ZUR MINIMIERUNG NICHTDIFFERENZIERBARER PROGRAMMIERBARER FUNKTIONEN

Inaugural-Dissertation
zur
Erlangung des Doktorgrades
der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät
der Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf

vorgelegt von
Christiane Sonnenschein
geb. Görges
aus Dortmund

Düsseldorf
1998

Gedruckt mit Genehmigung der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultt der Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf

Referent: Prof. Dr. Helmut Ratschek
Koreferent: Prof. Dr. Kristian Witsch

Tag der mündlichen Prüfung: 13. Januar 1999

Bezeichnungen

Sei $M \subseteq \mathbb{R}^n$.

$\|\cdot\|$	euklidische Norm im $\mathbb{R}^n$
$\|\cdot\|_\infty$	Maximumsnorm im $\mathbb{R}^n$
$U(x,\mu)$	$\{y \in \mathbb{R}^n : \|x-y\| < \mu\}$
$B(x,\mu)$	$\{y \in \mathbb{R}^n : \|x-y\| \leq \mu\}$
$M + B(0,\mu)$	$\{x + y : x \in M, \|y\| \leq \varepsilon\}$
X^ε, $x \in \mathbb{R}^n$	$\{y \in \mathbb{R}^n : \|x-y\|_\infty \leq \varepsilon\}$
$\wp(M)$	Potenzmenge einer Menge M
$\mathbb{I}(M)$	Menge der n-dimensionalen Intervalle über M
$\mathrm{lb}A, A \in \mathbb{I}(\mathbb{R})$	untere Grenze von A
$\mathrm{ub}A, A \in \mathbb{I}(\mathbb{R})$	obere Grenze von A
$\mathrm{int}M$	das Innere der Menge M
$\mathrm{cl}M$	der Abschuß der Menge M
$\mathrm{conv}M$	die konvexe Hülle der Menge M
$\overline{x,y}$	die abgeschlossene Strecke von x nach y
$x^{(i)}$ für $x \in \mathbb{R}^n$	i-te Komponente von x
1_n	der n-dimensionale Vektor $(1,\ldots,1)^t$
0_n	der n-dimensionale Vektor $(0,\ldots,0)^t$
$\#I$	Anzahl der Elemente einer abzählbaren Menge I
$e^{(i)} \in \mathbb{R}^n$	i-ter Einheitsvektor im $\mathbb{R}^n$
$E_n \in \mathbb{R}^{n\times n}$	Einheitsmatrix im $\mathbb{R}^n$
oBdA	ohne Beschränkung der Allgemeinheit

Einleitung

In der vorliegenden Arbeit werden Optimierungsprobleme der Form

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) \tag{1}$$

für lokal Lipschitz stetige Funktionen $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ betrachtet. Nach einem Satz von Rademacher (Satz 1.1.3) ist eine Funktion, die in einer offenen Teilmenge U des $\mathbb{R}^n$ Lipschitz stetig ist, dort fast überall (im Sinne des Lebesguemaßes) differenzierbar. Ω_f sei die Menge aller $x \in \mathbb{R}^n$, in denen f nicht differenzierbar ist. Die Ableitungsinformation an einer Stelle $x \in \mathbb{R}^n$ für lokal Lipschitz stetige Funktionen ist durch die sogenannten *Subgradienten* gegeben, die Elemente des *Subdifferentials* sind. Das Subdifferential $\partial f(x)$ von f in x nach Clarke [8] – siehe auch [9], [67] oder [101] – ist eine kompakte, konvexe Menge und gemäß Satz 1.1.12 mit einer beliebigen Menge S vom Maß 0 charakterisierbar durch

$$\begin{aligned} \partial f(x) = \ & \operatorname{conv}\{\xi \in \mathbb{R}^n : \exists (x_i) \subset \mathbb{R}^n \setminus (\Omega_f \cup S) \text{ mit} \\ & \lim_{i\to\infty} x_i = x \text{ und } \lim_{i\to\infty} \nabla f(x_i) = \xi\}. \end{aligned}$$

