oft nicht erreicht.

Üblicherweise wird σ im Verlauf des Lösungsprozesses adaptiv verändert: zuerst groß, um in die Nähe der Zulässigkeit zu kommen, und später immer kleiner, um die Steigung des Talbodens auch erfassen zu können.

Eine weitere Möglichkeit besteht darin, die Zielfunktion von (O1) abzuändern:

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) - \alpha^\top F(x) \quad (= L(x, \alpha)) \\ \text{(L1}_\lambda) \quad & \text{s.t. } F(x) = 0 \\ & x \in [u, v] \end{aligned}$$

Dann ist (L1 $_\lambda$) äquivalent zum Originalproblem (O1).

Aus den Optimalitätsbedingungen folgt sofort, dass der Lagrange-Multiplikator z_λ von F im Problem (L1 $_\lambda$) und der Lagrange-Multiplikator z von F in (O1) folgendermaßen zusammenhängen:

$$z_\lambda = z - \lambda$$

Haben wir einen Schätzwert u für z , so ist $\|z_\mu\|^* \ll \|z\|^*$. Dann kann man σ wesentlich kleiner machen. Gradienten- und Krümmungsinformation der Nebenbedingungen wandern in die Zielfunktion, und zwar bei guter Wahl von λ im richtigen Verhältnis.

$$f_\lambda(x) := f(x) - \lambda^\top F(x)$$

heißt *augmentierte Lagrange-Funktion*, und ein Verfahren, das (L1 $_\lambda$) zum Ausgangspunkt nimmt und nicht (O1), heißt *augmentiertes Lagrange-Verfahren*.

4 Liniensuche, Abstiegsverfahren

Die Schätzwerte λ bestimmt man meist in jedem Schritt nach der approximativen Lösung von (PP) neu. Hier ist die Zielfunktion von (PP) natürlich

$$f_{\sigma,\lambda}(x) = f(x) - x^\top F(x) + \sigma\varphi(\|F(x)\|)$$

BILDER

Adaptive Wahl von σ während des Lösungsprozesses

Wichtig ist, dass (PP) nicht vollständig gelöst wird, sondern die Lösung abgebrochen wird, sobald $\|F(x)\|$ klein genug ist. Dann darf σ höchstens so weit verkleinert werden, dass $g_{\bar{\sigma}}$ ungefähr in dieselbe Richtung wie g_σ zeigt.

Wahl von φ : Eine Entscheidung, die zu treffen ist, ist die Wahl exakt oder inexakt. Typische φ sind:

$$\varphi(t) = \log\left(\frac{t_{\max}}{t_{\max} - t}\right)$$

$$\varphi(t) = \begin{cases} \frac{t}{t_{\max} - t} & \text{für } t < t_{\max} \\ \infty & \text{sonst} \end{cases}$$

Dabei ist $\lim_{t \rightarrow t_{\max}} \varphi(t) = \infty$ und t_{\max} die maximale Abweichung.

Beide φ steigen für größere t sehr rasch an, sorgen also dafür, dass die Lösung von (PP) nicht zu weit vom zulässigen Bereich entfernt ist.

φ ist konvex, $\varphi(0) = 0$, $\varphi'(0) \geq 0$. Beide sind *exakte Straffunktionen*.

Korollar 4.4.2 (i) Sei x ein starkes lokales Minimum von (O1) mit Multiplikator z , φ eine der beiden Wahlen von oben und $\sigma > t_{\max}\|z - \lambda\|^*$. Dann ist x eine Lösung des Strafproblems

$$(PP_{\lambda,\sigma}) \quad \begin{array}{ll} \min & f_{\sigma,\lambda}(x) \\ \text{s.t.} & \|F(x)\| < t_{\max} \\ & x \in [u, v] \end{array}$$

(ii) Sei x eine Lösung von $(PP_{\lambda,\sigma})$ mit Multiplikator z_λ . Gilt $\sigma > t_{\max}\|z_\lambda\|^*$, dann löst x auch (O1).

(iii) ist f nach unten beschränkt auf

$$C := \{x \in [u, v] \mid \|F(x)\| \leq t_{\max}\},$$

dann ist $f_{\sigma,\lambda}$ auf C nach unten beschränkt. Ist außerdem $C \neq \emptyset$ kompakt, dann hat das Strafproblem eine globale Lösung.

Inexakte Straffunktionen

$$\begin{aligned} \varphi(t) &= t^2 \\ \varphi(t) &= e^{t^2} \\ \varphi(t) &= \begin{cases} \left(\frac{t}{t_{\max}-t}\right)^2 & t < t_{\max} \\ \infty & \text{sonst} \end{cases} & \varphi(0) = 0, \varphi'(0) = 0 \\ \varphi(t) &= \begin{cases} \log\left(\frac{t_{\max}}{t-t_{\max}}\right) & t < t_{\max} \\ \infty & \text{sonst} \end{cases} \end{aligned}$$

Vorteil: Inexakte Straffunktionen sind glatter entlang $F(x) = 0$. Das ist für viele Verfahren wichtig, weil die Optimalitätsbedingungen 1. Ordnung gelten. Die nicht-glatten Optimalitätsbedingungen sind viel komplizierter und weniger leicht auszunutzen.

Barriereverfahren

$$(O3) \quad \begin{aligned} \min \quad & f(x) \\ \text{s.t.} \quad & F(x) < 0 \\ & x \in [u, v] \end{aligned}$$

Das ist üblicherweise die Grundlage für Barriere-Verfahren. Diese haben dieselbe Idee wie Strafverfahren, sie verändern aber die Zielfunktion bereits innerhalb des zulässigen Bereichs.

$$(BP) \quad \begin{aligned} \min \quad & f_{\tau}(x) := f(x) + \frac{1}{\tau} \bar{\psi}(F(x)) = f(x) + \frac{1}{\tau} \sum_{j=1}^m \psi(-F_j(x)) \\ \text{s.t.} \quad & x \in [u, v] \\ & \psi: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}_+ \text{ mit } \lim_{t \searrow 0} \psi(t) = \infty, \psi(s) = \infty \text{ für } s < 0 \end{aligned}$$

Man nennt τ Barriereparameter und ψ Barrierefunktion. Jede Lösung \hat{x} von (BP) ist strikt zulässig für (O3), d. h. $F(\hat{x}) < 0$. Je größer der Barriere-Parameter, desto näher darf die Lösung an die Aktivität heran. Die Wahl von τ ist ähnlich wie für Strafverfahren.

Typische Barrierefunktionen:

$$\begin{aligned} \psi(t) &= \begin{cases} \log t & t > 0 \\ \infty & t \leq 0 \end{cases} & \text{logarithmische Barrierefunktion} \\ & & \text{(meist verwendet)} \\ \psi(t) &= \begin{cases} \frac{1}{t} & t > 0 \\ \infty & \text{sonst} \end{cases} \end{aligned}$$

4 Liniensuche, Abstiegsverfahren

Die logarithmische barrierefunktion wird üblicherweise für sog. *Innere-Punkte-Verfahren* verwendet, die eine Folge strikt zulässiger Punkte generieren, die im Grenzwert gegen die Lösung strebt. Innere-Punkte-Verfahren sind derzeit die Standardmethoden zur Lösung linearer und konvexer Optimierungsprobleme.

5 Newtonartige Verfahren

5.0 Einschub: Nullstellen mehrdimensionaler nichtlinearer Gleichungssysteme

5.0.1 Problemstellung

$f: E \rightarrow F$, $E, F \subseteq \mathbb{R}^m$, f stetig

Für $\eta \in F$ suchen wir ein $\zeta \in E$ mit $f(\zeta) = \eta$. Ist $h: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ stetig differenzierbar und $\zeta \in \setminus^n$ ein Minimum, dann ist $\nabla h(\zeta) = 0$.

BILD

5.0.2 Fixpunktverfahren

Newton-Verfahren

Sei $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$, dann ist

$$f(x) \approx f(y) + Df(y)(x - y)$$

Wir setzen $f(y) + Df(y)(x - y) = 0$ und erhalten $x_{i+1} = x_i - (Df(x_i))^{-1}f(x_i)$, sofern $Df(x_i)$ regulär ist. Das wiederholen wir, bis $\|f\| < \varepsilon$ ist.

Algorithmus 5.0.1 Allgemeines Newton-Verfahren

Wähle x_0 und Toleranz ε

$x = x_0$

$v = f(x)$

while $\|v\| \geq \varepsilon$ **do**

 Berechne $Df(x)$; Aufwand $O(n^2)$

 Löse $Df(x)w = v$; Aufwand $O(n^2)$

$x = x - w$

$v = f(x)$

end while

Theorem 5.0.2 (Kantorovich: lokale Konvergenz des Newton-Verfahrens)

Sei $U \subseteq \mathbb{R}^n$ offen, C konvex mit $\bar{C} \subseteq U$, $f: U \rightarrow \mathbb{R}^n$ an allen $x \in C$ differenzierbar und an allen $x \in U$ stetig. gibt es für ein $x_0 \in C$ positive Konstanten $r, \alpha, \beta, \gamma, h$ mit

(i) (a) $B_r(x_0) \subseteq C$

5 Newtonartige Verfahren

(ii) (b) $h := \frac{\alpha\beta\gamma}{2} < 1$

(iii) (c) $r := \frac{\alpha}{1-h}$

wobei $B_r(x) = \{y \in \mathbb{R}^m \mid \|x - y\| < r\}$ und

(i) (d) $\|Df(x) - Df(y)\| \leq \gamma\|x - y\| \quad \forall x, y \in C$

(ii) (e) für alle $x \in C$ ist $Df(x)$ regulär und es gilt $\|(Df(x))^{-1}\| \leq \beta$

(iii) (f) $\|(Df(x_1))^{-1}f(x_0)\| \leq \alpha$,

so gilt:

- (i) (1) Wählt man x_0 als Startwert, so ist jedes Element der durch Iteration erzeugten Folge

$$x_{i+1} = x_i - (Df(x_i))^{-1}f(x_i)$$

wohldefiniert und es gilt $x_i \in B_r(x_0) \quad i \geq 0$.

- (ii) (2) Der Grenzwert $\lim_{k \rightarrow \infty} x_k = \zeta$ existiert, $\zeta \in \overline{B_r(x_0)}$ und $f(\zeta) = 0$.

- (iii) (3) Für alle $k > 0$ gilt

$$\|x_n - \zeta\| \leq \alpha \frac{k^{2^k} - 1}{1 - k^{2^k}}$$

Wegen der Voraussetzung $0 < k < 1$ ist das Verfahren lokal quadratisch konvergent.

Man kann zeigen: Unter etwas stärkeren Voraussetzungen ist ζ die einzige Nullstelle in dieser Umgebung.

Um etwas Aufwand zu sparen, kann man Df konstant halten (was allerdings die Konvergenzeigenschaften verschlechtert):

$$x_{i+1} = x_i - (Df(x_0))^{-1}f(x_i)$$

Algorithmus 5.0.3 Allgemeines Newton-Verfahren

Wähle x_0 und Toleranz ε

$$x = x_0$$

Berechne $A = Df(x_0)$, Zerlegung von A

$$v = f(x)$$

while $\|v\| \geq \varepsilon$ **do**

 Löse $Aw = v$; Aufwand $O(n^2)$ bei bejkannter Zerlegung

$$x = x - w$$

$$v = f(x)$$

end while

Nachteil: Die Konvergenz ist nur noch linear (wenn überhaupt).

Verbessertes Newton-Verfahren

Beispiel $f(x) = 0; f(x) := \arctan(x)$

BILD

$$s_{k+1} = x_k - (1 + x_k^2) \arctan(x_k)$$

Wählt man x_0 so, dass $\arctan(|x_0|) \geq \frac{2|x_0|}{1+x_0^2}$, so folgt $\lim_{k \rightarrow \infty} |x_k| \rightarrow \infty$. Die Lösung dafür ist eine Liniensuche.

Algorithmus 5.0.4 Newton-Verfahren mit Liniensuche

wähle x_0 , Toleranz ε

bestimme maximale Iterationszahlen K und J

$k = 0$

while $\|f(x_k)\|_2 \geq \varepsilon$ und $k < K$ **do**

 berechne $Df(x_k)$

 löse $Df(x_k)d_k = f(x_k)$

 Liniensuche, z. B. Armijo-Liniensuche

 berechne $\gamma_k = \frac{1}{\kappa_2(Df(x))}$

$h_k(\tau) = \|f(x_k) - \tau d_k\|_2^2$

$z_k = \frac{1}{4} \gamma_k \|d_k\|_2 \|\nabla h(x_k)\|_2$

$j = 0$

while $h_n(2^j) > h_n(0) - 2^{-j} z_n$ **do**

$j = j + 1$

end while

 bestimme x_k , sodass $\|f(x_k - \lambda_k d_k)\|_2^2 = \min_{0 \leq i \leq j} h_k(2^{-i})$

$x_{k+1} = x_k - \lambda_k d_k$

end while

BILD

Theorem 5.0.5 (Newton-Verfahren mit Liniensuche)

Seien $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$, $x_0 \in \mathbb{R}^n$, $h(x) := \|f(x)\|_2^2$. Gelten die Voraussetzungen

- (a) $K := \{x \mid h(x) \leq h(x_0)\}$ ist kompakt
- (b) f ist auf einer Umgebung von K stetig differenzierbar
 - (i) Für alle $x \in K$ existiert $(Df(x))^{-1}$,

so ist $(x_k)_k$ wohldefiniert und erfüllt

- (1) $x_k \in K \quad \forall k \in \mathbb{N}$ und $(x_k)_k$ besitzt mindestens einen Häufungspunkt $\bar{x} \in K$.
- (2) Jeder Häufungspunkt \bar{x} von $(x_k)_k$ ist Nullstelle von f .

