Universität Fribourg
Proseminar in Mathematik
Ch. du Musée 8
CH-1700 Fribourg

HS 2009

Proseminararbeit

Numerische Optimierung: Methode des Vertrauensbereiches 2 Kapitel 4.3 und 4.4

Lara Thalmann
Rue Louis Chollet 6
1700 Fribourg
lara.thalmann@unifr.ch

Oktober 2009

Betreut durch Jean-Paul Berrut

Inhaltsverzeichnis

1 Globale Konvergenz

1.1 Erhaltene Reduktion durch den Cauchypunkt

Globale Konvergenz hängt von der erhaltenen approximierten Lösung ab, welche die Modellfunktion m so viel reduzieren muss wie der Cauchypunkt. Wir definieren zuerst eine untere Schranke für die Senkung durch den Cauchypunkt. Anschliessend zeigen wir, dass diese Schranke auch für den Dogleg, den „two-dimensional subspace minimization“ Algorithmus, sowie den Algorithmus 4.3 (CG-Steihaug)[1] gilt.

D er Dogleg, der "two-dimensional subspace minimization“ Algorithmus, sowie der Algorithmus 4.3 produzieren alle eine approximierte Lösung p_k vom Unterproblem

$$\min_{p \,\in\, \mathbb{R}^n} m_k(p) = f_k + \nabla f_k^T p + \frac{1}{2} p^T B_k p, \tag{1.1}$$

welche die folgende Ungleichung erfüllt:

$$m_k(0) - m_k(p_k) \geq c_1 \left\|\nabla f_k\right\| \min\left(\Delta_k, \frac{\|\nabla f_k\|}{\|B_k\|}\right), \tag{1.2}$$

für eine Konstante $c_1 \in (0, 1]$.

Lemma 1. *Der Cauchypunkt p_k^c erfüllt die Gleichung (1.2) für $c_1 = \frac{1}{2}$:*

$$m_k(0) - m_k(p_k^c) \geq \frac{1}{2} \left\|\nabla f_k\right\| \min\left(\triangle_k, \frac{\|\nabla f_k\|}{\|B_k\|}\right) \tag{1.3}$$

Beweis. Erinnerung: Die Modellfunktion m und der Cauchypunkt wurden im Kapitel 4.1 wie folgt definiert:
Modellfunktion:

$$m_k(p) = f_k + \nabla f_k^T p + \frac{1}{2} p^T B_k p \tag{1.4}$$

Cauchypunkt:

$$p_k^c = -\tau_k \frac{\Delta_k}{\|\nabla f_k\|} \nabla f_k, \tag{1.5}$$

[1]Kapitel 4.1, Seite 75

wobei

$$\tau_k = \begin{cases} 1, & \text{falls} \nabla f_k^T B_k \nabla f_k \leq 0; \\ \min\left(\frac{\|\nabla f_k\|^3}{\Delta_k \nabla f_k^T B_k \nabla f_k}, 1\right), & \text{sonst.} \end{cases} \tag{1.6}$$

Das heisst für den Beweis müssen wir drei Fälle unterscheiden:

1. $\nabla f_k^T B_k \nabla f_k \leq 0$, i.e. $\tau_k = 1$ und $p_k^c = -\frac{\Delta_k}{\|\nabla f_k\|} \nabla f_k$
2. $\nabla f_k^T B_k \nabla f_k \geq 0$ und $\frac{\|\nabla f_k\|^3}{\Delta_k \nabla f_k^T B_k \nabla f_k} < 1$, i.e. $\tau_k = \frac{\|\nabla f_k\|^3}{\Delta_k \nabla f_k^T B_k \nabla f_k}$ und $p_k^c = -\frac{\|\nabla f_k\|^3}{\Delta_k \nabla f_k^T B_k \nabla f_k} \frac{\Delta_k}{\|\nabla f_k\|} \nabla f_k$
3. $\nabla f_k^T B_k \nabla f_k \geq 0$ und $\frac{\|\nabla f_k\|^3}{\Delta_k \nabla f_k^T B_k \nabla f_k} > 1$, i.e. $\tau_k = 1$ und $p_k^c = -\frac{\Delta_k}{\|\nabla f_k\|} \nabla f_k$