In dem Bereich der nichtglatten Optimierung, der sich mit der Bestimmung lokaler Lösungen von (1) beschäftigt, gibt es eine große Zahl von Subgradientenverfahren, die auf diesem Begriff basieren, wie zum Beispiel in [49], [75], [100], [103], [104], [107], [110] und [113]. Wolfe konstruierte 1975 in [107] eine Funktion, anhand derer demonstriert wird, daß eine direkte Übertragung des Verfahrens des steilsten Abstiegs aus der glatten Optimierung, die C^1-Funktionen behandelt, auf den Subgradientenansatz nicht möglich ist. Es kann passieren, daß Konvergenz gegen einen Punkt erfolgt, der keine Lösung ist. Aufgrund dieser Beobachtung kam man zu dem Ansatz, das Subdifferential nicht nur im aktuellen Iterationspunkt, sondern für eine Umgebung dieses Punktes zu betrachten. Der Begriff des ε-Subdifferentials für $\varepsilon > 0$

entstand. Zunächst wurden konvexe Funktionen betrachtet, für die das ε-Subdifferential durch

$$\partial_\varepsilon^C f(x) = \{\xi \in \mathbb{R}^n : f(y) \geq f(x) + \xi^t(y-x) - \varepsilon \text{ für alle } y \in \mathbb{R}^n\}$$

definiert ist. Goldstein [24] führte für lokal Lipschitz stetige Funktionen das ε-Subdifferential als

$$\partial_\varepsilon f(x) = \text{conv}\{\partial f(y) : y \in B(x;\varepsilon)\}$$

ein. Auf diese Definition stützen sich unsere Betrachtungen. Grundlagen zur nichtglatten Analysis und Optimierungstheorie werden in Kapitel 1 bereitgestellt.

In der vorliegenden Arbeit haben wir die Idee der sogenannten *ε-Bündel-Verfahren* als Ausgangspunkt gewählt. Sie gehen für den konvexen Fall auf Claude Lemaréchal [63], [65] zurück und erfuhren viele Erweiterungen wie in [49], [52], [67], [73], [74] und [75]. Ihr Ansatz besteht darin, das ε-Subdifferential durch ein Polytop P, welches durch einzelne Subgradienten erzeugt wird, von innen zu approximieren. Aus diesem Polytop $P \subseteq \partial_\varepsilon f(x)$ wird eine Suchrichtung bestimmt und entlang dieser eine Liniensuche durchgeführt, um den nächsten Iterationspunkt zu berechnen. Die Schwierigkeiten dieser Verfahrensklasse liegen in der sogenannten *Verwaltung des Bündels* und der Möglichkeit eines *Nullschritts*. Unter der Verwaltung des Bündels vesteht man das Speichern der Subgradienten g_i, durch die P aufgebaut wird, und der dazugehörigen Punkte y_i mit $g_i \in \partial f(y_i)$ für i aus einer endlichen Indexmenge I. Um den numerischen Aufwand zu kontrollieren, läßt man lediglich eine gewisse Anzahl solcher Bündelpaare (y_i, g_i) zu. Das Bündel muß demnach aktualisiert werden. Hierbei ist es wichtig, die richtige Auswahl zu treffen und nicht mehr relevante Information wegfallen zu lassen. Mit der Hinzunahme neuer Subgradienten eng verbunden ist der Nullschritt innerhalb der Liniensuche. Läßt sich nämlich entlang der berechneten Suchrichtung kein hinreichend guter Abstieg erzielen, werden der aus der Liniensuche resultierende Punkt als ein weiteres y_j und ein entsprechender Subgradient $g_j \in \partial f(y_j)$ dem Bündel hinzugefügt. Die Approximation des ε-Subdifferentials durch P wird auf diese Weise verbessert, um anschließend eine neue Richtung zu generieren.