5.1 Quadratische Modelle

BILD

$$f(x+s) = f(x) + g(x)^\top s + \frac{1}{2} s^\top G(x) s + o(\|s\|)$$

Wir approximieren f lokal um x durch eine *quadratische Funktion*

$$q(x+s) := f(x) + g(x)^\top s + \frac{1}{2} s^\top B s$$

mit $B \approx G(x)$ symmetrisch. Ist B positiv definit, so lässt sich das Minimum von q leicht berechnen: $p := -B^{-1}g$, vgl. im Newton Verfahren $x_{i+1} = x_i - (Df(x_i))^{-1} f(x_i)$. Quadratische Modelle entsprechen Newton-Verfahren für $g = f'^\top$. Ist B positiv definit, dann auch B^{-1} , also $g^\top p = g^\top B^{-1}g < 0$, also ist die Abstiegsbedingung erfüllt, d. h. p ist eine gute Suchrichtung.

Wie lange soll man $s = \alpha \cdot p$ wählen, um die Liniensuche zu beginnen, um Funktionsauswertungen zu sparen?

$$\alpha_{\text{init}} = \begin{cases} 1 & \text{wenn das alte } \alpha \text{ zu groß war} \\ \min\left(1, \frac{(g^\top s)_{\text{alt}}}{g^\top p}\right) & \text{sonst} \end{cases}$$

Ist B schlecht konditioniert, dann bedeutet $-g^\top s \leq \text{const}$ nicht unbedingt, dass s auch klein ist. Daher schränken die meisten guten Verfahren s auf einen *Vertrauensbereich* ein:

$$\|s\| \leq \sigma$$

Dieser Vertrauensbereich gibt an, wie weit dem quadratischen Modell zu trauen ist. Also ist die Schritttrichtung nicht das globale Minimum von q , sondern

$$(*) \quad \begin{array}{ll} \min & q(x+p) \\ \text{s.t.} & \|p\| \leq \sigma \end{array}$$

Vorteile:

1. Macht gleichmäßig mehr Sinn
2. funktioniert auch, wenn B nicht positiv definit ist
 $\{p \mid \|p\| \leq \sigma\}$ ist kompakt
 Ist $\|B^{-1}y\| \leq \sigma$ und B positiv definit, dann hat (*) als Lösung $p = -B^{-1}g$.

Algorithmus 5.1.1 Newtonartige Methode

wähle $x^{(0)}$ als Startwert
wähle α^1 so, dass es mit der Goldstein-Schranke μ'' zusammenpasst: $\mu'' < 1 - \frac{\alpha'}{2}$
(z. B. $\alpha' = \frac{1}{\mu''} - 1$)
 $\ell = -1, f_0 = f(x^m), \alpha = 1, g_0 = g(x^{(0)}), \gamma_0 = 0$
while $f_{\ell+1} \neq f_\ell$ **do**
 Berechne eine Approximation B_ℓ der Hesse-Matrix $G(x^{(\ell)})$
 Löse $B_\ell p^\ell = -g_\ell$ oder das Problem des vertrauensbereichs

$$\min q(x^{(\ell)} + p)$$

s.t. $\|p\| \leq \sigma_\ell$ (σ_ℓ ist ein bel. Parameter)

$$\gamma_\ell = -(g_\ell)^\top p_\ell^{(\ell)}$$

Ist $\gamma_\ell \leq 0$ stop
($g = 0 \Rightarrow$ fertig; $g \neq 0, \gamma_\ell \leq 0$: keine Abstiegsrichtung)
if $\alpha < \alpha'$ **then**
 $\alpha = \min\left(1, \frac{\gamma_{\ell-1}}{\gamma_\ell}\right)$
else
 $\alpha = 1$
end if
Führe eine effiziente Liniensuche mit Suchrichtung αp^ℓ durch und ändere dabei α ab.
Setze σ_ℓ entsprechen α, σ_ℓ neu.
 $x_{\ell+1} = x_\ell + \alpha p$
 $f_{\ell+1} = f(x_{\ell+1})$
 $g_{\ell+1} = g(x_{\ell+1})$
 $\gamma_\ell = \alpha \gamma_\ell$
end while

5.1.1 Gedämpftes Newton-Verfahren

$$B = G(x)$$

Vorteil

+ sehr gute quadratische Approximation

Nachteile

– In jedem Schritt muss man $G(x)$ bestimmen, d. h. n^2 Zahlen und $n^2 \cdot 2$ Ableitungen bestimmen (händisch oder automatische Differentiation: $O(n^3)$ in jedem Schritt)

5 Newtonartige Verfahren

- In jedem Schritt ist der Aufwand für die Faktorisierung $O(n^3)$. Man kann den Aufwand von $O(n^3)$ jedoch mittels dünn besetzter Matrizen umgehen.

5.1.2 Modifiziertes Newton-Verfahren

Cholesky-Zerlegung

Ist A symmetrisch und positiv definit, dann gibt es eine untere Dreiecksmatrix L mit $A = LL^\top$. Was ist jedoch, wenn A nicht positiv definit ist? Eine Lösung besteht darin, zu A eine Diagonalmatrix D zu addieren, sodass $A + D$ positiv definit ist. So erhält man die *modifizierte Cholesky-Zerlegung*:

$$A + D = LL^\top \iff A = LL^\top - D$$

Während der Cholesky-Zerlegung dividieren wir durch $\sqrt{L_{kk}}$. Ist $L_{kk} \leq 0$, dann setzen wir $L_{kk} := L_{kk} + D_k$, sodass $L_{kk} > 0$ wird.

Wir verwenden $B = G(x)$, was immer symmetrisch ist.

- Wenn B positiv definit ist (in der Nähe eines nicht degenerierten lokalen Minimums), dann existiert die Cholesky-Zerlegung $B = LL^\top$ und das gedämpfte Newton-Verfahren kann angewendet werden.
- Wenn B nicht positiv definit ist, dann gibt es eine modifizierte Cholesky-Zerlegung $B = LL^\top - E$ (z. B. mit einer Diagonalmatrix E) und

$$f(x + s) = q(x + s) - \underbrace{\frac{1}{2}s^\top Es + o(\|s\|^2)}_{O(\|s\|^2)}$$

Dann gilt meist $f(x + s) \leq q(x + s)$ (immer asymptotisch für kleines s).

Die modifizierte Cholesky-Zerlegung ist mit vernünftigem Aufwand für dünnbesetzte Matrizen durchführbar.

5.1.3 Diskretes Newton-Verfahren

$$\lim_{k \rightarrow 0} \underbrace{g(x + k_n) - g(x)}_n = G(x) \cdot w$$

$$\tilde{G}e^{(i)} = k_i^{-1}(g(x + k_i e^{(i)}) - g(x))$$

Die Genauigkeit ist $\text{eps}^{\frac{1}{2}}$; genauer: der zentrale Differenzenquotient hat Genauigkeit $\text{eps}^{\frac{2}{3}}$ (aber doppelt so viele Quotienten)

Vorteil

- + Man muss nichts für die 2. Ableitungen programmieren, sondern nur für die Gradienten.

Nachteile

- Man braucht viele Gradienten-Auswertungen (n bzw. $2n$ bzw. noch mehr für Extrapolationsverfahren).

Man behilft sich oft damit, dass man B für mehr als einen Schritt konstant lässt. Dadurch wird der Aufwand geringer, die Konvergenz verschlechtert sich jedoch.

Der Satz von Taylor liefert

$$f(x) - f(x_0) = g(x)(x - x_0) + (x - x_0)^\top G(x)(x - x_0) + o(\|x - x_0\|^2)$$

Das liefert eine Schätzung für $G \cdot w$ (für kleine n), und $Gp = g$ kann durch Iterationsverfahren gelöst werden, man benötigt dazu nur Matrix-Vektor-Produkte.

5.1.4 Quasi-Newton-Verfahren

Für eindimensionale Nullstellen-Verfahren kann das Sekantenverfahren mit

$$\frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}$$

statt $f'(x)$ verwendet werden.

Im mehrdimensionalen Fall gilt die Quasi-Newton-Gleichung für Nullstellen:

$$f(x_1) - f(x_0) = B(x_1 - x_0)$$

In unserem Fall lautet sie $g(x_1) - g(x_0) = B(x_1 - x_0)$, wobei B für $n > 1$ nicht eindeutig bestimmt ist. B soll immer noch eine Approximation für die Hesse-Matrix sein.

Am Startpunkt macht die Quasi-Newton-Gleichung keinen Sinn, daher kann irgendeine Näherung $B \approx G(x)$ verwendet werden, z. B. durch Differenzenquotienten oder einfach $B = I$.

In den weiteren Schritten bestimmt man B so, dass

- 1) B symmetrisch ist
- 2) B sich von B_{alt} nur geringfügig unterscheidet, d. h. $B - B_{\text{alt}}$ von niedrigem Rang ist

Dafür gibt es folgende Gründe:

Der Hauptaufwand des Newton-Verfahrens besteht aus zwei Punkten:

- a) Berechnen von $G(x) \approx B$ (mit n^2 Ableitungen und einem Aufwand von $O(n^3)$)
- (i) Faktorisieren von LL^\top (Cholesky-Zerlegung mit Aufwand $O(n^3)$)

Reduzieren:

5 Newtonartige Verfahren

- a) da z. B. Matrizen vom Rang 1 durch Bestimmung eines Vektors p ausgerechnet werden können ($A = pp^\top$)
- b) dadurch, dass aus der Zerlegung $B_{\text{alt}} = L_{\text{alt}}^\top L_{\text{alt}}$ und p die Zerlegung $LL^\top = B + pp^\top$ mit Aufwand $O(n^2)$ berechnet werden kann.

Vorteil

+ Jeder Schritt hat geringeren Aufwand als das klassische Newton-Verfahren.

Leider verbessert sich die Güte der Approximation $G(x) \approx B$ i. Allg. nicht mit fortschreitender Iterationszahl. In diesem Fall wird mit einer Schätzung für B weitergemacht. Für Nullstellen gibt es das Rang-1-Verfahren von Broyden; wir wollen hier Symmetrie und positive Definitheit erhalten und brauchen dazu mindestens Rang 2.

Formel von Oren-Luenberger

$$B_{k+1} = \psi(\gamma_k, \theta_k, B_k, p_k, q_k)$$

Dabei ist

$$\psi(\gamma, \theta, H, p, q) = \gamma H + \left(1 + \gamma \theta \frac{q^\top H q}{p^\top q}\right) \frac{pp^\top}{p^\top q} - \gamma \frac{1 - \theta}{g^\top H q} (Hq)(q^\top H) - \frac{\gamma \theta}{p^\top q} (pq^\top H + Hqp)$$

$$\text{für } p^\top q \neq 0, q^\top H q \neq 0$$

$$p_k = x_{k+1} - x_k$$

$$q_k = g_{k+1} - g_k$$

$$\gamma_k > 0 \text{ und } \theta_k \geq 0 \text{ beliebig}$$

$B_{k+1} - B_k = \Delta_k$ hat rang 2 und erfüllt die QN-Gleichung. Da B_k symmetrisch und positiv definit ist, ist auch B_{k+1} symmetrisch und positiv definit.

Spezialfälle

DFP (Davidson-Fletcher-Powell): $\gamma_k \equiv 1, \theta_k \equiv 0$

BFGS (Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shannon): $p_k \equiv 1, \theta_k \equiv 1$

Es gibt zwei Varianten von BFGS, nämlich L-BFGS (limited memory BFGS), das eine spezielle Weiterentwicklung von BFGS für sehr hochdimensionale Probleme darstellt. Die Idee dabei ist, die quadratische Approximation und die Bestimmung der Suchrichtung auf immer wechselnde niedrigdimensionale Teilräume einzuschränken.

Nachteil: Das funktioniert nur für unbeschränkte Probleme.

Vorteil: Vorkonditionierung zur Beschleunigung der Konvergenz ist möglich.

Die zweite Variante, L-BFGS-B, kann Probleme mit Schranken-Nebenbedingungen lösen, dafür muss man auf Vorkonditionierung verzichten.

5.2 SQP-Verfahren

Die Abkürzung SQP steht für Sequential Quadratic Programming. Man löst ein Optimierungsproblem durch eine Folge approximierender quadratischer Probleme:

$$\begin{aligned} \min \quad & x^\top Qx + b^\top x \quad (+c) \\ \text{s.t.} \quad & Ax \leq d \end{aligned}$$

Wir betrachten das Optimierungsproblem

$$\begin{aligned} \text{(OP)} \quad \min \quad & f(x) \\ \text{s.t.} \quad & F_i(x) \leq 0 \quad i = 1, \dots, n \end{aligned}$$

Die Nebenbedingung der Gleichung kann man z. B. umschreiben zu

$$g(x) = 0 \rightarrow g(x) \in [-\varepsilon, \varepsilon]$$

Mit $L(x, \lambda) = f(x) + \lambda^\top F(x)$ definieren wir das duale Problem von (OP) als

$$\begin{aligned} \text{(DP)} \quad \max_{\lambda} \quad & L(x, \lambda) \\ \text{s.t.} \quad & \nabla_{\lambda} L(x, \lambda) = 0 \end{aligned}$$

Für $\lambda \geq 0$ gilt $L(x, \lambda) \leq f(x)$. Das Optimierungsproblem

$$\begin{aligned} \text{(RP)} \quad \min \quad & L(x, \lambda) \\ \text{s.t.} \quad & F(x) \leq 0 \\ & \lambda \geq 0 \end{aligned}$$

ist eine Relaxation von (OP), die sog. *Lagrange-Relaxation*.

Proposition 5.2.1

Es gilt

$$\begin{aligned} \nabla_{(x,\lambda)} L(x, \lambda) &= \begin{pmatrix} \nabla f(x) + F'(x)^\top \lambda \\ F(x) \end{pmatrix} \\ \nabla_{(x,\lambda)}^2 L(x, \lambda) &= \begin{pmatrix} \nabla_{xx}^2 L(x, \lambda) & F'(x) \\ F'(x)^\top & 0 \end{pmatrix} \\ \nabla_{xx}^2 L(x, \lambda) &= \nabla^2 f(x) + \sum_{i=1}^m \lambda_i \nabla^2 F_i(x) \end{aligned}$$

Beweis. Nachrechnen

□

5 Newtonartige Verfahren

Wir nehmen für das Verfahren an, dass die Constraint Qualification „ F' (hat x) hat vollen Rang“ erfüllt ist. Dann gelten klarerweise die Kuhn-Tucker-Bedingungen. Außerdem setzen wir voraus, dass $s^\top \nabla_{xx}^2 L(\hat{x}, \lambda) s > 0$ für alle $0 \neq s \in \mathbb{R}^n$ mit $F'_i(\hat{x})s = 0$ ist, d. h. die hinreichenden Optimalitätsbedingungen 2. Ordnung mögen gelten.