Zum 1. Fall:

$$\begin{aligned}
m_k(0) - m_k(p_k^c) &= m_k(0) - m_k\left(-\frac{\Delta_k}{\|\nabla f_k\|}\nabla f_k\right) \\
&= f(x_k) - f(x_k) - \nabla f_k^T \left(-\underbrace{\frac{\Delta_k}{\|\nabla f_k\|}}_{\text{Skalar}} \nabla f_k\right) \\
&\quad -\frac{1}{2}\left(-\underbrace{\frac{\Delta_k}{\|\nabla f_k\|}}_{\text{Skalar}} \nabla f_k\right)^T B_k \left(-\underbrace{\frac{\Delta_k}{\|\nabla f_k\|}}_{\text{Skalar}} \nabla f_k\right) \\
&= \frac{\Delta_k}{\|\nabla f_k\|} \underbrace{\nabla f_k^T \nabla f_k}_{\|\nabla f_k\|^2} \underbrace{-\frac{1}{2}\left(\frac{\Delta_k}{\|\nabla f_k\|}\right)^2 \underbrace{\nabla f_k^T B_k \nabla f_k}_{<0}}_{>0} \\
&\geq \Delta_k \|\nabla f_k\| \\
&\geq \|\nabla f_k\| \min\left(\triangle_k, \frac{\|\nabla f_k\|}{\|B_k\|}\right) \\
&\geq \frac{1}{2} \|\nabla f_k\| \min\left(\triangle_k, \frac{\|\nabla f_k\|}{\|B_k\|}\right)
\end{aligned}$$

Zum 2. Fall:

$$\begin{aligned}
m_k(0) - m_k(p_k^c) &= m_k(0) - m_k\left(-\frac{\|\nabla f_k\|^3}{\Delta_k \nabla f_k^T B_k \nabla f_k}\frac{\Delta_k}{\|\nabla f_k\|}\nabla f_k\right) \\
&= f(x_k) - f(x_k) - \nabla f_k^T \left(-\frac{\|\nabla f_k\|^2}{\underbrace{\nabla f_k^T B_k \nabla f_k}_{>0}}\nabla f_k\right) \\
&\quad -\frac{1}{2}\left(-\frac{\|\nabla f_k\|^2}{\underbrace{\nabla f_k^T B_k \nabla f_k}_{>0}}\nabla f_k\right)^T B_k \left(-\frac{\|\nabla f_k\|^2}{\underbrace{\nabla f_k^T B_k \nabla f_k}_{>0}}\nabla f_k\right) \\
&= \frac{\|\nabla f_k\|^2}{\nabla f_k^T B_k \nabla f_k}\underbrace{\nabla f_k^T \nabla f_k}_{\|\nabla f_k\|^2} - \frac{1}{2}\left(\frac{\|\nabla f_k\|^4}{(\nabla f_k^T B_k \nabla f_k)^2}\nabla f_k^T B_k \nabla f_k\right) \\
&= \frac{1}{2}\frac{\|\nabla f_k\|^4}{(\nabla f_k^T B_k \nabla f_k)}
\end{aligned}$$

Abschätzung von $|\nabla f_k^T B_k \nabla f_k|$:

$$\nabla f_k^T B_k \nabla f_k = \langle \nabla f_k, B_k \nabla f_k \rangle_2 \leq \|\nabla f_k\| \, \|B_k \nabla f_k\| = \|\nabla f_k\|^2 \frac{\|B_k \nabla f_k\|}{\|\nabla f_k\|}$$

$$\leq \|\nabla f_k\|^2 \underbrace{\max_{\overrightarrow{v} \in R^n, \overrightarrow{v} \neq 0} \frac{\|B_k \overrightarrow{v}\|}{\|\overrightarrow{v}\|}}_{\text{Matrixnorm}} = \|\nabla f_k\|^2 \|B_k\|,$$

das heisst:

$$\begin{aligned}
m_k(0) - m_k(p_k^c) &= \frac{1}{2}\frac{\|\nabla f_k\|^4}{(\nabla f_k^T B_k \nabla f_k)} \\
&\geq \frac{1}{2}\left(\frac{\|\nabla f_k\|^4}{\|\nabla f_k\|^2 \|B_k\|}\right) \\
&= \frac{1}{2}\|\nabla f_k\| \frac{\|\nabla f_k\|}{\|B_k\|} \\
&\geq \frac{1}{2}\|\nabla f_k\| \, min\left(\Delta_k, \frac{\|\nabla f_k\|}{\|B_k\|}\right)
\end{aligned}$$