Dieser Nachteil motivierte uns dazu, über die Möglichkeiten einer Approximation des ε- Subdifferentials von außen nachzudenken. Wir verwenden dazu Techniken der Intervallarithmetik, die sich dadurch auszeichnen, mittels eines Rechenschritts Auswertungen über einer ganzen Umgebung durchzuführen.

Diese Umgebung hat im $\mathbb{R}^n$ die Gestalt eines n-dimensionalen Intervalls – in Zukunft kurz *Box* genannt. Eine Einführung in die dazugehörigen Grundbegriffe findet man im zweiten Teil des ersten Kapitels.

So entstand ein erster Ansatz, der in einer gemeinsamen Arbeit [22], [23] mit H. Ratschek veröffentlicht wurde und in Kapitel 2 zusammengefaßt wird. Ist x_k der aktuelle Iterationspunkt und X_k^ε die Box mit Mittelpunkt x_k und Seitenlänge 2ε, so konstruieren wir eine Subgradientenbox

$$F_k' \supseteq \bigcup_{u \in X_k^\varepsilon} \partial f(u).$$

Hiermit lösen wir das Problem

$$\min_{g \in F_k'} \|g\|$$

und bestimmen dadurch eine garantierte Abstiegsrichtung d_k, entlang der die Liniensuche $\min f(x_k + td_k)$ mit $t > 0$ durchgeführt wird. Da die Abbruchbedingung durch $0 \in F_k'$ festgelegt wird, ist die Gestalt der Subgradientenbox für ein positives Resultat entscheidend. Das einfache Beispiel der Funktion Maxl (2.5) im zweidimensionalen Fall, die dafür definiert ist durch $f(x) = \max\{|x^{(1)}|, |x^{(2)}|\}$, wird zeigen, daß ein Abbruch des Verfahrens erfolgen kann, obwohl der Iterationspunkt von einer lokalen Minimalstelle noch weit entfernt ist. Diese Beobachtung motivierte die neuen Ergebnisse der vorliegenden Arbeit.

In Kapitel 3 besteht unser Ziel darin, die Informationen der Subgradientenbox geeignet zu nutzen und den beschriebenen Algorithmus durch die Lösung eines anderen Unterproblems fortzusetzen. Unter der Standardannahme, daß $N_0 := \{x \in \mathbb{R}^n : f(x) \leq f(x_0)\}$ für ein beliebiges $x_0 \in \mathbb{R}^n$ beschränkt sei, können wir uns auf einen kompakten Arbeitsbereich $N \supset N_0$ zurückziehen. Hierüber führen wir C^1-Wegkomponenten zur Aufspaltung von $N \setminus \Omega_f$ und $N \cap \Omega_f$ ein. Die Wegkomponenten steuern eine Subgradientenauswahl, die in jedem Iterationsschritt in Ergänzung zur Konstruktion von F_k' erfolgt. Dabei werden in X_k^ε geeignete Argumentpunkte bestimmt, deren dazugehörige Subgradienten der Bildung einer kompakten, konvexen Menge $G_k \subseteq F_k'$ dienen. Das neue Unterproblem zur Wahl einer Abstiegsrichtung wird definiert durch

$$\min_{d \in -F_k'} \max_{\xi \in G_k} \xi^t d.$$

Die Formulierung orientiert sich an der Charakterisierung der *verallgemeinerten Richtungsableitung* $f^\circ(x_k, d)$ durch

$$f^\circ(x_k, d) = \max_{\xi \in \partial f(x_k)} \xi^t d,$$

vergleiche [8], [9] oder [67]. Wir beweisen die globale Konvergenz des Algorithmus, der durch dieses Unterproblem und eine exakte Liniensuche aufgebaut wird, für eine Klasse von Funktionen, die im wesentlichen durch eine stückweise C^1-Eigenschaft gekennzeichnet ist. Im Anschluß daran erweitern wir die Menge G_k und damit auch das neue Unterproblem, um auch im allgemeinen Fall globale Konvergenz zu garantieren. Dabei nutzen wir die Intervallidee und vergrößern die Subgradientenauswahl durch eine Erweiterung der Argumentpunkte zu kleinen Boxen.