Proposition 5.2.2

Sei $x \in \mathbb{R}^n$, $\lambda \geq 0$ und $d_x \in \mathbb{R}^n$, $d_\lambda \geq 0$, $\lambda, d_\lambda \in \mathbb{R}^m$. Unter den zuvor gemachten Voraussetzungen definieren wir die quadatische Approximation von L bei (x, λ) durch

$$q(d_x, d_\lambda) = L(x, \lambda) + \nabla f(x) d_x + F(x)^\top d_\lambda + \frac{1}{2} d_x^\top \nabla_{xx}^2 L(x, \lambda) d_x$$

und es gilt

$$q(d_x, d_\lambda) = L(x + d_x, \lambda + d_\lambda) + o(\|(d_x, d_\lambda)\|_2^2).$$

Für $A(x) = F'(x)^\top$ und $b(x) = F(x)$ gilt

$$A(x) d_x + b(x) = F(x + d_x) + o(\|d_x\|_2)$$

Beweis. Satz von Taylor □

Proposition 5.2.3

Unter obigen Voraussetzungen ist das Optimierungsproblem

$$\begin{aligned} \text{(QP)} \quad & f(x) + \min_{d_x} \nabla f(x) d_x + \frac{1}{2} d_x^\top \nabla_{xx}^2 L(x, \lambda) d_x \\ \text{s.t.} \quad & f(x) + F'(x)^\top d_x \leq 0 \end{aligned}$$

eine lokale Approximation des Optimierungsproblems (RP). Seine Lösung d_x wird *SQP-Schritt bei (x, λ)* genannt.

Beweis. Seien $x \in \mathbb{R}^n$, $\lambda, d_\lambda \in \mathbb{R}^m$, $\lambda \geq 0$, $d_\lambda \geq 0$ fix (mit $\lambda + d_\lambda \geq 0$). Dann ist

$$\begin{aligned} \min_{d_x} \quad & q(d_x, d_\lambda) \\ \text{s.t.} \quad & A(x) d_x + b(x) \leq 0 \\ & \lambda + d_\lambda \geq 0 \end{aligned}$$

eine lokale Approximation von (RP) wegen Proposition 5.2.2.

$$\begin{aligned} q(x, d_x) &= L(x, \lambda) + \nabla f(x) d_x + F(x)^\top d_\lambda + \frac{1}{2} d_x^\top \nabla_{xx}^2 L(x, \lambda) d_x \\ &= \underbrace{L(x, \lambda)}_{f(x) + F(x)^\top \lambda} + F(x)^\top d_\lambda + \nabla f(x) d_x + \frac{1}{2} d_x^\top \nabla_{xx}^2 L(x, \lambda) d_x \\ &= \underbrace{F(x)^\top (\lambda + d_\lambda)}_{\text{konstant}} + f(x) + \nabla f(x) d_x + \frac{1}{2} d_x^\top \nabla_{xx}^2 L(x, \lambda) d_x \end{aligned}$$

$$A(x) d_x + b(x) = F(x) + F'(x)^\top d_x$$

$$\lambda + d_\lambda \geq 0 \quad \text{ist automatisch erfüllt.}$$

□

Mit der Voraussetzung der positiven Definitheit ist (QP) konvex, kann also effizient gelöst werden. Wenn der Punkt x , an dem (QP) gebildet wird, strikt zulässig ist, dann besitzt auch (QP) einen strikt zulässigen Punkt.

Sonst kann es nämlich passieren, dass (QP) unzulässig ist:

BILD

$$F(x) = \begin{pmatrix} -x^2 + 4 \\ x - 1 \end{pmatrix}, x_k = 1$$

$$0 \geq \begin{pmatrix} F_1(x_k) + F'_1(x_k)(x - x_k) \\ F_2(x_k) + F'_2(x_k)(x - x_k) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 - 2(x - 1) \\ x - 1 \end{pmatrix}$$

$$x - 1 \leq 0 \iff x \geq 1$$

$$3 - 2(x - 1) \leq 0 \iff x \geq \frac{5}{2}$$

ist inkonsistent.

Die Lösung von (QP) liefert uns d_x , die neue Suchrichtung, und Multiplikatoren μ für die linearen Nebenbedingungen. Die Multiplikatoren werden im nächsten Schritt als Approximation für λ verwendet, während in vielen Verfahren in Richtung d_x eine Liniensuche durchgeführt.

Theorem 5.2.4

Unter obigen Voraussetzungen (CQ, positive Definitheit) konvergiert das SQP-Verfahren (bei effizienter Liniensuche lokal quadratisch (d. h. der Startwert (x_1, λ_1) ist nahe genug an $(\hat{x}, \hat{\lambda})$).

5 Newtonartige Verfahren

Der nachteil des SQP-Verfahrens ist die Notwendigkeit, in jedem Iterationsschritt die Hesse-Matrix von $L(x, \lambda)$ (also $\nabla_{xx}^2 L(x, \lambda)$) bestimmen zu müssen. Es gibt daher Varianten, die BFGS-Updates zur Approximation von $\nabla_{xx}^2 L$ verwenden. Bei geeigneter Konstruktion konvergieren diese lokal superlinear.

Bis jetzt ist das SQP-Verfahren nur lokal konvergent, d. h. der Startpunkt x_0 muss in einer ausreichend kleinen Umgebung um die lokale Lösung x^* liegen. Um das Verfahren global konvergent zu machen, führt man Liniensuchen ein. Da Nebenbedingungen vorhanden sind und die Zielfunktion wahrscheinlich außerhalb des zulässigen Bereichs abfällt, benötigt man ein anderes Maß für die Güte eines Iterationspunktes (x_k, λ_k) , und zwar ein Maß, das nicht einfach der Wert der Lagrange-Funktion ist.

Eine Idee wäre es, die Verletzung der KKT-Bedingungen als Maß für die „Nicht-Güte“ des Punktes zu wählen (als Ersatz für die Zielfunktion in der Liniensuche):

$$\Phi(x, \lambda) = \|\nabla f(x) - F'(x)^\top \lambda\|_2^2 + |\lambda^\top F(x)|$$

Das Problem mit dieser Wahl ist, dass die verschiedenen KT-Punkte nicht unterschieden werden, also etwa auch Maxima gefunden werden. Funktionen wie $\Phi(x, \lambda)$, die ihre Bedeutung für das Verfahren im Ersatz der Zielfunktion in der Liniensuche haben, nennt man *Merit-Funktionen*.

Da $\Phi(x, \lambda)$ den Wert der Zielfunktion zu wenig betont, wählt man stattdessen für die Merit-Funktion eine Straf-Funktion, z. B. eine L_1 -exakte Straf-Funktion

$$\Psi(x, \lambda) := f(x) + \sigma \|F(x)_+\|_1$$

Der Nachteil bei der Wahl von Ψ zur Bewertung des Abstiegs in der Liniensuche ist der sog. *Maratos-Effekt*: Durch die Nicht-Differenzierbarkeit von Ψ entsteht nahe der Nebenbedingung ein „Grat“

BILDER

Ist F nicht linear, dann sieht der Grat von oben aus wie eine tiefe gewundene Schlucht.

BILD

Dadurch finden geradlinige Liniensuchen mit Ψ oftmals nur sehr kurze Schrittweiten. Das führt zu langsamer Konvergenz. Um das zu vermeiden, könnte man z. B. Krümmungsinformation zur Liniensuche hinzunehmen, also eine gekrümmte Liniensuche machen. Das verhindert in den meisten Fällen den Maratos-Effekt.

Eine andere Möglichkeit, das SQP-Verfahren global konvergent zu machen, ist der Verzicht auf Liniensuche und stattdessen ein Maß für die Approximationsgüte des Problems (QP) einzuführen. Hinzugefügt wird eine Vertrauensregion, die die Gültigkeit des quadratischen Modells einschränkt.

$$\begin{array}{ll} \min & q(d_x, d_\lambda) \\ \text{(QP)} & \text{s.t. } A(x)d_x + b(x) \leq 0 \\ & \|d_x\|_2 \leq \tau \end{array}$$

Der Vertrauensregionsparameter τ ist nicht fix, sondern wird adaptiv angepasst: Werden einige Schritte d_x hintereinander akzeptiert, wird τ vergrößert. Entsteht ein inakzeptabler Schritt, so wird er verworfen und stattdessen τ verkleinert.

Die dritte Möglichkeit, ein SQP-Verfahren konvergent zu machen, ist durch das Einführen eines sog. *Filters*. Das führt zu einem Filterverfahren:

BILD

x_ℓ dominiert x_{k+1} , daher wird x_{k+1} nicht akzeptiert. Die Sammlung der Punkte, die von keinem anderen dominiert werden, nennt man Filter. Man kann den Filter auf verschiedene Arten auswerten:

- Extrapolation der Pareto-Front
- Wahl eines Filterpunktes als Ausgangspunkt für die nächste Iteration

Eine Kombination der Verfahren ist auch möglich.

Zusammenfassung der SQP-Methoden

1. Startpunkt x_0 und Schätzwert λ_0 wählen; $k = 0$
2. QP aufstellen
3. d_x aus QP berechnen
4. Schrittweite α bestimmen
 - Liniensuche
 - Vertrauensregion
 - $\alpha = 1$
5. $x_{k+1} = x_k + \alpha d_x$
 $\lambda_{k+1} = \hat{\lambda}$ aus (QP)
6. Filter anwenden, τ anpassen usw.; $k = k + 1$
7. Abbruchbedingung (KT) überprüfen
8. falls die Abbruchbedingung nicht erfüllt ist, weiter bei 2.

Um konvexe Optimierungsprobleme zu lösen, gibt es noch die Klasse der *Inneren-Punkte-Verfahren*. Diese werden in einer eigenen Vorlesung behandelt.

6 Variationsrechnung

6.1 Einführende Beispiele

Kettenlinie

BILD

Das Kabel (die Kette) hängt im Wesentlichen frei. Es wird unter Schwerkrafteinfluss eine Lage einnehmen, sodass die potenzielle Energie minimal sein wird. Die potenzielle Energie eines Körpers mit Masse m im Schwerkraftfeld nahe der Erde ist

$$E_{\text{pot}} = m \cdot g \cdot h,$$

wobei h die Höhe über der Erdoberfläche sei.

$$E_{\text{pot}} = \int_0^c \rho g y(s) ds$$

Dabei ist ρ die Dichte, g die Erdbeschleunigung, y die Höhe und s die Bogenlänge. In kartesischen Koordinaten lautet die Gleichung

$$E_{\text{pot}} = \int_{x_0}^{x_1} \rho g y(x) \sqrt{1 + y'(x)^2} dx, y(x_0) = y_0, y(x_1) = y_1$$

Es wird implizit angenommen, dass es eine stückweise stetige Funktion $y: [x_0, x_1] \rightarrow \mathbb{R}$ gibt, die die Lage des Kabels beschreibt. Dann hängt E_{pot} von y ab und wir können E_{pot} auffassen als Funktional

$$E_{\text{pot}}: \mathcal{PC}^1([x_0, x_1], \mathbb{R}) \rightarrow \mathbb{R} \quad \mathcal{PC}^1 \text{ ist der Raum aller stückweisen } C^1\text{-Funktionen}$$

Die Frage ist: Bei welcher Funktion y nimmt E_{pot} ein Minimum an?

Katenoide

BILD

Wir versuchen, zwei Kreise durch eine Rotationsfläche minimaler Oberfläche zu verbinden.

$$A(y) = 2\pi \int_{x_0}^{x_1} |y(x)| \sqrt{1 + y'(x)^2} dx, \quad y(x_0) = y_0, y(x_1) = y_1, L(y) = \int_{x_0}^{x_1} \sqrt{1 + y'(x)^2} dx$$

6 Variationsrechnung

Zu lösen ist

$$\begin{aligned} \min A(y) \\ \text{s.t. } y(x_0) &= y_0 \\ y(x_1) &= y_1 \\ L(y) &= L \quad (\text{isoperimetrische NB}) \\ y &\in \mathcal{PC}^1([x_0, x_1], \mathbb{R}) \end{aligned}$$

Brachystochrone

BILD

Wir suchen jene Kurve, auf der ein reibungsfrei laufendes Gefährt minimale Zeit benötigt, um von (x_0, y_0) nach (x_1, y_1) zu fahren. Der einzige in Betracht gezogene Einfluss sei die Gravitation.

$$T(y) = \int_0^L \frac{ds}{V(s)}$$

Energieerhaltungsrate:

$$\begin{aligned} E_{\text{opt}} + E_{\text{kin}} &= C \\ mgy + \frac{1}{2}mr^2 &= C \\ \Rightarrow mgy_0 &= C \\ \Rightarrow r^2 &= (mgy_0 - mgy) \cdot \frac{2}{m} = 2g(y_0 - y) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} T(y) &= \int_{x_0}^{x_1} \frac{\sqrt{1 + y'(x)^2}}{\sqrt{2g(y_0 - y(x))}} dx \\ w(x) &:= \frac{1}{2g}(2g(y_0 - y(x))) = y_0 - y(x) \\ \Rightarrow w'(x) &= y'(x) \\ \Rightarrow T(w) &= K \cdot \int_{x_0}^{x_1} \frac{\sqrt{1 + w'(x)^2}}{\sqrt{w(x)}} dx, \kappa = \sqrt{2g} \end{aligned}$$

Zu finden ist das Minimum von T auf $\mathcal{PC}^1([x_0, x_1], \mathbb{R})$

Fragen, die das Unendlichdimensionale aufwirft:

- Welche Funktionenklasse und welche Topologie wählt man?
- Existenz und Eindeutigkeit der Lösung?
- Wie egulär ist die Lösung? (Regularitätssätze)

6.2 Das Hamiltonsche Prinzip

Wir untersuchen die Bewegung eines Körpers im \mathbb{R}^3 . Die Bahnkurve sei mit $r(t)$ bezeichnet. Die kinetische Energie ist dann $E_{\text{kin}} = \frac{m}{2} \|\dot{r}(t)\|^2$. Der Körper bewege sich in einem Kraftfeld, das durch ein Potenzial V beschrieben ist, d. h. es gibt $V(t, r)$, sodass die Kraft zum Zeitpunkt t bei der Koordinate r gegeben ist durch

$$F(t, r) = \nabla V(t, r)$$

Man nennt $L(t, r, \dot{r}) := E_{\text{kin}}(t, \dot{r}) - V(t, r)$ die *Lagrange-Funktion* ($E_{\text{kin}}(t, \dot{r}) + V(t, r) = \text{const}$).