Beim dritten Fall haben wir die gleiche Rechnung wie beim ersten. □

Wir bestimmen nun den Wert c_1, so dass die Gleichung (1.2) für beliebige Näherungslösungen gilt. Wenn die approximierte Lösung p_k die Gleichung (1.2) erfüllen soll, muss die erhaltene Reduktion mindestens so gross wie ein bestimmter Prozentsatz c_2 der Reduktion sein, welche man durch den Cauchypunkt erlangt hat.

Theorem 2. *Sei p_k ein Vektor mit $\|p_k\| \leq \Delta_k$ und sei $m_k(0)-m_k(p_k) \geq c_2\left(m_k(0) - m_k(p_k^c)\right)$.*
Dann gilt: p_k erfüllt (1.2) mit $c_1 = \frac{c_2}{2}$.
Falls p_k die exakte Lösung p_k^* von (1.1) ist, dann ist (1.2) erfüllt mit $c_1 = \frac{1}{2}$.

Beweis. Aus $\|p_k\| \leq \Delta_k$ und (1.3) folgt:

$$m_k(0) - m_k(p_k) \geq c_2\left(m_k(0) - m_k(p_k^c)\right) \geq \frac{1}{2} c_2 \|\nabla f_k\| \min\left(\triangle_k, \frac{\|\nabla f_k\|}{\|B_k\|}\right)$$

Daraus folgt die Behauptung. □

Wir bemerken hierbei, dass der Dogleg, der "two-dimensional subspace minimization" Algorithmus, sowie der Algorithmus 4.3 alle (1.2) mit $c_1 = \frac{1}{2}$ erfüllen, da alle approximierten Lösungen p_k ergeben, für welche $m_k(p_k) \leq m_k(p_k^c)$ gilt.

1.2 Konvergenz zu stationären Punkten

Für Resultate der globalen Konvergenz bei der Methode des Vertrauensbereiches gibt es zwei verschiedene Möglichkeiten, welche davon abhängen, ob man im Algorithmus 4.1[2] den Parameter $\eta = 0$ oder $\eta > 0$ wählt. Beim Fall $\eta = 0$ können wir zeigen, dass die Folge der Gradienten $\{\nabla f_k\}$ einen Häufungspunkt bei Null besitzt. Wenn aber $\eta > 0$, dann haben wir das stärkere Resultat $\nabla f_k \to 0$.
Im folgenden Abschnitt beweisen wir die Konvergenz für beide Fälle. Zuerst müssen wir aber einige Voraussetzungen treffen:

1. Die approximierte Hessematrix ist beschränkt in der Norm, i.e. $\|B_k\| \leq \beta$ für $\beta = \text{const.}$ und unabhängig von k.
2. Die Niveaumenge $\{x \mid f(x) \leq f(x_0)\}$ ist beschränkt.
3. Wir erlauben, dass die Länge der approximierten Lösung p_k von (1.1) die Grenze des Vertrauensbereiches überschreiten darf, aber nur um ein bestimmtes Vielfaches, i.e. $\|p_k\| \leq \gamma \Delta_k$ mit $\gamma = \text{const.}$

[2] Kapitel 4, Seite 68

Z um Fall $\eta = 0$:

Theorem 3. *Seien $\eta = 0$ im Algorithmus 4.1 und die Voraussetzungen 1., 2. und 3. erfüllt. Zudem soll f stetig differenzierbar sein. Die approximierte Lösung p_k des Unterproblems (1.1) soll die Ungleichung (1.2) erfüllen für ein $c_1 > 0$.*
Dann gilt:

$$\liminf_{k\to\infty} \|\nabla f_k\| = 0 \tag{1.7}$$

Beweis. Im Kapitel 4 wurde zu Beginn gezeigt, wie man die Grösse des Vertrauensintervall wählt. Man berechnet den folgenden Quotienten:

$$\rho_k = \frac{f(x_k) - f(x_k + p_k)}{m_k(0) - m_k(p_k)} \tag{1.8}$$

Wir wollen zunächst diesen Quotienten technisch manipulieren:

$$|\rho_k - 1| = \left| \frac{(f(x_k) - f(x_k + p_k)) - (m_k(0) - m_k(p_k))}{m_k(0) - m_k(p_k)} \right| = \left| \frac{m_k(p_k) - f(x_k + p_k)}{m_k(0) - m_k(p_k)} \right|$$

Vom Theorem 2.1 (Taylor's Theorem) wissen wir:

$$f(x_k + p_k) = f(x_k) + \nabla f(x_k)^T p_k - \int_0^1 \left[\nabla f(x_k + tp_k) - \nabla f(x_k)\right]^T p_k dt.$$

Daraus folgt mit der Definition der Modellfunktion (1.4)

$$\begin{aligned}
|m_k(p_k) - f(x_k + p_k)| &= \left| \frac{1}{2} p_k^T B_k p_k - \int_0^1 \left[\nabla f(x_k + tp_k) - \nabla f(x_k)\right]^T p_k dt \right| \\
&\leq \left| \frac{1}{2} p_k^T B_k p_k \right| + \left| \int_0^1 \left[\nabla f(x_k + tp_k) - \nabla f(x_k)\right]^T p_k dt \right| \\
&\leq \left| \frac{1}{2} p_k^T B_k p_k \right| + \int_0^1 \|\nabla f(x_k + tp_k) - \nabla f(x_k)\|_2 \|p_k\|_2 \, dt \\
&\leq \frac{\beta}{2} \|p_k\|^2 + \underbrace{\int_0^1 \|\nabla f(x_k + tp_k) - \nabla f(x_k)\|_2 \, dt}_{C_4(p_k) \overset{\|p_k\|\to 0}{\to} 0} \|p_k\|_2
\end{aligned}$$

Daraus folgt:

$$|m_k(p_k) - f(x_k + p_k)| \leq \frac{\beta}{2} \|p_k\|^2 + C_4(p_k) \|p_k\| \tag{1.9}$$

Beweis durch Widerspruch:
Annahme:

$$\exists\, \varepsilon > 0 \text{ und } \exists\, K \in \mathbb{N} \text{ so dass } \forall k \geq K \text{ gilt: } \|\nabla f_k\| \geq \varepsilon \tag{1.10}$$

Mit (1.2) folgt:

$$m_k(0) - m_k(p_k) \geq c_1 \|\nabla f_k\| \min\left(\Delta_k, \frac{\|\nabla f_k\|}{\|B_k\|}\right) \geq c_1 \varepsilon \min\left(\Delta_k, \frac{\varepsilon}{\beta}\right) \tag{1.11}$$

Indem wir zusätzlich (1.11), (1.9) und die dritte Voraussetzung benutzen, können wir den Quotienten ρ_k folgendermassen verändern:

$$|\rho_k - 1| \leq \frac{\gamma\Delta_k \left(\frac{\beta\gamma\Delta_k}{2} + C_4(p_k)\right)}{c_1\varepsilon \min\left(\Delta_k, \frac{\varepsilon}{\beta}\right)} \tag{1.12}$$

Wir leiten nun für die rechte Seite der Gleichung eine Schranke her, welche für alle genügend kleinen Werte von Δ_k gelten soll, das heisst für alle $\Delta_k \leq \bar{\Delta}$, wobei $\bar{\Delta}$ eine globale Schranke für die Schrittlänge ist, welche bestimmt werden muss. Wenn wir $\bar{\Delta}$ genug klein wählen und anmerken, dass $\|p_k\| \leq \gamma\Delta_k \leq \gamma\bar{\Delta}$, dann können wir sicherstellen, dass der Wert in der Klammer im Zähler der Gleichung (1.12) die folgende Schranke besitzt

$$\frac{\beta\gamma\Delta_k}{2} + C_4(p_k) \leq \frac{c_1\varepsilon}{2\gamma}.$$