Alternativ zu der Vorgehensweise, eine Methode durch Richtungs- und Liniensuche aufzubauen, stellen wir in Kapitel 4 den *Trust-Region-Ansatz* vor, vergleiche [5], [18], [66], [71] oder [87]. Dieser besteht darin, die Zielfunktion f in x_k+d durch ein Modell zu beschreiben und dieses in jedem Iterationsschritt über einer Umgebung $\|d\| \leq \rho_k$ zu optimieren. Die Normbeschränkung von d drückt die lokale Güte des Modells aus und kennzeichnet die sogenannte *Trust-Region*. Wir geben einen Überblick über die Grundidee und bekannte Verfahren nach [52] und [65] sowie insbesondere über den Ansatz von Helga Schramm, [97] und [98], der eine Verbindung zwischen ε-Bündelverfahren und der Trust-Region-Idee herstellt. Wir verwenden F_k' und die Menge G_k zum Aufbau eines Modells für f in $x_k + d$, das zur Bestimmung eines neuen Iterationspunktes gebildet und über $d \in -\tau_k F_k'$ mit $\tau_k > 0$ minimiert wird. Die Subgradientenauswahl geht wesentlich in die Modellbildung ein. Auf diese Weise entsteht ein völlig neuer Zugang. Eine direkte Einbindung der Trust-Region-Idee in die in Kapitel 3 hergeleitete Vorgehensweise wird sich als nicht möglich erweisen.

Die Kapitel 5 bis 7 beschäftigen sich mit der Anwendung des hergeleiteten Ansatzes. Wir legen die Klasse der *programmierbaren Funktionen* zugrunde. Zu einer programmierbaren Funktion existiert ein deterministischer Algorithmus in einer nicht rekursiven Programmiersprache, so daß sich die Funktionswerte durch endliche viele Operationen berechnen lassen. In Kapitel 5 beschäftigen wir uns mit der Konstruktion der Subgradientenbox F_k' durch intervallarithmetische Methoden, siehe [2], [30], [77], [81], [85], [86] und [88]. Wichtig ist der Begriff der *Inklusionsfunktion*. Für $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ ist $F : \mathbb{I}(\mathbb{R}^n) \to \mathbb{I}(\mathbb{R})$ eine Inklusionsfunktion, wenn für jede Box $A \in \mathbb{I}(\mathbb{R}^n)$

gerade

$$\{f(a) : a \in A\} \subseteq F(A)$$

gilt. Hat f die angesprochene stückweise C^1-Eigenschaft, läßt sich F'_k durch Inklusionsfunktionen des Gradienten von f in den C^1-Wegkomponenten von $N \setminus \Omega_f$ aufbauen. Ganz ohne Ableitungsinformation werden die sogenannten *Intervallslopes* berechnet. Das sind Mengen $s_f(c, X) \subseteq \mathbb{R}^n$ für $X \in \mathbb{I}(\mathbb{R}^n), c \in \mathbb{R}^n$ und $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ mit der Eigenschaft

$$f(x) \in f(c) + s_f(c, X) \cdot (x - c)$$

für alle $x \in X$. Intervallslopes sind vor allem bei neueren intervallarithmetischen Verfahren zur globalen Optimierung nichtglatter Funktionen der Schlüssel zum Erfolg (vergleiche [46], [48], [92] und [93]). Wir stellen eine erste Verbindung der Slopes zu unserer Methode her.

Das von uns entwickelte Verfahren haben wir für den stückweisen C^1-Fall implementiert und an Standardbeispielen getestet. Die dortige Vorgehensweise ist auf die Klasse der programmierbaren Funktionen erweiterbar, wenn Ableitungsinformation verfügbar ist. Die Implementierung dokumentieren wir in Kapitel 6, präsentieren dazugehörige theoretische Ergebnisse und gehen auf die Lösung des eindimensionalen Unterproblems durch die Liniensuche ein. Die numerischen Resultate werden in Kapitel 7 vorgestellt. Sie dokumentieren zudem die Problematik des ersten Ansatzes aus [22] und belegen dessen Wirkungsweise mit mehr Testergebnissen, als bisher vorhanden waren.