Das *Hamiltonsche Prinzip* besagt: Der Körper bewegt sich im Potenzial V entlang derjenigen Bahnkurve r , die das Funktional

$$J(r) := \int_{t_0}^{t_1} L(t, r, \dot{r}) dt,$$

das sog. *Wirkungsintegral*, minimiert. In der Physik wird der Ort r mit q bezeichnet.

6.3 Die Euler-Lagrange-Gleichung

Wir betrachten auf einem Funktionenraum \mathcal{F} ein Funktional

$$J: \mathcal{F} \rightarrow \mathbb{R}$$

Definition 6.3.1. Genau dann hat J bei $n \in \mathcal{F}$ ein *lokales Minimum*, wenn es $\varepsilon > 0$ gibt, sodass $J(n) - J(y) \leq 0$ für alle $y \in \mathcal{F}$ mit $d(n, y) < \varepsilon$, falls (\mathcal{F}, d) ein Fréchet-Raum ist, bzw. $\|n - v\| < \varepsilon$, falls $(\mathcal{F}, \|\cdot\|)$ ein Banach-Raum ist.

In der Variationsrechnung betrachten wir folgenden Spezialfall: Sei $f: \mathbb{R}^{2n+1} \rightarrow \mathbb{R}$ genügend oft differenzierbar (zunächst C^1 , später C^2), $f: (t, q, p) \mapsto f(t, q, p)$, $t \in \mathbb{R}, p, q \in \mathbb{R}^n$. Es sei J definiert als

$$J(y) := \int_{t_0}^{t_1} f(t, y(t), \dot{y}(t)) dt,$$

6 Variationsrechnung

wobei $\dot{y}(t) = \frac{dy}{dt}(t)$ und $y \in C^2([t_0, t_1], \mathbb{R}^n)$, $y(t_0) = y_0, y(t_1) = y_1$,

$$\mathcal{F} := \{y \in C^2([t_0, t_1], \mathbb{R}^n) \mid \underbrace{y(t_0) = y_0, y(t_1) = y_1}_{\text{Dirichlet-Bedingung}}\}$$

$$\mathcal{H} := \{\eta \in C^2([t_0, t_1], \mathbb{R}^n) \mid \eta(t_0) = 0, \eta(t_1) = 0\}$$

Es gilt, dass die Differenz zweier Funktionen aus \mathcal{F} in \mathcal{H} liegt.

Sei $h_\eta(s) := J(y + s\eta)$, $s \in \mathbb{R}, y \in \mathcal{F}, \eta \in \mathcal{H}$. Ist y lokales Minimum von J , dann ist $s = 0$ lokales Minimum von $h_\eta(s)$ für alle $\eta \in \mathcal{H}$. ($h_\eta(s): \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R} \quad \forall \eta \in \mathcal{H}$)

Jetzt betrachten wir die endlichdimensionale Optimalitätsbedingung 1. Ordnung für h_η :

$$\left. \frac{\partial}{\partial s} h_\eta(s) \right|_{s=0} = 0 \quad \forall \eta \in \mathcal{H}$$

$$h_\eta(s) = J(y + s\eta) = \int_{t_0}^{t_1} f(t, y(t) + s\eta(t), \dot{y}(t) + s\dot{\eta}(t)) dt$$

$$\begin{aligned} \left. \frac{d}{ds} \right|_{s=0} h_\eta(s) &= \left. \frac{d}{ds} \right|_{s=0} \int_{t_0}^{t_1} \underbrace{f(t, y(t) + s\eta(t))}_q \underbrace{\dot{y}(t) + s\dot{\eta}(t)}_p dt = \\ &= \int_{t_0}^{t_1} f_q(t, y(t), \dot{y}(t))\eta(t) + f_p(t, y(t), \dot{y}(t))\dot{\eta}(t) dt = \\ &= \int_{t_0}^{t_1} f_q(t, y(t), \dot{y}(t))\eta(t) - \frac{d}{dt} f_p(t, y(t), \dot{y}(t))\eta(t) dt + \overbrace{[f_p(t, y(t), \dot{y}(t))\eta(t)]_{t_0}^{t_1}}^{=0} = \\ &= \int_{t_0}^{t_1} (f_q(t, y(t), \dot{y}(t))) - \frac{d}{dt} f_p(t, y(t), \dot{y}(t))\eta(t) dt = 0 \quad \forall \eta \in \mathcal{H} \end{aligned}$$

Es bezeichnet f_q bzw. f_p die Jakobi-matrix der Ableitung nach q bzw. p .

Wegen Lemma 6.3.2 folgt die *Euler-Gleichung*

$$f_q(t, y(t), \dot{y}(t)) = \frac{d}{dt} f_p(t, y(t), \dot{y}(t))$$

$$\frac{\partial f}{\partial y}(t, y, \dot{y}) = \frac{d}{dt} \frac{\partial f}{\partial \dot{y}}(t, y, \dot{y})$$

$$\left. \frac{d}{ds} \right|_{s=0} h_\eta(s) =: \delta J(y, \eta)$$

ist die sog. *erste Variation* von J .

Lemma 6.3.2 (Fundamentallemma der Variationsrechnung)

Ist für $h \in C^0(]a, b[, \mathbb{R}^d)$ erfüllt, dass für alle $\varphi \in C_0^\infty(]a, b[, \mathbb{R}^d)$ gilt, dass

$$\int_a^b h(t)^\top \varphi(t) dt = 0,$$

dann gilt $h = 0$.

Beweis. $C_0^\infty(]a, b[, \mathbb{R}^d) = \{\varphi \mid \varphi \in C^\infty \text{ und } \varphi(a) = \varphi(b) = 0\}$

Sei o. B. d. A. $d = 1$, weil

$$\varphi = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ \psi_i \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \in C_0^\infty(]a, b[, \mathbb{R}^d) \quad \text{mit } \psi_i \in C_0^\infty(]a, b[, \mathbb{R})$$

Indirekt: angenommen, $h \neq 0$. Dann gibt es $t_0 \in]a, b[$ mit $h(t_0) \neq 0$. Da h stetig ist, gibt es daher ein $\delta > 0$ mit $|h(t)| > 0 \quad \forall t \in [t_0 - \delta, t_0 + \delta]$. Also gibt es ein α mit $|h(t)| \geq \alpha > 0 \quad \forall t \in [t_0 - \delta, t_0 + \delta]$.

Sei nun $\varphi \in C_0^\infty(]a, b[, \mathbb{R})$ so gewählt, dass $\text{sgn } h(t_0) \cdot \varphi(t) > 0 \quad \forall t \in [t_0 - \delta, t_0 + \delta]$ und $\varphi(t) = 0 \quad \forall t \in]a, b[\setminus]t_0 - \delta, t_0 + \delta[$ ist. Dann gilt

$$\int_a^b h(t)\varphi(t) dt = \int_{t_0-\delta}^{t_0+\delta} h(t)\varphi(t) dt \geq \alpha \int_{t_0-\delta}^{t_0+\delta} \underbrace{|\varphi(t)|}_{>0} dt > 0$$

Widerspruch □

Existenz von φ :

1. $f(x) = \begin{cases} e^{-\frac{1}{x^2}} & x \neq 0 \\ 0 & x = 0 \end{cases}, f(x) \text{ ist } C^\infty$

2. $f_\alpha(x) := \bar{f}(x - \alpha)$ mit $\bar{f}(x) := \begin{cases} f(x) & x \geq 0 \\ 0 & x < 0 \end{cases}, \bar{f}(x), f_\alpha(x) \text{ ist } C^\infty$

BILD

3. $g_{\alpha,\beta}(x) = \bar{f}(x - \alpha)\bar{f}(\beta - x)$ für $\beta > \alpha$

BILD

$g_{\alpha,\beta}$ ist C^∞ und $g_{\alpha,\beta}(x) > 0$ für $x \in]\alpha, \beta[$, $g_{\alpha,\beta}(x) = 0$ für $x \notin]\alpha, \beta[$.

6 Variationsrechnung

4. Bump-Funktion: Sei

$$\varphi_{\alpha,\beta}(x) := \frac{g_{\alpha,\beta}(x)}{\int_{-\infty}^{\infty} g_{\alpha,\beta}(y) dy},$$

dann gilt

$$\begin{aligned} \varphi_{\alpha,\beta} &\geq 0 \\ \varphi_{\alpha,\beta} &= 0 \text{ in } \mathbb{R} \setminus]\alpha, \beta[\\ \varphi_{\alpha,\beta} &> 0 \text{ in }]\alpha, \beta[\\ \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_{\alpha,\beta}(y) dy &= 1 \end{aligned}$$

6.4 Die zweite Variation – Jacobi-Felder

$$J(y) = \int_a^b f(t, y(t), \dot{y}(t)) dt$$

Sei y gegeben mit $\delta J(y, \eta) = 0 \quad \forall \eta \in \mathcal{H}$, d. h. die Lagrange-Gleichung ist erfüllt. Falls y ein lokales Minimum ist, dann müssen für $h_\eta(s)$ bei 0 die notwendigen Optimalitätsbedingungen 2. Ordnung gelten, also $h''_\eta(0) \geq 0$. Die *zweite variation* von J ist definiert als

$$\delta^2 J(y, \eta) := \left. \frac{d^2}{ds^2} \right|_{s=0} h_\eta(s)$$

$$\begin{aligned} \delta^2 J(y, \eta) &= \left. \frac{d^2}{ds^2} \right|_{s=0} \int_a^b f(t, y(t) + s\eta(t), \dot{y}(t) + s\dot{\eta}(t)) dt \\ &= \left. \frac{d}{ds} \right|_{s=0} \int_a^b f_p(t, y(t) + s\eta(t), \dot{y}(t) + s\dot{\eta}(t)) + f_q(t, y(t) + s\eta(t), \dot{y}(t) + s\dot{\eta}(t))\dot{\eta}(t) \\ &= \int_a^b \eta(t)^\top f_{pp}(t, y(t), \dot{y}(t))\eta(t) + 2\eta(t)^\top f_{pq}(t, y(t), \dot{y}(t))\dot{\eta}(t) + \dot{\eta}(t)^\top f_{qq}(t, y(t), \dot{y}(t))\dot{\eta}(t) dt \end{aligned}$$

Theorem 6.4.1

Ist y ein lokales Minimum, dann gilt

$$J^2 J(y, \eta) \geq 0 \quad \forall \eta \in \mathcal{H}$$

Das zugehörige Hilfs-variations-Problem ist

$$\begin{aligned}\varphi(t, \eta, \pi) &:= \eta^\top f_{pp} \eta + 2\eta^\top f_{pq} \pi + \pi^\top f_{qq} \pi \\ &= \eta^\top f_{pp}(t, y(t), \dot{y}(t)) \eta + 2\eta^\top f_{pq}(t, y(t), \dot{y}(t)) \pi + \pi^\top f_{qq}(t, y(t), \dot{y}(t)) \pi\end{aligned}$$

$$J^2 J(y, \eta) = \int_a^b \varphi(t, \eta(t), \dot{\eta}(t)) dt =: Q(\eta)$$

Ist y lokales Minimum, so gilt $Q(\eta) \geq 0$ für alle $\eta \in \mathcal{H}$. Offensichtlich gilt $Q(0) = 0$.

Euler-Lagrange-Gleichung für Q :

$$\varphi_\eta(t, \eta, \dot{\eta}) = \frac{d}{dt} \varphi_\pi(t, \eta, \dot{\eta})$$

$$\begin{aligned}\varphi_\eta(t, \eta(t), \dot{\eta}(t)) &= 2f_{pp}(t, y(t), \dot{y}(t)) \eta(t) + 2f_{pq}(t, y(t), \dot{y}(t)) \dot{\eta}(t) \\ \varphi_\pi(t, \eta(t), \dot{\eta}(t)) &= 2f_{pq}(t, y(t), \dot{y}(t)) \eta(t) + 2f_{qq}(t, y(t), \dot{y}(t)) \dot{\eta}(t)\end{aligned}$$

Euler-Lagrange-Gleichung:

$$\frac{d}{dt} (f_{qq} \dot{\eta} + f_{pq} \eta) = f_{pp} \eta + f_{pq} \dot{\eta}$$

Das ist die sog. *Jacobi-Gleichung*.

Sei ab jetzt $f \in C^2$.

Definition 6.4.2. Sei y eine Lösung der Euler-Lagrange-Gleichung. Eine Lösung $\eta \in C^2(]a, b[, \mathbb{R}^d)$ der Jacobi-Gleichung heißt *Jacobi-Feld entlang y* .