Falls wir $\bar{\Delta}$ noch kleiner wählen, so klein, dass $\Delta_k \leq \bar{\Delta} \leq \frac{\varepsilon}{\beta}$ gilt, erhalten wir von (1.12), dass

$$|\rho_k - 1| \leq \frac{\frac{\gamma\Delta_k\varepsilon}{(2\gamma)}}{c_1\varepsilon\Delta_k} = \frac{1}{2}.$$

Folglich ist $\rho_k > \frac{1}{2} > \frac{1}{4}$. Dass heisst, wenn wir den Algorithmus 4.1 betrachten, dass $\Delta_{k+1} \geq \Delta_k$ immer gilt, vorausgesetzt Δ_k ist kleiner als der Grenzwert $\bar{\Delta}$. Es ergibt sich, dass eine Reduktion von Δ_k (durch den Faktor $\frac{1}{4}$) im Algorithmus nur auftreten kann, wenn $\Delta_k \geq \bar{\Delta}$, und daraus können wir folgern, dass

$$\Delta_k \geq \min\left(\Delta_K, \frac{\bar{\Delta}}{4}\right) \tag{1.13}$$

für alle $k \geq K$.

Nehmen wir nun an, dass es eine unendliche Unterfolge κ gibt, so dass $\rho_k \geq \frac{1}{4}$ für alle $k \in \kappa$. Falls $k \in \kappa$ und $k \geq K$, erhalten wir vom (1.11), dass

$$f(x_k) - f(x_{k+1}) = f(x_k) - f(x_k + p_k) \geq \frac{1}{4}\left[m_k(0) - m_k(p_k)\right] \geq \frac{1}{4} c_1 \varepsilon \min\left(\Delta_k, \frac{\varepsilon}{\beta}\right)$$

Da f beschränkt ist, folgt aus der Ungleichung, dass

$$\lim_{k\in\kappa, k\to\infty} \Delta_k = 0,$$

welches aber einen Widerspruch zu (1.13) bildet. Daraus folgt, dass keine solche Unterfolge κ existieren kann und wir müssen $\rho_k < \frac{1}{4}$ für alle k genügend gross haben. In diesem Fall ist es möglich, dass Δ_k bei jeder Iteration durch den Faktor $\frac{1}{4}$ dividiert wird und wir haben $\lim_{k\to\infty} \Delta_k = 0$, was aber ein Widerspruch zu (1.13) ist. Deshalb muss unsere Annahme (1.10) falsch sein und daraus folgt die Behauptung. □

F ür das zweite Resultat der globalen Konvergenz, der Fall wo $\eta > 0$ ist, haben wir folgendes Theorem:

Theorem 4. *Seien $\eta \in \left(0, \frac{1}{4}\right)$ im Algorithmus 4.1 und die Voraussetzungen 1., 2. und 3. erfüllt. Zudem soll f Lipschitz stetig differenzierbar sein. Die approximierte Lösung p_k des Unterproblems (1.1) erfülle die Ungleichung (1.2) für ein $c_1 > 0$.*
Dann gilt:

$$\lim_{k\to\infty} \Delta f_k = 0.$$

Beweis. Wir bestimmen einen Index m, so dass $\nabla f_m \neq 0$. Wenn wir β_1 als Lipschitzkonstante für ∇f in der Niveaumenge $\{x \mid \nabla f(x) \leq \nabla f(x_m)\}$ bestimmen, erhalten wir:

$$\|\nabla f(x) - \nabla f_m\| \leq \beta_1 \|x - x_m\|, \forall x \in \{x \mid \nabla f(x) \leq \nabla f(x_m)\}$$