Der Algorithmus zeigt gute numerische Resultate für den stückweisen C^1-Fall, der allen Testbeispielen zugrundeliegt. Das Modell, das die Zielfunktion über dem kompakten Bereich N mit Hilfe der Wegkomponenten beschreibt, ist auch zur Spezifizierung anderer Voraussetzungen geeignet. Dies kann ein Hauptansatzpunkt für weitergehende Untersuchungen auf der Grundlage der vorliegenden Arbeit sein, da auch die Konvergenzbetrachtungen daran herleitbar sind. Ein anderer Schwerpunkt ist bei der Konstruktion der einschließenden Subgradientenbox zu setzen.

Mögliche Erweiterungen entstehen im Bereich der restringierten Optimierung, in dem Probleme der Form (1) mit $x \in M \subset \mathbb{R}^n$ betrachtet werden. Die zulässige Menge M wird dabei selbst durch Funktionen mit gewissen Eigenschaften beschrieben. Einen Ausblick hierauf geben wir in Kapitel 8, das die Arbeit beschließt. Dort beschäftigen wir uns desweiteren ansatzweise mit verwandten Themen und Schlagworten, die beim Studium der Verfahren nichtglatter Optimierung im Rahmen der vorliegenden Arbeit interessant sind und ordnen geeignete Literatur zu. Darunter fallen beispielsweise die erweiterte Intervallarithmetik für unbeschränkte Intervalle, andere Differenzierbarkeitsbegriffe und notwendige Optimalitätsbedingungen für restringierte Probleme.

An dieser Stelle möchte ich mich bei Herrn Prof. Dr. Helmut Ratschek für die Betreuung dieser Arbeit bedanken.

Inhaltsverzeichnis

Kapitel 1

Grundlagen

Wir stellen zunächst Hilfsmittel aus dem Bereich der nichtglatten Analysis und der Optimierungstheorie sowie Grundlagen der Intervallarithmetik zur Verfügung. Unterscheiden sich die Formulierungen in einigen Fällen von denen in den angegebenen Quellen, resultiert dies aus den zum Teil dort fehlerhaften Angaben. Sind die Änderungen leicht einsehbar, werden jedoch keine Beweise angegeben. Größtenteils zitieren wir die Ergebnisse gemäß Clarke [8] sowie Mäkelä und Neittaanmäki [67]. In Ergänzung dazu ist das neue Buch [9] von Clarke et al. zu nennen.

1.1 Nichtglatte Analysis und Optimierungstheorie

Definition 1.1.1 *Eine Funktion* $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ *heißt* lokal Lipschitz stetig *in* x*, wenn es eine Umgebung* $U(x, \delta)$ *und eine Konstante* $L > 0$ *gibt, so daß*

$$|f(y) - f(z)| \leq L\|y - z\| \tag{1.1}$$

für alle $y, z \in U(x, \delta)$ *gilt. Die Funktion* f *heißt lokal Lipschitz stetig in* $E \subseteq \mathbb{R}^n$*, wenn sie diese Eigenschaft für jedes* $x \in E$ *besitzt. Die Funktion* f *heißt* global Lipschitz stetig *(kurz: Lipschitz stetig) in* E*, wenn es eine Konstante* $L > 0$ *gibt, so daß* (1.1) *für alle* $y, z \in E$ *gilt.*

Mit einer Betrachtung von f auf der n-dimensionalen Einheitskugel sieht man direkt

Lemma 1.1.2 *Eine im $\mathbb{R}^n$ lokal Lipschitz stetige Funktion ist Lipschitz stetig auf jeder beschränkten Teilmenge des $\mathbb{R}^n$.*