Theorem 6.4.3 (Notwendige Legendre-Bedingung)

Unter den Annahmen von Theorem 6.4.1 gilt für alle $t \in]a, b[$:

$$f_{pp}(t, y(t), \dot{y}(t)) \succeq 0$$

Beweis. Idee:

Man betrachtet $Q(\eta)$ und verwendet spezielle Funktionen $\eta \notin \mathcal{H}$:

$$\eta(t) = \begin{cases} 0 & t \in]a, b[\setminus [t_0 - \varepsilon, t_0 + \varepsilon] \\ \varepsilon \xi & t = t_0 \\ \text{linear} & \text{sonst, sodass } \eta \text{ stetig ist} \end{cases}$$

6 Variationsrechnung

Man verwendet Regularitätssätze, die aussagen, dass auch mit diesen η getestet werden darf.

$$0 \leq \delta^2 J(y, \eta) = \int_{t_0-\varepsilon}^{t_0+\varepsilon} \xi^\top f_{pp} \xi dt + O(\varepsilon^2)$$

$$\xi^\top f_{pp}(t_0, y(t_0), \dot{y}(t_0)) \xi = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{2\varepsilon} \int_{t_0-\varepsilon}^{t_0+\varepsilon} \xi^\top f_{pp} \xi \geq 0$$

□

Frage: Gelten analog auch hinreichende Optimalitätsbedingungen 2. Ordnung von folgender Form?

$$f_{pp} \succeq 0 \quad \forall t \stackrel{?}{\Rightarrow} y \text{ ist lokales Minimum}$$

Theorem 6.4.4

Sei $f \in C^3(]a, b[, \mathbb{R}^{2d+1})$ und sei $y_s(t)$ eine Schar von C^2 -Lösungen der Euler-Lagrange-Gleichung.

$$s \mapsto y_s(t) \in C^2(]a, b[, \mathbb{R}^d)$$

mit $y_s(t) \in C^1(\mathbb{R}, C^2(]a, b[, \mathbb{R}^d))$, d. h. es gilt $\frac{d}{dt} f_p(t, y_s(t), \dot{y}_s(t)) = f_q(t, y_s(t), \dot{y}_s(t))$ für alle $s \in]-\varepsilon, \varepsilon[$. Dann ist

$$\eta(t) := \left. \frac{d}{ds} \right|_{s=0} y_s(t)$$

ein Jacobi-Feld entlang $y_0(t)$.

Beweis.

$$\begin{aligned} 0 &= \left. \frac{d}{ds} \right|_{s=0} \left(\frac{d}{dt} f_p(t, y_s(t), \dot{y}_s(t)) - f_q(t, y_s(t), \dot{y}_s(t)) \right) = \\ &= \frac{d}{dt} (f_{pp}(t, y_0(t), \dot{y}_0(t)) \eta(t) + f_{pq}(t, y_0(t), \dot{y}_0(t)) \dot{\eta}(t)) - \\ &\quad - f_{pq}(t, y_0(t), \dot{y}_0(t)) \eta(t) + f_{qq}(t, y_0(t), \dot{y}_0(t)) \dot{\eta}(t) \end{aligned}$$

□

Die Jacobi-Felder sind also die infinitesimalen Variationen der Lösungen der Euler-Lagrange-Gleichung.

Lemma 6.4.5

Sei $a \leq a_1 < a_2 \leq b$, seien f und f_p beide C^2 in $[a_1, a_2]$. Sei weiters $\eta \in C^1([a_1, a_2], \mathbb{R}^d)$ ein Jacobi-Feld auf $[a_1, a_2]$ mit $\eta(a_1) = \eta(a_2) = 0$. Dann gilt

$$\int_{a_1}^{a_2} \varphi(t, \eta(t), \dot{\eta}(t)) dt = 0$$

Beweis. Da φ homogen vom Grad 2 in (η, π) ist, gilt

$$2\varphi(t, \eta, \pi) = \varphi_\eta(t, \eta, \pi)\eta + \varphi_\pi(t, \eta, \pi)\pi$$

Also

$$\begin{aligned} 2 \int_{a_1}^{a_2} \varphi(t, \eta, \dot{\eta}) dt &= \int_{a_1}^{a_2} \varphi_\eta(t, \eta, \dot{\eta})\eta + \varphi_\pi(t, \eta, \dot{\eta})\dot{\eta} dt = \\ &= \int_{a_1}^{a_2} \varphi_\eta(t, \eta, \dot{\eta})\eta - \frac{d}{dt} \varphi_\pi(t, \eta, \dot{\eta})\eta dt + [\varphi_\pi(t, \eta, \dot{\eta})\eta]_{a_1}^{a_2} = \\ &= \int_{a_1}^{a_2} \underbrace{(\varphi_\eta(t, \eta, \dot{\eta}) - \frac{d}{dt} \varphi_\pi(t, \eta, \dot{\eta}))\eta}_{=0 \text{ weil } \eta \text{ ein Jacobi-Feld ist}} dt = 0 \end{aligned}$$

□

Definition 6.4.6. Sei $a \leq a_1 < a_2 \leq b$. Wir nennen a_1 *konjugiert* zu a_2 , wenn es ein Jacobi-Feld auf $[a, b]$ gibt mit $\eta(a_1) = \eta(a_2) = 0$. Man sagt auch, dass a_1 und a_2 *konjugierte Punkte* sind.

Theorem 6.4.7

Sei $f \in C^3, y \in C^2$. Weiters gelte $f_{pp}(t, y(t), \dot{y}(t)) \succ 0$ für $t \in]a, b[$. Gibt es a^* mit $a < a^* < b$, das zu a konjugiert ist, und erfüllt y die Euler-Lagrange-Gleichung, dann ist y kein lokales Minimum von J . Genauer: Für jedes $\varepsilon > 0$ gibt es ein κ aus einem geeigneten erweiterten Funktionenraum von C^2 mit

$$\begin{aligned} \kappa(a) &= y(a), \kappa(b) = y(b) \\ \sup_{t \in]a, b[} (|y(t) - \kappa(t)| + |\dot{y}(t) - \dot{\kappa}_\pm(t)|) &\leq \varepsilon \end{aligned}$$

und $J(y) > J(\kappa)$.

Theorem 6.4.8

6 Variationsrechnung

Sei $J(y) := \int_{t_0}^{t_1} f(y(t), \dot{y}(t)) dt$ (f hängt nicht von t ab!). Wir definieren

$$H(y, \dot{y}) := \dot{y} f_p - f$$

Dann ist H eine sog. Konstante der Bewegung, d. h. es gilt

$$H(y(t), \dot{y}(t)) \equiv \text{const}$$

Beweis.

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} H(y(t), \dot{y}(t)) &= \frac{d}{dt} (\dot{y} f_p - f) = \\ &= \ddot{y} f_p + \dot{y} \frac{d}{dt} f_p - \frac{d}{dt} f(y, \dot{y}) = \\ &= \ddot{y} f_p + \dot{y} \frac{d}{dt} f_p + \dot{y} \frac{d}{dt} f_p - f_q \dot{y} - f_p \ddot{y} = \\ &= \dot{y} \underbrace{\left(\frac{d}{dt} f_p - f_q \right)}_{=0 \text{ wegen E-L-Gleichung}} \\ &= 0 \end{aligned}$$

□

Beispiel: Kettenlinie

$$\begin{aligned} J(x) &= \int_{x_0}^{x_1} y \sqrt{1 + y'^2} dx \\ H(y, y') &= y' \cdot \frac{y 2y'}{2\sqrt{1 + y'^2}} - \sqrt{1 + y'^2} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{1 + y'^2}} (y y'^2 - y(1 + y'^2)) = \\ &= -\frac{y}{\sqrt{1 + y'^2}} \equiv -c \end{aligned}$$

$$\Rightarrow c \cdot \sqrt{1 + y'^2} = y \Rightarrow y^2 = c^2(1 + y'^2) \Rightarrow y' = \sqrt{\frac{y^2}{c^2} - 1}$$

$$\frac{dy}{dx} = \sqrt{\frac{y^2}{c^2} - 1} \Rightarrow x = \int \frac{dy}{\sqrt{\frac{y^2}{c^2} - 1}} + c_2 = c \ln \left(\frac{y + \sqrt{y^2 - c^2}}{c} \right) + c_2 \Rightarrow y(x) = c_1 \cosh \left(\frac{x - c_2}{c} \right)$$

mit $y(x_0) = y_0, x(x_1) = y_1 \Rightarrow c_1 = \dots, c_2 = \dots$

Beispiel: Brachystochone

$$\begin{aligned}
 J(y) &= \int_{x_0}^{x_1} \sqrt{\frac{1+y'^2}{y}} dx \\
 H(y, y') &= y' \frac{1}{\sqrt{y}} \frac{2y'}{2\sqrt{1+y'^2}} - \sqrt{\frac{1+y'^2}{y}} = \\
 &= \frac{1}{\sqrt{1+y'^2}} \left(\frac{y'^2}{\sqrt{y}} - \frac{1+y'^2}{\sqrt{y}} \right) = \\
 &= -\frac{1}{\sqrt{y}\sqrt{1+y'^2}} \equiv -c
 \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \sqrt{y}\sqrt{1+y'^2} \cdot c = 1 \Rightarrow \sqrt{y}\sqrt{1+y'^2} = \frac{1}{c} \Rightarrow y(1+y'^2) = \frac{1}{c^2} = c_1$$

$$y' = \tan \psi \Rightarrow 1+y'^2 = 1+\tan^2 \psi = \frac{1}{\cos^2 \psi} \Rightarrow y = c_1 \cos^2 \psi = \kappa(1+\cos(2\psi)), dy = -4\kappa \cos \psi \sin \psi d\psi$$

$$\sqrt{\frac{1}{x^2} - 1} = \frac{dy}{dx} = ???$$

$$x = \lambda - \kappa|2\psi + \sin(2\psi)|$$

λ, κ konstant \Rightarrow Zykloide

6.5 Der Satz von Noether

Definition 6.5.1. Eine Größe $c(t, y(t), \dot{y}(t))$, die konstant in t ist für alle Lösungen der Euler-Lagrange-Gleichung eines Variationsystems, heißt *Konstante der Bewegung*.

Theorem 6.5.2 (E. Noether)

Wir betrachten das Variationsproblem

$$J(y) = \int_a^b f(t, y(t), \dot{y}(t)) dt$$

mit $f \in C^2([a, b] \times \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d, \mathbb{R})$. Angenommen, es gibt eine Einparameterfamilie differenzierbarer Abbildungen

$$\bar{h}_s = (h_s^0, h_s): [a, b] \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R} \times \mathbb{R}^d, \quad s \in]-\varepsilon_0, \varepsilon_0[$$

6 Variationsrechnung

mit

$$\bar{h}_0(t, z) = (t, z) \quad \forall (t, z) \in [a, b] \times \mathbb{R}^d$$

und

$$\int_{h_s^0(t_1)}^{h_s^0(t_2)} f\left(t_s, h_s(y(t_s)), \frac{d}{dt} h_s(y(t_s))\right) dt_s = \int_{t_1}^{t_2} f(t, y(t), \dot{y}(t)) dt$$

mit $t_s = h_s^0(t)$ für alle $s \in]-\varepsilon_0, \varepsilon_0[$ und alle $y \in C^2([a, b], \mathbb{R}^d)$ für alle $a \leq t_1 \leq t_2 \leq b$. Dann gilt für jede Lösung der Euler-Lagrange-Gleichung, dass

$$f_p(t, y(t), \dot{y}(t)) \frac{d}{ds} \Big|_{s=0} h_s(y(t)) + (f(t, y(t), \dot{y}(t)) - f_p(t, y(t), \dot{y}(t)) \dot{y}(t)) \frac{d}{ds} \Big|_{s=0} h_s^0(t)$$

konstant in $t \in [a, b]$ ist, d. h. dieser Ausdruck ist eine Konstante der Bewegung.

Bemerkung: Theorem 6.4.8 ist ein Spezialfall von 6.5.2, weil für $\bar{h}_s(t, z) = (t + s, z)$, die Zeittranslation, das Integral konstant lässt und die Konstante der Bewegung aus Theorem 6.4.8 ergibt.

Beweis. Wir beweisen zunächst folgenden Fall:

Wir nehmen an, dass die Abbildung $h_s: \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$ mit $s \in]-\varepsilon_0, \varepsilon_0[$ und $h_0(z) = z$ die Bedingung

$$\int_a^b f\left(t, h_s(y(t)), \frac{d}{dt} h_s(y(t))\right) dt = \int_a^b f(t, y(t), \dot{y}(t)) dt$$

für alle $s \in]-\varepsilon_0, \varepsilon_0[$, $y \in C^2([a, b], \mathbb{R}^d)$ erfüllt. Dann ist zu zeigen, dass

$$f_p(t, y(t), \dot{y}(t)) \frac{d}{ds} \Big|_{s=0} h_s(y(t)) \equiv \text{const}$$

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{d}{ds} \Big|_{s=0} \int_a^{t_0} f\left(t, h_s(y(t)), \frac{d}{dt} h_s(y(t))\right) dt = \\ &= \int_a^{t_0} \left(f_q(t, y(t), \dot{y}(t)) \frac{d}{ds} \Big|_{s=0} h_s(y(t)) + f_p(t, y(t), \dot{y}(t)) \frac{d}{dt} \frac{d}{ds} \Big|_{s=0} h_s(y(t)) \right) dt = \\ &= \int_a^{t_0} \frac{d}{dt} \left(f_p(t, y(t), \dot{y}(t)) \frac{d}{ds} \Big|_{s=0} h_s(y(t)) \right) dt \end{aligned}$$

$$\Rightarrow f_p(t_0, y(t_0), \dot{y}(t_0)) \frac{d}{ds} \Big|_{s=0} h_s(y(t_0)) = f_p(a(y(a), \dot{y}(a))) \frac{d}{ds} \Big|_{s=0} h_s(y(a)) \quad \forall t_0 \leq b$$

Für den allgemeinen Fall führen wir das Problem auf den Spezialfall zurück, indem wir auch t als unabhängige Variable betrachten:

$$\bar{f} \left(t(\tau), y(t(\tau)), \frac{dt}{d\tau}, \frac{d}{d\tau} y(t(\tau)) \right) := f \left(t, y(t), \frac{\frac{d}{d\tau} y(t(\tau))}{\frac{dt}{d\tau}} \right) = f(t, y(t), \dot{y}(t)) \cdot \frac{dt}{d\tau}$$

$$\bar{J}(t, y) := \int_{\tau_0}^{\tau_1} \bar{f} \left(t(\tau), y(t(\tau)), \frac{dt}{d\tau}, \frac{d}{d\tau} y(t(\tau)) \right) d\tau = \dots = \int_a^b F(t, y(t), \dot{y}(t)) dt = J(y)$$

mit $a = t(\tau_0), b = t(\tau_1)$.