Deswegen haben wir, wenn wir das Skalar $\varepsilon = \frac{1}{2}\|\nabla f_m\|$ und $R = \frac{\|\nabla f_m\|}{2\beta_1} = \frac{\varepsilon}{\beta_1}$ sowie den Ball $\mathcal{B}(x_m, R)$ definieren:

$$x \in \mathcal{B}(x_m, R) \Rightarrow \|\nabla f(x)\| \geq \|\nabla f_m\| - \|\nabla f(x) - \nabla f_m\| \geq \frac{1}{2}\|\nabla f_m\| = \varepsilon$$

Würde die ganze Folge $\{x_k\}_{k\geq m}$ im Innern des Balles $\mathcal{B}(x_m, R)$ bleiben, hätten wir $\|\nabla f_k\| \geq \varepsilon > 0$, $\forall k \geq m$. Wir wissen aber durch den Beweis des Theorems (3) dass dieses Szenario nicht auftritt. Sei $\ell \geq m$ der Index, so dass $x_{\ell+1}$ die erste Iteration ist, welche sich ausserhalb des Balles $\mathcal{B}(x_m, R)$ befindet. Das heisst, dass $\|\nabla f_k\| \geq \varepsilon \quad \forall\, k = m, m+1, ..., \ell$. Mit (1.11) können wir schreiben

$$\begin{aligned} f(x_m) - f(x_{\ell+1}) &= \sum_{k=m}^{\ell} f(x_k) - f(x_{k+1}) \\ &\geq \sum_{k=m, x_k \neq x_{k+1}}^{\ell} \eta\,[m_k(0) - m_k(p_k)] \\ &\overset{(1.11)}{\geq} \sum_{k=m, x_k \neq x_{k+1}}^{\ell} \eta c_1 \varepsilon \min\left(\Delta_k, \frac{\varepsilon}{\beta}\right) \end{aligned}$$

Falls $\Delta_k \leq \frac{\varepsilon}{\beta} \quad \forall\, k = m, m+1, ..., \ell$ haben wir

$$f(x_m) - f(x_{\ell+1}) \geq \eta c_1 \varepsilon \sum_{k=m, x_k \neq x_{k+1}}^{\ell} \Delta_k \geq \eta c_1 \varepsilon R = \eta c_1 \varepsilon^2 \frac{1}{\beta_1} \tag{1.14}$$

Falls $\Delta_k \geq \frac{\varepsilon}{\beta}$ für einige $k = m, m+1, ..., \ell$, erhalten wir

$$f(x_m) - f(x_{\ell+1}) \geq \eta c_1 \varepsilon \frac{\varepsilon}{\beta}. \tag{1.15}$$

Da die Folge $\{f(x_k)\}_{k=0}^{\infty}$ monoton fällt und gegen unten beschränkt ist, haben wir $f(x_k) \downarrow f^*$ für ein $f^* > -\infty$. Indem wir (1.14) und (1.15) anwenden, erhalten wir

$$f(x_m) - f^* \geq f(x_m) - f(x_{\ell+1}) \geq \eta c_1 \varepsilon^2 \min\left(\frac{1}{\beta}, \frac{1}{\beta_1}\right) = \frac{1}{4}\eta c_1 \min\left(\frac{1}{\beta}, \frac{1}{\beta_1}\right) \|\nabla f_m\|^2$$

$$\Leftrightarrow \|\nabla f_m\|^2 \leq \left(\frac{1}{4}\eta c_1 \min\left(\frac{1}{\beta}, \frac{1}{\beta_1}\right)\right)^{-1} (f(x_m) - f^*)$$

Da $f(x_k) \downarrow f^*$ folgt $\nabla f_m \to 0$. □

1.3 Konvergenz von Algorithmen, welche auf fast exakten Lösungen basieren

Für den Dogleg, den "two-dimensional subspace minimization“ Algorithmus, sowie Algorithmus 4.3 konnten wir anhand des Cauchypunktes eine untere Schranke für die Senkung herleiten (1.2). Dies war der Fall, da für jede approximierte Lösung p_k des Unterproblems (1.1) gilt: $m_k(p_k) \leq m_k(p_k^c)$. Damit konnte man die globale Konvergenz beweisen.
Es gibt aber Algorithmen[3] bei denen die Schlaufe, welche die genauen Werte für p vom Unterproblem