Satz 1.1.3 (Rademacher) ([67] Th. 3.2.15, [9] Ch. 3) *Sei $U \subseteq \mathbb{R}^n$ offen und $f : U \to \mathbb{R}$ Lipschitz stetig mit Konstante L auf U. Dann ist f differenzierbar fast überall in U (im Sinne des Lebesguemaßes).*

Definition 1.1.4 *Eine mengenwertige Abbildung $H : \mathbb{R}^n \to \wp(\mathbb{R}^n)$ heißt* abgeschlossen *in x, wenn für Folgen $x_k \to x$ und $y_k \to y$ mit $y_k \in H(x_k)$ für alle k gerade $y \in H(x)$ gilt.*

Definition 1.1.5 *Der* Graph *einer mengenwertigen Abbildung $H : \mathbb{R}^n \to \wp(\mathbb{R}^n)$ ist definiert als die Menge $\operatorname{Gr} H := \{(x, y) : x \in \mathbb{R}^n, y \in H(x)\}$.*

Definition 1.1.6 *Eine mengenwertige Abbildung $H : \mathbb{R}^n \to \wp(\mathbb{R}^n)$ heißt* oberhalbstetig *in x, wenn es zu jedem $\mu > 0$ ein $\delta > 0$ gibt, so daß für alle $y \in U(x, \delta)$ gerade $H(y) \subseteq H(x) + U(0, \mu)$ ist.*

Man liest den Definitionen leicht folgende Eigenschaften ab (vgl. [8]).

Korollar 1.1.7 *Betrachte $H : \mathbb{R}^n \to \wp(\mathbb{R}^n)$.*

1. *H ist abgeschlossen auf $E \subseteq \mathbb{R}^n$ genau dann, wenn $\operatorname{Gr} H$ auf $E \times \mathbb{R}^n$ abgeschlossen ist.*
2. *Ist H abgeschlossen in x, dann ist auch die Menge $H(x)$ abgeschlossen.*
3. *Ist H abgeschlossen in x, so auch oberhalbstetig in diesem Punkt.*

Die Umkehr des letzten Punktes gilt nicht.

Definition 1.1.8 *Sei $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ lokal Lipschitz stetig in $x \in \mathbb{R}^n$. Die* verallgemeinerte Richtungsableitung *von f an der Stelle x in Richtung $d \in \mathbb{R}^n$ ist definiert durch*

$$f^\circ(x; d) := \limsup_{\substack{y \to x \\ t \downarrow 0}} \frac{f(y + td) - f(y)}{t}.$$

Lemma 1.1.9 ([8] Prop. 2.1.1, [67] Th. 3.1.2) *Sei $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ lokal Lipschitz stetig in x mit Konstante L.*

1. *Die Funktion $d \mapsto f^\circ(x; d)$ ist positiv homogen und subadditiv auf $\mathbb{R}^n$ mit*
$$|f^\circ(x; d)| \leq L\|d\|.$$
2. *$f^\circ(x; d)$ ist oberhalbstetig als Funktion in $(x; d)$ und Lipschitz stetig mit Lipschitzkonstante L als Funktion in d auf ganz $\mathbb{R}^n$.*
3. *Es ist $f^\circ(x; -d) = (-f)^\circ(x; d)$.*

Folgende Definition geht auf Clarke [8] unter dem Begriff *verallgemeinerter Gradient* zurück.