Nach Voraussetzung gilt

$$\int_{\tau_0}^{\tau_1} \bar{f} \left(h_s^0(t(\tau)), h_s(y(t(\tau))), \frac{d}{d\tau} h_s^0(t(\tau)), \frac{d}{d\tau} h_s(y(t(\tau))) \right) = \int_{\tau_0}^{\tau_1} \bar{f} \left(t(\tau), y(t(\tau)), \frac{dt}{d\tau}, \frac{d}{d\tau} y(t(\tau)) \right) d\tau$$

Nach dem Spezialfall ist also

$$\bar{f}(t, y(t), \dot{t}, \dot{y}(t)) \frac{d}{ds} \Big|_{s=0} \bar{h}(y(t)) \equiv \text{const}$$

$$\Rightarrow \bar{f}_{(\dot{y})}(t, y(t), \dot{t}, \dot{y}(t)) \frac{d}{ds} \Big|_{s=0} \bar{h}(y(t)) + \bar{f}_i(t, y(t), \dot{t}, \dot{y}(t)) \frac{d}{ds} \Big|_{s=0} h_s^0(t) \equiv \text{const}$$

$$\bar{f}_{\dot{y}} = f_p, \quad \bar{f}_i = f - f_p \cdot \dot{y}$$

$$\Rightarrow f_p(t, y(t), \dot{y}(t)) \frac{d}{ds} \Big|_{s=0} h_s(y(t)) + (f(t, y(t), \dot{y}(t)) - f_p(t, y(t), \dot{y}(t)) \dot{y}(t)) \frac{d}{ds} \Big|_{s=0} h_s^0(t) \equiv \text{const}$$

□

6.6 Geodäten

Sei M eine n -dimensionale Teilmannigfaltigkeit des \mathbb{R}^d und o. B. d. A. glatt. Sei $c \in AC([0, \tau], M)$ (absolut stetige Abbildungen) eine Kurve, d. h. $c: [0, \tau] \rightarrow \mathbb{R}^d$ und $\forall t \in [0, \tau]: c(t) \in M$. Die Länge von c ist

$$L(c) := \int_0^\tau \|\dot{c}(t)\| dt = \int_0^\tau \sqrt{\sum_{\alpha=1}^d (\dot{c}_\alpha(t))^2} dt$$

6 Variationsrechnung

Die *Energie* von c sei

$$E(c) := \frac{1}{2} \int_0^\tau \|\dot{c}(t)\|^2 dt = \frac{1}{2} \int_0^\tau \sum_{\alpha=1}^d (\ddot{c}_\alpha(t))^2 dt$$

Sei $f: \setminus^d \supseteq U \tau V$ eine Karte für M , d. h. $f(U) = M \cap V$; o. B. d. A. sei f glatt (C^2 reicht). Sei für den Moment $c([0, \tau]) \subseteq f(U)$. In diesem Fall existiert eine Kurve $\gamma: [0, \tau] \rightarrow \mathbb{R}^n$ mit

$$\begin{aligned} c(t) &= f(\gamma(t)) \\ \dot{c}(t) &= (\nabla f)(\gamma(t)) \cdot \dot{\gamma}(t) \\ L(c) &= \int_0^\tau \left(\sum_{\alpha=1}^d \sum_{i,j} \frac{\partial f_\alpha}{\partial x_i}(\gamma(t)) \cdot \dot{\gamma}_i(t) \frac{\partial f_\alpha}{\partial x_j}(\gamma(t)) \dot{\gamma}_j(t) \right)^{\frac{1}{2}} dt \\ g_{ij}(z) &:= \sum_{\alpha=1}^d \frac{\partial f_\alpha}{\partial z_i}(z) \frac{\partial f_\alpha}{\partial z_j}(z) \end{aligned}$$

Mit dieser Definition gilt

$$\begin{aligned} L(c) &= \int_0^\tau \left(\sum_{i,j} g_{ij}(\gamma(t)) \dot{\gamma}_i(t) \dot{\gamma}_j(t) \right)^{\frac{1}{2}} dt \\ E(c) &= \frac{1}{2} \int_0^\tau \left(\sum_{i,j} g_{ij}(\gamma(t)) \dot{\gamma}_i(t) \dot{\gamma}_j(t) \right) dt \end{aligned}$$

Definition 6.6.1. Die Größe g_{ij} heißt der *Metriktensor* von M bzgl. der Karte f .

Es gilt $g_{ij}(z) = g_{ji}(z)$, d. h. g ist symmetrisch. Außerdem gilt $\sum_{i,j} g_{ij}(z) \eta_i \eta_j \succ 0$, für $\eta \neq 0$, weil $\text{rk } \nabla f$ maximal ist.

Unsere Aufgabe wird es sein, Kurven minimaler Länge bzw. maximaler Energie zu finden. Zunächst gilt für alle Euklidischen Geometrien $i: \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$, dass

$$L(i(c)) = L(c), \quad E(i(c)) = E(c),$$

weil $i(x) = Qx + b$ mit $b \in \mathbb{R}^d$, $Q \in O(d)$ ist, und wegen der Substitutionsregel für Mehrfachintegrale.

Sei τ eine Reparametrisierung von c , d. h. $\tau: [0, \delta] \rightarrow [0, \tau]$ ein Diffeomorphismus,

dann gilt

$$\begin{aligned} L(c \circ \tau) &= \int_0^s \left\| \frac{d}{ds}(c \circ \tau)(s) \right\| ds = \int_0^s \left\| \left(\frac{d}{dt}c \right)(\tau(s)) \left| \frac{d\tau}{ds}(s) \right. \right\| ds \\ &= \int_0^\tau \|\dot{c}(t)\| dt = L(c) \end{aligned}$$

Also ist E nicht reparametrisierungsinvariant. Es gilt aber (nach der Cauchy-Schwartz-Ungleichung)

$$L(c) = \int_0^\tau 1 \cdot \|\dot{c}(t)\| dt \leq \left(\int_0^\tau dt \right)^{\frac{1}{2}} \left(\int_0^\tau \|\dot{c}(t)\|^2 dt \right)^{\frac{1}{2}} = \sqrt{2\tau} \sqrt{E(c)}$$

Die Ungleichung ist strikt, außer $\|\dot{c}\|$ ist fast überall konstant. Ist $\|\dot{c}(t)\| \equiv 1$, so ist es die Bogenparametrisierung.

Lemma 6.6.2

Unter allen Parametrisierungen $\tau: [0, L(c)] \rightarrow [0, \tau]$ hat die Kurve $c \circ \tau$ minimale Energie, wenn τ die Bogenlängenparametrisierung ist. Dann gilt

$$L(c) = 2E(c)$$

BILD

Was passiert bei Kartenwechsel?

Wir betrachten die sog. Kartenwechselabbildung

$$\hat{f}^{-1} \circ f: f^{-1}(U \cap \hat{V}) \rightarrow \hat{f}^{-1}(V \cap \hat{V}) \subseteq \mathbb{R}^n$$

Zwei Karten (U, f) und (\hat{U}, \hat{f}) heißen C^k -kompatibel, wenn $\hat{f}^{-1} \circ f$ und $f^{-1} \circ \hat{f}$ beide C^k -Abbildungen sind. Eine Sammlung $(U_i, f_i)_{i \in I}$ von Karten mit $\bigcup_{i \in I} f_i(U_i) = M$, die paarweise C^k -kompatibel sind, heißt C^k -Atlas für M .

Sei $\mathcal{A} = (U_i, f_i)$ ein C^k -Atlas. Eine Familie von stetigen Funktionen $\varphi_i: M \rightarrow \mathbb{R}$ heißt zu \mathcal{A} untergeordnete *Partition der Eins*, wenn

- (1) $\varphi_i|_{M \setminus f_i(U_i)} \equiv 0$
- (2) Für jedes $x \in M$ gibt es nur endlich viele $j \in I$ mit $\varphi_j(x) \neq 0$.
- (3) $\varphi_i \circ f_i: \mathbb{R}^n \supseteq U_i \rightarrow \mathbb{R}$ ist C^n für alle i .
- (4) $\sum_{i \in I} \varphi_i(x) = 1 \quad \forall x \in M$

6 Variationsrechnung

BILD

Wenn für alle Karten (U_M, f_M) und (U_N, f_N) die Funktion

$$f_N^{-1} \circ g \circ f_M: \mathbb{R}^m \supseteq U_M \rightarrow U_N \subseteq \mathbb{R}^n$$

C^k ist, dann nennen wir $g: M \rightarrow N$ eine C^k -Abbildung.

BILD

Sei \hat{f} eine weitere Karte und $\hat{\gamma}$ so, dass $\hat{f}(\hat{\gamma}(t)) = c(t) \quad \forall t$.

$$\hat{g}_{kc}(z) = \sum_{\alpha=1}^d \frac{\partial \hat{f}_\alpha}{\partial z_k}(z) \frac{\partial f_\alpha}{\partial z_c}$$

$$L(c) = \int_0^1 \left(\sum_{k,\ell} g_{k\ell}(\hat{\gamma}(t)) \dot{\hat{\gamma}}_k(t) \dot{\hat{\gamma}}_\ell(t) \right)^{\frac{1}{2}} dt$$

$$\varphi = \hat{f}^{-1} \circ f$$

$$\hat{\gamma}(t) = \varphi(\gamma(t))$$

$$\dot{\hat{\gamma}}_k(t) = \sum_j \frac{\partial \varphi_k}{\partial z_j}(\gamma(t)) \cdot \dot{\gamma}_j(t)$$

$$g_{ij}(z) = \sum_{k,\ell} \hat{g}_{k\ell}(\varphi(z)) \frac{\partial \varphi_k}{\partial z_i}(z) \frac{\partial \varphi_\ell}{\partial z_j}(z)$$

$$\hat{f}(\varphi(z)) = f(z)$$

$$L(c) = \int_0^T \left(\sum_{k,\ell} \hat{g}_{k,\ell}(\hat{\gamma}(t)) \dot{\hat{\gamma}}_k(t) \dot{\hat{\gamma}}_\ell(t) \right)^{\frac{1}{2}} dt$$

$$= \int_0^T \left(\sum_{k,\ell} \hat{g}_{k\ell}(\varphi(\gamma(t))) \sum_i \frac{\partial \varphi_k}{\partial z_i}(\gamma(t)) \dot{\gamma}_i(t) \sum_j \frac{\partial \varphi_\ell}{\partial z_j}(\gamma(t)) \dot{\gamma}_j(t) \right)^{\frac{1}{2}} dt$$

$$= \int_0^T \left(\sum_{i,j} g_{ij}(\gamma(t)) \dot{\gamma}_i(t) \dot{\gamma}_j(t) \right)^{\frac{1}{2}} dt$$

Also ist L invariant unter Kartenwechsel. Das gilt auch für die Energie. Daher kann man die Länge (und die Energie) einer Kurve c auch dann sinnvoll definieren, wenn sie nicht in einer Karte enthalten ist.

BILD

Wir bestimmen als Nächstes die Euler-Lagrange-Gleichung für $E(c)$, denn die Kurve minimaler Energie und die Kurve maximaler Länge stimmen wegen Lemma ??

überein.

$$\begin{aligned}
 0 &= \frac{d}{dt} E_{\dot{\gamma}_i} - E_{\dot{\gamma}_i} \quad \text{für } i = 1, \dots, n \\
 \iff 0 &= \frac{d}{dt} \left(\sum_j 2g_{ij}(\gamma(t)) \dot{\gamma}_j(t) \right) - \sum_{j,k} \left(\frac{\partial}{\partial z_i} g_{ki} \right) (\gamma(t) - \dot{\gamma}_k(t) \dot{\gamma}_i(t)) \\
 \iff 0 &= \sum_j 2g_{ij} \ddot{\gamma}_i + 2 \sum_{j,k} \frac{\partial}{\partial z_k} g_{ij} \dot{\gamma}_k \dot{\gamma}_j - \sum_{j,k} \frac{\partial}{\partial x_i} g_{kj} \dot{\gamma}_k \dot{\gamma}_i
 \end{aligned}$$

FEHLT WAS???

Was bedeutet das?

$$0 = \ddot{\alpha} - \frac{2\alpha \dot{\alpha}^2 a^\top a}{1 + \alpha^2 a + a}$$

Es gibt genau ein α mit $\alpha(0) = 0$ und $\dot{\alpha}(0) = 1$. Dann ist $\gamma(t) = a\alpha(t)$ die Parametrisierung einer Gerade durch 0 in Richtung a . Dann ist $\psi(\gamma(t))$ ein Großkreislauf der Sphäre. Aus Symmetriegründen ist jede Geodäte ein Teil eines Großkreises.

BILD

6.7 Anwendungen des Satzes von Noether

FEHLT HIER AS???

Physikalische Probleme der klassischen Mechanik

Punktteilchen T_α : Weltlinie $x_\alpha(t)$, Masse m_α

Potenzial V ist unabhängig von t

Lagrange-Funktion

$$\begin{aligned}
 L &= E_{\text{kin}} - E_{\text{pot}} \\
 &= \sum_\alpha \frac{m_\alpha}{2} \|\dot{x}_\alpha\|^2 - \sum_\alpha V(x_\alpha) - \sum_{\alpha < \beta} \hat{V}(x_\alpha - x_\beta) \\
 J(x) &= \int_{t_0}^{t_1} L(x, \dot{x}) dt
 \end{aligned}$$

Energieerhaltung

Konstante der Bewegung: Gilt

$$\bar{h}_s = (h_s^0, h_s) = \int_{h_s^0(t_1)}^{h_s^0(t_2)} f\left(t_s, h_s(y(t_s)), \frac{d}{dt_s} h_s(y(t_s))\right) dt_s = \int_{t_1}^{t_2} f(t, y(t), \dot{y}(t)) dt$$

dann ist

$$f_{\dot{y}}(t, y, \dot{y})^\top \frac{d}{ds} \Big|_{s=0} h_s(y) + (f(t, y, \dot{y}) - f_{\dot{y}}(t, y, \dot{y})^\top \dot{y}) \frac{d}{ds} \Big|_{s=0} h_s^0(t)$$

eine konstante Bewegung.