$$\min_{p \,\in\, \mathbb{R}^n} m(p) = f + g^T p + \frac{1}{2} p^T B p \tag{1.16}$$

berechnet, nicht so lange iteriert bis eine grosse Präzision erreicht wird. Stattdessen wird es nach zwei oder drei Iterationen beendet und die approximierte Lösung ist ziemlich weit entfernt von der genauen Lösung. Moré und Sorensen haben einen Weg gefunden, auch für diese Algorithmen die globale Konvergenz zu beweisen.
Das Abschlusskriterium, welches bestimmt, wann der Algorithmus beendet werden soll, gewährleistet, dass die approximierte Lösung p die Bedingungen

$$m(0) - m(p) \geq c_1(m(0) - m(p^*)) \tag{1.17}$$
$$\|p\| \leq \gamma\Delta \tag{1.18}$$

erfüllt (p^* ist die exakte Lösung von (1.1)), für $c_1 \in (0, 1]$ und $\gamma > 0$. Die Bedingung (1.17) gewährleistet, dass die approximierte Lösung einen signifikanten Bruch von der maximalen möglichen Senkung in der Modellfunktion m erreicht.
Eine Hauptunterschied zwischen (1.17) und dem früheren Kriterium (1.2) ist, dass (1.17) dem Term $p^T Bp$ in der Gleichung (5) mehr Beachtung beimisst.

[3] z.B. Algorithmus 4.4 (Exact Trust Region), Seite 81

Theorem 5. *Es werde der Algorithmus 4.1 mit* $B_k = \nabla^2 f(x_k)$ *und konstantem* $\eta \in \left(0, \frac{1}{4}\right)$ *angewandt und erfülle die approximierte Lösung* p_k *(1.17) bei jeder Iteration für ein bestimmtes* $\gamma > 0$.

Dann gilt:

$$\lim_{k\to\infty} \|\nabla f_k\| = 0.$$

Falls zudem die Niveaumenge $\{x \mid f(x) \leq f(x_0)\ \}$ *kompakt (i.e. abgeschlossen und beschränkt ist), dann endet der Algorithmus entweder an einem Punkt* x_k*, bei dem das Theorem 2.3 (second-order necessary conditions)*[4] *für ein lokales Minimum gilt oder* $\{x_k\}$ *hat einen Häufungspunkt* x^* *in der Niveaumenge bei welchen die notwendigen Bedingungen gelten.*

Beweis. Siehe Moré und Sorensen [170, Section 4]. □

[4] If x^* is a local minimizer of f and $\nabla^2 f$ is continuous in an open neighborhood of x^*, then $\nabla f(x^*) = 0$ and $\nabla^2 f(x^*)$ is positive semidefinite. (Seite 34)

2 Andere Erweiterungen

2.1 Skalierung

Wie wir im Kapitel 2 gesehen haben, haben Optimisationsprobleme oft eine mangelhafte Skalierung. Das heisst, topologisch gesehen liegt das Minimum x^* in einem schmalen Tal. Die Niveaulinien bilden Ellipsen, welche eine sehr kurze Achse in der empfindlichen Richtung haben, und lange in der weniger empfindlichen Richtung. Daraus folgt, dass eine Kugel als Vertrauensbereich nicht geeignet ist. Besser wäre es eine Ellipse zu haben, welche eine ähnliche Form wie die Niveaulinien hat. Dies erhalten wir, indem wir den Vertrauensbereich folgendermassen defnieren

$$\|Dp\| \leq \Delta, \tag{2.1}$$

wobei D eine Diagonalmatrix mit nur positiven Elementen ist. Das ergibt folgendes Unterproblem mit skaliertem Vertrauensbereich :

$$\min_{p \in \mathbb{R}^n} m(p) \overset{\text{def}}{=} f_k + \nabla f_k^T p + \frac{1}{2} p^T B_k p \qquad s.d. \; \|Dp\| \leq \Delta_k. \tag{2.2}$$