Definition 1.1.10 *Sei $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ lokal Lipschitz stetig in x. Dann ist das* Subdifferential *von f in x die Menge*

$$\partial f(x) = \{\xi \in \mathbb{R}^n : f^\circ(x; d) \geq \xi^t d \text{ für alle d} \in \mathbb{R}^n\}.$$

Jedes Element $\xi \in \partial f(x)$ heißt Subgradient *von f an der Stelle x.*

Lemma 1.1.11 ([8] Prop. 2.1.1, [67] Th. 3.1.4) *Sei $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ lokal Lipschitz stetig in x mit Konstante L.*

1. *$\partial f(x)$ ist eine nichtleere, kompakte, konvexe Menge in $B(0, L)$.*
2. *$f^\circ(x; d) = \max\{\xi^t d \,|\, \xi \in \partial f(x)\}$ für alle $d \in \mathbb{R}^n$.*
3. *Die Abbildung $\partial f(\cdot) : \mathbb{R}^n \to \wp(\mathbb{R}^n)$ ist abgeschlossen und damit auch oberhalbstetig.*
4. *Ist f differenzierbar in x, so ist $\nabla f(x) \in \partial f(x)$.*
5. *Ist f stetig differenzierbar in $U(x, \delta)$ für ein $\delta > 0$, so gilt $\partial f(x) = \{\nabla f(x)\}$.*

Im Verlaufe dieser Arbeit werden wir die Theorie auf folgende Charakterisierung des Subdifferentials gründen.

Satz 1.1.12 ([8] Th. 2.5.1) *Sei $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ lokal Lipschitz stetig in x, und sei S eine Menge vom Lebesguemaß 0. Mit Ω_f werde die Menge aller Punkte bezeichnet, in denen f nicht differenzierbar ist. Dann gilt*

$$\begin{aligned} \partial f(x) = \quad & \operatorname{conv}\{\xi \in \mathbb{R}^n : \exists (x_i) \subseteq \mathbb{R}^n \setminus (\Omega_f \cup S) \text{ mit} \\ & \lim_{i\to\infty} x_i = x \text{ und } \lim_{i\to\infty} \nabla f(x_i) = \xi\}. \end{aligned}$$

Zum Beweis: Man kann den Beweis aus [8] und [67] zusammensetzen. Ein Teil jedoch, der in [8] als offensichtlich bezeichnet ist, wird in [67] fehlerhaft ausgeführt. Dabei geht es um die Abgeschlossenheit der Menge
$A := \{\xi \in \mathbb{R}^n : \exists (x_i) \subseteq \mathbb{R}^n \setminus (\Omega_f \cup S) : \lim_{i\to\infty} x_i = x, \lim_{i\to\infty} \nabla f(x_i) = \xi\}$.
Wir führen den Nachweis hierzu aus. Betrachte eine Folge $(\xi_j) \subseteq A$ mit $\lim_{j\to\infty} \xi_j = \xi$. Dann gibt es laut Definition von A für alle j Folgen $(x_i^j) \subseteq \mathbb{R}^n \setminus (\Omega_f \cup S)$ mit $\lim_{i\to\infty} x_i^j = x$ und $\lim_{i\to\infty} \nabla f(x_i^j) = \xi_j$. Damit gilt

$$\begin{aligned} \forall \varepsilon > 0 \forall j\, \exists i_0(\varepsilon, j) \forall i \geq i_0(\varepsilon, j) : \quad & \|x_i^j - x\| < \varepsilon \text{ und} \\ & \|\nabla f(x_i^j) - \xi_j\| < \varepsilon/2. \end{aligned}$$

Also existiert zu jedem j ein minimal gewähltes $i_0(j)$ mit

$$\|x_{i_0(j)}^j - x\| < 1/j \text{ und } \|\nabla f(x_{i_0(j)}^j) - \xi_j\| < 1/(2j).$$

Dementsprechend definiert man die Folge (y_j) durch

$$y_j := x_{i_0(j)}^j \in \mathbb{R}^n \setminus (\Omega_f \cup S).$$

Sei nun $\varepsilon > 0$ beliebig. Es existiert ein j_0 so, daß $1/j_0 < \varepsilon$ und

$$\|\xi_j - \xi\| < \varepsilon/2$$

für alle $j \geq j_0$ ist. Es gilt also für alle $j \geq j_0$

$$\|y_j - x\| = \|x_{i_0(j)}^j - x\| < \varepsilon$$

und

$$\|\nabla f(y_j) - \xi\| \leq \|\nabla f(x_{i_0(j)}^j) - \xi_j\| + \|\xi_j - \xi\| < 1/(2j) + \varepsilon/2 < \varepsilon.$$