Spezialfall: Hängt f nicht explizit von t ab, dann wähle $\bar{h}_s(t, z) = (t + s, z)$, daher $f(y, \dot{y}) - f_{\dot{y}}(y, \dot{y})\dot{y} \equiv \text{const}$

Da L nicht explizit von t abhängt, ist J invariant unter Zeittranslationen.

$$L(x, \dot{x}) - \dot{x}^\top L_{\dot{x}}(x, \dot{x}) \equiv \text{const}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_{\beta ii}} L(x, \dot{x}) &= \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_{\beta ii}} \left(\sum_{\alpha} \frac{m_{\alpha}}{2} \|\dot{x}_{\alpha}\|^2 - \sum_{\alpha} V(x_{\alpha}) - \sum_{\alpha < \beta} V(x_{\alpha} - x_{\beta}) \right) \\ &= \sum_{\alpha} \frac{m_{\alpha}}{2} \delta_{\alpha\beta} \cdot 2\dot{x}_{\alpha, i} = m_{\beta} \dot{x}_{\beta, i} \end{aligned}$$

$$\sum_{\alpha} \frac{m_{\alpha}}{2} \|\dot{x}_{\alpha}\|^2 - \sum_{\alpha} V(x_{\alpha}) - \sum_{\alpha < \beta} V(x_{\alpha} - x_{\beta}) - \underbrace{\sum_{\alpha, i} \dot{x}_{\alpha, i} m_{\alpha} \dot{x}_{\alpha, i}}_{\sum_{\alpha} m_{\alpha} \|\dot{x}_{\alpha}\|^2} \equiv -E$$

$$\Rightarrow E \equiv \sum_{\alpha} \frac{m_{\alpha}}{2} \|\dot{x}_{\alpha}\|^2 + E_{\alpha} V(x_{\alpha}) + \sum_{\alpha < \beta} V(x_{\alpha} - x_{\beta})$$

Aus Zeittranslationsinvarianz folgt also Energieerhaltung.

Impulserhaltung

kein äußeres Feld

$$\begin{aligned}
L(x, \dot{x}) &= \sum_{\alpha} \frac{m_{\alpha}}{2} \|\dot{x}_{\alpha}\|^2 - \sum_{\alpha < \beta} V(x_{\alpha} - x_{\beta}) \\
h_s^0 &= t \\
h_s(z) &= z + s \cdot w \\
\int_{t_1}^{t_2} L(x_{\alpha} + sw, \dot{x}_{\alpha}) dt &= \int_{t_1}^{t_2} \sum_{\alpha} \frac{m_{\alpha}}{2} \|\dot{x}_{\alpha}\|^2 - \sum_{\alpha < \beta} V(x_{\alpha} + s/w - x_{\beta} - s/w) dt = \\
&= \int_{t_1}^{t_2} \sum_{\alpha} \frac{m_{\alpha}}{2} \|\dot{x}_{\alpha}\|^2 - \sum_{\alpha < \beta} V(x_{\alpha} - x_{\beta}) dt = \\
&= \int_{t_1}^{t_2} L(x, \dot{x}) dt
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial L(x, \dot{x})}{\partial \dot{x}_{\beta, i}} &= m_{\beta} \dot{x}_{\beta, i s} \\
\left. \frac{d}{ds} \right|_{s=0} h_s(x) &= \begin{pmatrix} w \\ \vdots \\ w \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

$$\sum_{\beta, i} m_{\beta} \dot{x}_{\beta, i} w_i \equiv \text{const} \quad \forall w \in \mathbb{R}^s \iff \forall w \in \mathbb{R}^s: \left\langle \sum_{\beta} m_{\beta} \dot{x}_{\beta}, w \right\rangle \equiv \text{const}$$

Also gilt $\sum_{\beta} m_{\beta} \dot{x}_{\beta} \equiv \text{const}$ und der Gesamtimpuls ist erhalten, d. h. aus Translationsinvarianz folgt Impulserhaltung.

DrehimpulserhaltungNun soll $V(x_{\alpha} - x_{\beta})$ von $\|x_{\alpha} - x_{\beta}\|$ abhängen.

$$\begin{aligned}
L(x, \dot{x}) &= \sum_{\alpha} \frac{m_{\alpha}}{2} \|\dot{x}_{\alpha}\|^2 - \sum_{\alpha < \beta} \hat{V}(\|x_{\alpha} - x_{\beta}\|) - \sum_{\alpha} V(\|x_{\alpha}\|) \\
h_s^0 &= t \\
h_s(z) &= h_s \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Q_s x_1 \\ \vdots \\ Q_s x_N \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

6 Variationsrechnung

Dabei ist $Q_s \in \text{SO}(J)$ mit $Q_0 = I$ eine Drehung um die Achse W um den Winkel s .

$$\begin{aligned} \int_{t_1}^{t_2} L\left(h_s(y), \frac{d}{dt}h_s(y)\right) dt &= \int_{t_1}^{t_2} \sum_{\alpha} \frac{m_{\alpha}}{2} \|Q_s \dot{x}_{\alpha}\|^2 - \sum_{\alpha} V(\|Q_s x_{\alpha}\|) - \sum_{\alpha < \beta} \hat{V}(\|Q_s x_{\alpha} - Q_s x_{\beta}\|) dt = \\ &= \int_{t_1}^{t_2} \sum_{\alpha} \frac{m_{\alpha}}{2} \|\dot{x}_{\alpha}\|^2 - \sum_{\alpha} V(\|x_{\alpha}\|) - \sum_{\alpha < \beta} \hat{V}(\|x_{\alpha} - x_{\beta}\|) dt = \\ &= \int_{t_1}^{t_2} L(x, \dot{x}) dt \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial L(x, \dot{x})}{\partial \dot{x}_{\beta, i}} &= m_{\beta} \dot{x}_{\beta, i s} \\ \frac{d}{ds} \Big|_{s=0} h_s(x) &= \begin{pmatrix} w \\ \vdots \\ w \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Spezielle Q :

$$\begin{aligned} Q_s^1 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos s & \sin s \\ 0 & -\sin s & \cos s \end{pmatrix} \\ \frac{d}{ds} \Big|_{s=0} Q_s^1 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\sin s & \cos s \\ 0 & -\cos s & -\sin s \end{pmatrix} \Big|_{s=0} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \\ \frac{d}{ds} \Big|_{s=0} h_s(x) &= \begin{pmatrix} 0 \\ x_{1,2} \\ -x_{1,2} \\ 0x_{2,3} \\ -x_{2,3} \\ \vdots \\ 0 \\ x_{N,2} \\ -x_{N,2} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

$$\text{const} = \sum_{\alpha} m_{\alpha} (\dot{x}_{\alpha,2} x_{\alpha,3} - \dot{x}_{\alpha,3} x_{\alpha,2})$$

$$Q_s^2 = \begin{pmatrix} \cos s & 0 & \sin s \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin s & 0 & \cos s \end{pmatrix}$$

6.7 Anwendungen des Satzes von Noether

$$\rightsquigarrow \text{const} \equiv \sum_{\alpha} m_{\alpha} (\dot{x}_{\alpha,1} x_{\alpha,3} - \dot{x}_{\alpha,3} x_{\alpha,1})$$

$$Q_s^3 = \begin{pmatrix} \cos s & \sin s & 0 \\ -\sin s & \cos s & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\rightsquigarrow \text{const} \equiv \sum_{\alpha} m_{\alpha} (\dot{x}_{\alpha,1} x_{\alpha,2} - \dot{x}_{\alpha,2} x_{\alpha,1})$$

Der Gesamtimpuls ist $\sum_{\alpha} m_{\alpha} (x_{\alpha} \dot{x}_{\alpha})$. Aus Rotationsinvarianz folgt Drehimpulserhaltung.

7 AMPL – A Mathematical Programming Language

- deklarative Programmiersprache
- dient zur Beschreibung und Lösung von Optimierungsproblemen
- mathematiknah

7.1 LP – Ein einfaches Modell

Eine Fabrik stellt zwei Sorten Farbe her: blau, gold. Die blaue Farbe wird für 10 € / Eimer verkauft, die goldene für 15 € / Eimer. Die Fabrik besitzt eine Maschine, die beide Farbtypen herstellen kann. Diese kann pro Stunde 40 Eimer blaue Farbe herstellen, aber nur 30 Eimer goldene Farbe. Die Nachfrage ist so gestaltet, dass höchstens 860 Eimer goldene und 1000 Eimer blaue Farbe verkauft werden können. Eine Arbeitswoche hat 40 Stunden. Es bezeichne E_b die Anzahl der Eimer blauer Farbe und E_g die der Eimer goldener Farbe.

$$\begin{aligned} \max & 10E_b + 15E_g \\ \text{s.t.} & \frac{1}{40}E_b + \frac{1}{30}E_g \leq 40 \\ & 0 \leq E_b \leq 1000 \\ & 0 \leq E_g \leq 860 \end{aligned}$$

In AMPL legen wir die Datei `bsp1.mod` an, das Modellfile, in dem wir die Struktur des Problems beschreiben. Es enthält

```
# Farbenbeispiel
var Eb; # Eimer blaue Farbe
var Eg; # Eimer goldene Farbe

maximize profit: 10*Eb+15*Eg;
subject to time: (1/40)*Eb+(1/30)*Eg=40;
subject to blau_g: 0<=Eb<=1000;
subject to gold_g: 0<=Eg<=860;
```

- Groß- und Kleinschreibung wird unterschieden.

7 AMPL – A Mathematical Programming Language

- Jede Nebenbedingung beginnt mit `subject to`.
- Mehrere Zielfunktionen sind möglich.
- Variablen müssen deklariert werden.
- Die Datei wird von oben nach unten gelesen.
- Die Deklarationen können in beliebiger Reihenfolge stehen, dürfen aber nur bereits deklarierte Variablen verwenden.
- Jede Anweisung muss mit einem Semikolon `;` enden.

Jetzt können wir `AMPL` starten:

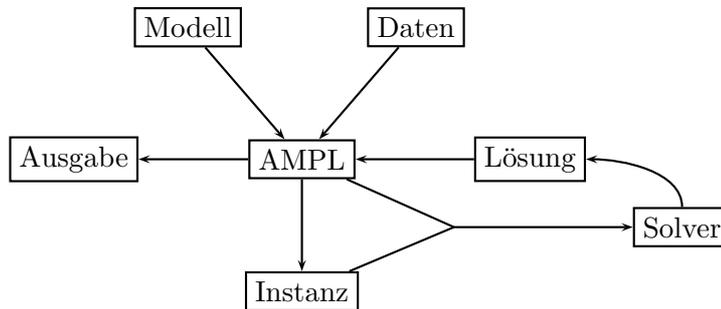
```
AMPL> model bsp1.mod;
AMPL> option solver cplex;
AMPL> solve;
CPLEX 8.0.1 optimal solution;
      objective 17433.33333
      2 simplex iterations
AMPL> display Eb;
      Eb
AMPL display Eb > bsp1.out;
AMPL> display Eg >> bsp1.out;
AMPL> <Ctrl-D>
```

7.2 LP - Ein komplexeres Problem

In Wirklichkeit stellt die Firma mehr Farben her usw.:

- $n \dots$ Anzahl der Farben
- $T \dots$ verfügbare Zeit zur Herstellung
- $p_i \dots$ Profit pro Eimer der i -ten Farbe
- $r_i \dots$ Eimer pro Stunde für die i -te Farbe
- $M_i \dots$ maximale Nachfrage für Farbe i
- $x_i \dots$ herzustellende Eimer von Farbe i

$$\begin{aligned} \max \quad & \sum_{i=1}^n p_i x_i \\ \text{s.t.} \quad & \sum_{i=1}^n \frac{1}{r_i} x_i \leq T \\ & 0 \leq x_i \leq M_i \quad \forall i \end{aligned}$$



```
bsp2.mod
```

```
# Farbenbeispiel 2
```

```

param n; # Anzahl der Farben
param T; # verfügbare Zeit
param p{i in 1...n}; # Erloes
param r{i in 1...n}; # Aufwand
param M{i in 1...n}; # max. nachfrage
param E{i in 1...n}; # Eimer

maximize profit: sum{i in 1...n} p[i]*E[i];
subjet to time: sum{i in 1...n} (1/r[i]*E[i]) <= T;
subjet to grenze{i in 1...n}: 0<= M[i];

```

Das Schlüsselwort `param` kennzeichnet Parameter, d. h. Konstanten, die noch nicht spezifiziert sind.

Für die Eingabe von Daten legt man eine zweite datei an:

```
bsp2.dat
```

```

param n := 2;
param T := 40;
param p := 1 10 2 15;
param M := 1 1000
          2 860;

```

```

ampl> model bsp2.mod;
ampl> data bsp2.dat;
ampl> option solver cplex;

```

7 AMPL – A Mathematical Programming Language

```
AMPL> solve;
...
AMPL> display E;
```

bsp2a.dat

```
param n := 2;
param T := 40;
param p , M := 1 10 40 1000
              2 15 30 860;
```

7.3 Mengen

bsp3.mod

```
# Farbenbeispiel 3
set P; # Menge der Farben
param T;
param p{i in P};
param r{P}; # in neueren AMPL-Versionen
param M{P};
var E{P};

maximize profit: sum{i in P} p[i]*E[i];
subject to time: sum{i in P} E[i] / r[i] <= T;
subject to grenze{i in P}: 0 <= E[i] <= M[i];
```

bsp2a.dat

```
set P := blau gold;
param T := 40;
param p, M := blau 10 40 1000
              gold 15 30 860;
```

7.4 Zweidimensionale Daten

Ein Großhändler hat mehrere Lager und Kunden:

- $c_{ij} \dots$ Lieferkosten von Lager i zu Kunde j
- $L_i \dots$ Lagerstand in Lager i
- $B_j \dots$ Bestellung von Kunde j
- $x_{ij} \dots$ Menge, die von Lager i an Kunde j geliefert wird

$$\begin{aligned}
\min \quad & \sum_{i,j} c_{ij} x_{ij} \\
\text{s.t.} \quad & \sum_i x_{ij} = B_j \text{ für alle Kunden } j \\
& \sum_j x_{ij} \leq L_i \text{ für jedes Lager } i \\
& x_{ij} \geq 0 \quad \forall i, j
\end{aligned}$$

bsp4.mod

```

set lager;
set kunden;
param cost{i in lager, j in kunden};
param supply{lager};
param order{kunden};
var amount{i in lager, j in kunden} >= 0;

minimize total_cost: sum{i in lager, j in kunden} cost[i,j] * amount[i,j];
subject to supply{i in lager}: amount[i,j] <= supply[i];
subject to demand{j in kunden}: amount[i,j] = order[j];

```

bsp4.dat

```

set lager := Wien Sbg;
set kunden := Obi Baumax Bauhaus;

param cost:
           Wien  Sbg :=
Obi       0.9   2.8
Bauhaus  1.3   1.9
Baumax   2.4   0.1;

param supply :=
Wien  480
Sbg   370;

param order := Obi       90
               Baumax  120
               Bauhaus  370;

```

7.5 Ganzzahligkeitsbedingungen

Der farbengroßhändler aus dem Beispiel davor möchte seine bestehenden Lagerhäuser evaluieren und erneuern oder neue Lagerhäuser zubauen; natürlich so, dass die Gesamtkosten über 10 Jahre minimal sind. Lager 1 und 2 bestehen bereits. Lager 3, 4 und 5 können zugebaut werden, und zwar mit verschiedenen Kapazitäten.