Falls $f(x)$ sehr empfindlich in der i-ten Komponente von x ist, dann setzen wir das entsprechende diagonale Element d_{ii} von D gross. Der Wert von d_{ii} ist näher bei null, wenn die Komponente von x_i weniger empfindlich ist.
Alle Algorithmen, welche in diesem Kapitel besprochen wurden, können an die ellipsenförmigen Vertrauensbereiche angepasst werden. Die Konvergenztheorie gilt mit vielen oberflächlichen Modifikationen trotzdem. Zum Beispiel der Algorithmus 4.2 [1] um den Cauchypunkt zu berechenen verändert sich nur in der Spezifikation des Vertrauensbereiches.

[1]Kapitel 4.1, Seite 69

Algorithm 1 Generalized Cauchy Point Calculation

Finde den Vektor p_k^s, welcher

$$p_k^s = \arg \min_{p \in \mathbb{R}^n} f_k + \nabla f_k^T p \qquad \text{s.d. } \|Dp\| \leq \Delta_k.$$

erfüllt. Berechne das Skalar $\tau_k > 0$, welches $m_k(\tau p_k^s)$ minimiert. Das ist

$$\tau_k = \arg \min_{\tau > 0} m_k(\tau p_k^s) \qquad \text{s.d. } \|\tau D p_k^s\| \leq \Delta_k$$

$$p_k^c = \tau_k p_k^s$$

Für diese skalierte Version stellen wir fest, dass

$$p_k^s = -\frac{\Delta_k}{\|D^{-1}\nabla f_k\|} D^{-2} \nabla f_k,$$

und dass wir die Schrittlänge τ_k aus der folgenden Veränderung erhalten:

$$\tau_k = \begin{cases} 1, & \text{falls } \nabla f_k^T D^{-2} B_k D^{-2} \nabla f_k \leq 0 \\ \min\left(\frac{\left\|D^{-1}\nabla f_k\right\|^3}{\Delta_k \nabla f_k^T D^{-2} B_k D^{-2} \nabla f_k}, 1 \right), & \text{sonst.} \end{cases}$$

Eine einfachere Alternative, um die Definition des Cauchypunktes auf die verschiedenen Algorithmen dieses Kapitels für den ellipsenförmigen Vertrauensbereich anzupassen ist, die Variablen p im Unterproblem (2.2) erneut so zu skalieren, dass der Vertrauensbereich in den skalierten Variablen kugelförmig ist.

Indem wir $\tilde{p} \stackrel{\text{def}}{=} Dp$ definieren und in (2.2) einsetzen, erhalten wir

$$\min_{p \in \mathbb{R}^n} \tilde{m_k}(\tilde{p}) \stackrel{\text{def}}{=} f_k + \nabla f_k^T \tilde{p} + \frac{1}{2} p^T B_k \tilde{p} \qquad s.d. \ \|\tilde{p}\| \leq \Delta_k.$$

Die Theorie und die Algorithmen können nun in gewöhnlicher Weise angewendet werden, indem man $\tilde{p}$ für p, $D^{-1}\nabla f_k$ für ∇f_k, $D^{-1} B_k D^{-1}$ für B_k etc. substituiert.

2.2 Nicht euklidische Vertrauensbereiche

Vertrauensbereiche können auch mit einer anderen Norm als der euklidischen definiert werden.

Zum Beispiel:

$$\|p\|_1 \leq \Delta_k \qquad \text{oder} \qquad \|p\|_\infty \leq \Delta_k$$

oder ihr skaliertes Gegenstück

$$\|Dp\|_1 \leq \Delta_k \qquad \text{oder} \qquad \|Dp\|_\infty \leq \Delta_k,$$

wobei D die positive Diagonalmatrix ist.
Normen wie diese erbringen keine ersichtlichen Vorteile für Optimisationsprobleme, welche an keine speziellen Bedingungen geknüpft sind, dafür vielleicht für einige Probleme, welche spezielle Voraussetzungen aufweisen.

Literaturverzeichnis

[1] Jorge Nocedal, Stephen J. Wright, „Numerical Optimization“, 1999 (Springer-Verlag)