- $L_b \dots$ Menge der bestehenden Lagerhäuser
- $L_n \dots$ Menge der evtl. neu zu bauenden Lagerhäuser
 $L = L_b \cup L_n$
- $K \dots$ Menge der Kunden
- $c_{ij} \dots$ Kosten des Transports einer Einheit von i nach j ($i \in L, j \in K$)
- $S_i \dots$ Kapazität von i ($i \in L$)
- $D_j \dots$ Nachfrage von j pro Woche ($j \in K$)
- $\hat{S}_i \dots$ maximale Kapazität, mit der L_n gebaut werden kann ($i \in L_n$)
- $c_i^b \dots$ Baukosten pro Kapazität ($i \in L_n$)
- $r_i \dots$ Renovierungskosten von i ($i \in L_b$)
- $x_{ij} \dots$ Menge, die von i nach j pro Woche transportiert wird ($i \in K, j \in L$)
- $T \dots$ Anzahl der Wochen in der Amortisationszeit
- $y_i \dots$ Lagerhaus offen / geschlossen ($i \in L \in \{0, 1\}$)

$$\begin{aligned}
 \min \quad & T \sum_{i,j} c_{ij} x_{ij} + \sum_{i \in L_n} S_i c_i^b + \sum_{i \in L_b} r_i y_i \\
 \text{s.t.} \quad & \sum_i x_{ij} = D_j \quad \forall j \\
 & \sum_j x_{ij} \leq S_i \quad \forall i \in L \\
 & S_i \leq \hat{S}_i y_i \quad \forall i \in L_n \\
 & x_{ij} \geq 0 \\
 & y_i \in \{0, 1\}, x_{ij} \in \mathbb{Z} \\
 & S_i = \hat{S}_i y_i \quad \forall i \in L_b \\
 & S_i \geq 0
 \end{aligned}$$

bsp5.mod

```

set warehouse_old;
set warehouse_new;
set customers;
set warehouses = warehouse_old union warehouse_new;

param cost{i in warehouses, j in customers};
param demand{j in customers};
param max_capacity{i in warehouses};
param cost_b{i in warehouse_new};
param cost_r{i in warehouse_old};
param T; # number of weeks

var capacity {i in warehouses} integer >= 0;
var amount{i in warehouses, j in customers} >= 0;
var open{i in warehouses} binary;

minimize cost:
T * sum{i in warehouses, j in customers} amount[i,j]*cost[i,j]
  + sum{i in warehouses_new} capacity[i]*cost_b[i]
  + sum{i in warehouses_old} cost_r[i]*open[i];

subject to demand{j in customers}:
    sum{i in warehouses} amount[i,j] = demand[i];
subject to supply{i in warehouses}:
    sum{j in customers} amount[i,j] <= capacity[i];
subject to capacity{i in warehouses_new}:
    capacity[i] <= max_capacity[i] * open[i];
subject to capacity2{i in warehouses_new}:
    capacity[i] = max_capacity[i] * open[i];

```

7.6 Nichtlineare Optimierung

```
option solver ipopt;
```

Portfolio-Optimierung

- A ... Assets (Anlagekategorien)
 T ... Menge von Jahren
 s_{\max} ... maximale erlaubte Standardabweichung
 R_{at} ... Ertrag von A im Jahr t ($a \in A, t \in T$)
 \bar{r}_a ... mittlere Ertrag ($\bar{R}_a = (\sum_{t \in T} R_{at})/|T|$)
 \tilde{R}_{at} ... Abweichung vom mittleren Ertrag ($\tilde{R}_{at} = \bar{R}_a - R_{at}$)
 x_a ... Menge, die in a angelegt wird

$$\begin{aligned}
 & \max \sum_a x_a \bar{R}_a \\
 & \text{s.t. } \frac{1}{|T|} \sum_{t \in T} \left(\sum_a \tilde{R}_{at} x_a \right)^2 \leq S_{\max} \\
 & \sum_a x_a = 1, x_a \geq 0 \quad \forall a
 \end{aligned}$$

bsp6.mod

```

set A; # assets
set years;
param s_max;
param R{A,T};
param R_mean{a in A} := (sum{i in years} R[a,i])/card(years);
param R_tilde{a in A, t in years} := R_mean[a] - R[a,t];
var alloc{A} >= 0;

maximize reward: sum{a in A} alloc[a] * R_mean[a];
subject to risk: (1/card(years)) * sum{t in years}
                (sum{a in A} R_tilde[a,t]*alloc[a])^2 <= s_max;
subject to cap: sum{a in A} alloc[a]=1;
  
```

```

ampl> option solver ipopt;
ampl> model bsp6.mod;
ampl> data bsp6.dat;
ampl> let {a in A} alloc[a] := 1/card(A);
ampl> solve;
...
ampl> display alloc;
  
```

Es gibt die meisten mathematischen Funktionen in AMPL:
 sin, cos, exp, sqrt, log, ...

7.7 Komplementaritäts-Nebenbedingungen

Sie treten oft in Gleichgewichtsproblemen auf: Angenommen, wir haben einen Markt, auf den Kunden kommen, um Tomaten zu kaufen. Es gibt Bauern, die ihre Tomaten zum Markt bringen, um sie mit höchstmöglichem Gewinn zu verkaufen. Ein Bauer löst das Optimierungsproblem

$$\begin{aligned}
 & \max p_i s_i + p_i a_i - c_i t_i \\
 & \text{s.t. } t_i \leq \bar{s}_i \\
 & \quad Q_i = s_i + \hat{s}_i \\
 & \quad Q_i = q(p_i) \\
 & \quad \hat{s}_i = s(p_i) \\
 & \quad s_i = t_i - a_i \\
 & \quad p_i \geq 0 \\
 & \quad t_i \geq 0 \\
 & \quad s_i \geq 0
 \end{aligned}$$

- $p_i \dots$ Preis, den Bauer i verlangt
- $s_i \dots$ Menge, die Bauer i an Kunden verkauft
- $c_i \dots$ Kosten für Herstellung, Transport u. Ä. von Bauer i
- $\bar{s}_i \dots$ maximale Menge von Bauer i
- $Q_i \dots$ Nachfrage, die Bauer i erwartet
- $\hat{s}_i \dots$ Menge, die von der Konkurrenz von i verkauft wird, nach der Erwartung von i
- $t_i \dots$ selbst mitgebracht
- $a_i \dots$ von Bauer i an Arbitraren verkauft

Arbitraren:

$$\begin{aligned}
 & \max - \sum_i a_i p_i \\
 & \text{s.t. } \sum a_i = 0
 \end{aligned}$$

Der Bauer dreht an s_i, p_i, t_i , Arbitraren dreht an a_i :

$$L(p_i, s_i, t_i, \tau_i, \psi_i, \eta_i, \sigma_i, \pi_i, \xi_i) = -p_i s_i + c_i t_i - \tau_i (\bar{s}_i - t_i) - \psi_i (Q_i(p_i) - s_i - \hat{s}_i(p_i)) - \eta_i (s_i - t_i + a_i)$$

7 AMPL – A Mathematical Programming Language

$$\begin{aligned}\frac{\partial L}{\partial p_i} &= -s_i - a_i - \psi_i \left(\frac{\partial Q_i}{\partial p_i} \right) + \psi_i \cdot \frac{\partial \hat{s}_i}{\partial p_i} \perp p_i \geq 0 \\ \frac{\partial L}{\partial s_i} &= -p_i + \psi_i - \eta_i \perp s_i \geq 0 \\ \frac{\partial L}{\partial t_i} &= c_i + \tau_i + \eta_i \perp t_i \geq 0 \\ Q_i(p_i) &= s_i + \hat{s}_i(p_i) \\ s_i &= t_i - a_i\end{aligned}$$

Arbitragen darf bei Gleichgewicht keinen Gewinn machen, weil

$$\begin{aligned}L(a_i, p^*) &= - \sum a_i p_i + p^* \cdot \sum a_i \\ \frac{\partial L}{\partial a_i} &= -p_i + p^* = 0\end{aligned}$$

Komplementaritätsproblem (Marktgleichgewichtsproblem)

$$\begin{aligned}s_i - a_i - \psi_i \frac{\partial Q_i}{\partial p}(p^*) + \psi_i \frac{\partial \hat{s}_i}{\partial p}(p^*) \perp p^* \\ -p^* + \psi_i - \eta_i \perp s_i \\ c_i + \tau_i + \eta_i \perp t_i \\ Q(p^*) = s_i + \hat{s}_i(p^*) = \sum_i s_i\end{aligned}$$

Market clearing: $\hat{s}_i(p^*) = \sum_{i \neq j} s_j$

Komplementaritätsbedingungen in AMPL

```
0 <= s[i] - a[i] - psi[i] + *((-Q0/p0)+theta) complements p >= 0;
0 <= -p + psi[i] - eta[i] complements s[i] >= 0;
0 <= c[i] + tau[i] + eta[i] complements t[i] >= 0;
```

Literaturverzeichnis

- [1] Bertsekas, Dimitri P.: *Constrained Optimization and Lagrange Multiplier Methods*. Athena Scientific 1982,
http://web.mit.edu/dimitrib/www/lagr_mult.html
- [2] Fletcher, R.: *Practical Methods of Optimization*. 2nd Edition, Wiley, 2000
- [3] Dennis, J. E., Schnabel Robert B.: *Numerical Methods for Unconstrained Optimization and Nonlinear Equations*. Society for Industrial Mathematics 1987
- [4] Bazaraa, Mokhtar S., Sherali, Hanif D., Shetty, C. M.: *Nonlinear Programming: Theory and Algorithms*. 3rd edition, John Wiley & Sons 2006
- [5] Nocedal, Jorge, Wright, Stephen J.: *Numerical Optimization*. 2nd edition, Springer 2000
- [6] Spellucci, Peter: *Numerische Verfahren der nichtlinearen Optimierung*. Birkhäuser Verlag 1993
- [7] Fourer, Robert, Gay, David M., Kernighan, Brian W.: *AMPL: A Modeling Language for Mathematical Programming*. Duxbury 2002

Stichwortverzeichnis

- abgeschlossene konvexe Hülle, 22
- Abstiegsbedingung, 52
- Abstiegsfolge, 51
- abstrakte Optimalitätsbedingungen 1.
 Ordnung, 13
- Atlas, 97

- Barriereverfahren, 67
- Bump-Funktion, 88

- Cholesky-Zerlegung, 74
- Constraint qualification, 33

- duales Optimierungsproblem, 37
- Dualitätslücke, 37

- effiziente Liniensuche, 54
- Energie, 96
- Euler-Gleichung, 86
- exakte Liniensuche, 53
- Extremalpunkt, 23

- Farkas, Lemma von, 15
- Filterverfahren, 81
- Fourier-Motzkin-Elimination, 28

- gleichmäßig konvexe Funktion, 30
- Goldstein-Bedingung, 55
- Goldstein-Quotient, 55

- Hamiltonsche Prinzip, 85
- Hesse-Matrix, reduzierte, 50

- Jacobi-Feld, 89
- Jacobi-Gleichung, 89

- Karush-Kuhn-Tucker-Bedingungen, 38

- Kegel, 14
- kompatible Karten, 97
- komplementäre Vektoren, 17
- Komplementarität, strikte, 49
- konjugierte Punkte, 91
- konkave Funktion, 9
- Konstante der Bewegung, 93
- konvexe
 - Funktion, 9
 - Hülle, 21
 - Menge, 9
- konvexe Hülle
 - abgeschlossene, 22
- kritische Punkte, 30
- Kuhn-Tucker-Bedingungen, 45
- Kuhn-Tucker-Punkt, 45

- Lagrange-Funktion, 85
- Lagrange-Relaxation, 77
- Lagrangesche Multiplikatoren, 32
- Länge, 95
- lineare Liniensuche, 53
- Liniensuche
 - effiziente, 54
 - exakte, 53
 - lineare, 53

- Maratos-Effekt, 80
- Merit-Funktion, 80
- Metriktensor, 96
- Minimum
 - nicht degeneriertes, 30
 - starkes, 30
 - starkes lokales, 49

- Nebenbedingungen, 3

Stichwortverzeichnis

Partition der Eins, 97

Polytop, 18

quadratische Approximation, 78

quadratisches Modell, 72

quasikonvexe Funktion, 9

reduzierte Hesse-Matrix, 50

reduzierten Gradienten, 59

reduzierter Gradient, 34

Relaxation, 39

Schlupfvariable, 39

Schrittweitenparameter, 52

Separationssatz, 14

SQP-Schritt, 78

Straffunktion, 63

Strafparameter, 63

Strafproblem, 63

Strafverfahren, 63

strikt konvexe Funktion, 9

Suchpfad, 52

Suchrichtung, 53

Transpositionssatz, 16

unimodale Funktion, 9

Vertrauensbereich, 72

Wirkungsintegral, 85

Wolfe-Quotient, 56