Zusammengefaßt erhalten wir $(y_j) \in \mathbb{R}^n \setminus (\Omega_f \cup S)$ mit $\lim_{j\to\infty} y_j = x$ und $\lim_{j\to\infty} \nabla f(y_j) = \xi$, das heißt $\xi \in A$. □

Möchte man eine ganze Umgebung zur Berechnung von Subdifferentialen heranziehen, bedient man sich der folgenden Definition, die ihren Ursprung in einem Artikel von Goldstein [24] aus dem Jahr 1977 hat.

Definition 1.1.13 ([24]) *Sei $\varepsilon \geq 0$. Dann ist das* ε-Subdifferential *der lokal Lipschitz stetigen Funktion $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ in x definiert als*

$$\partial_\varepsilon f(x) = \text{conv}\{\partial f(y) : y \in B(x, \varepsilon)\}.$$

Ein Element $\xi \in \partial_\varepsilon f(x)$ wird ε-Subgradient *von f an der Stelle x genannt.*

Bemerkung 1.1.14 *In* [67] *wird das* Goldstein-ε-Subdifferential *über der offenen ε-Umgebung definiert.*

Lemma 1.1.15 ([24]) *Seien $\delta > \varepsilon > 0$ und f lokal Lipschitz stetig in $U(x, \delta)$ mit Konstante L.*

1. $\partial_0 f(x) = \partial f(x)$
2. *Für $\varepsilon_1 \leq \varepsilon_2 \leq \varepsilon$ ist $\partial_{\varepsilon_1} f(x) \subseteq \partial_{\varepsilon_2} f(x)$.*
3. *$\partial_\varepsilon f(x)$ ist eine nichtleere, kompakte, konvexe Menge in $B(0, L)$.*
4. *Die Abbildung $\partial_\varepsilon f(\cdot) : \mathbb{R}^n \to \wp(\mathbb{R}^n)$ ist abgeschlossen und damit auch oberhalbstetig.*

Satz 1.1.16 ([67] Th. 5.1.1) *Ist $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ lokal Lipschitz stetig in x und nimmt dort ein Minimum an, so gilt*

1. *$0 \in \partial f(x) \subseteq \partial_\varepsilon f(x)$ für $\varepsilon > 0$ und*
2. *$f^\circ(x; d) \geq 0$ für alle $d \in \mathbb{R}^n$.*

Definition 1.1.17 *Eine Richtung $d \in \mathbb{R}^n$ heißt* Abstiegsrichtung *für $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ in x, wenn es ein $\delta > 0$ gibt, so daß für alle $t \in (0, \delta]$ gerade $f(x + td) < f(x)$ ist.*

Satz 1.1.18 ([67] Th. 5.2.5) *Sei $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ lokal Lipschitz stetig in x. Die Richtung $d \in \mathbb{R}^n$ ist eine Abstiegsrichtung für f in x, wenn eine der folgenden Bedingungen erfüllt ist:*

1. $f^\circ(x; d) < 0$
2. *$\xi^t d < 0$ für alle $\xi \in \partial f(x)$*

3. *$\xi^t d < 0$ für alle $\xi \in \partial_\varepsilon f(x)$*

Die nächsten drei Resultate aus der konvexen Analysis finden wir bei Hiriart-Urruty und Lemaréchal [36] sowie Rockafellar [94].

Lemma 1.1.19 ([67] Le. 5.2.6, [36] Th. 3.1.1) *Sei $G \subset \mathbb{R}^n$ eine nichtleere, konvexe, kompakte Menge. Dann gilt für $p \in G$*

$$p = \arg\min\{\|g\| : g \in G\} \iff p^t g \geq \|p\|^2 \text{ für alle } g \in G.$$

Lemma 1.1.20 ([36] Prop. 2.4.6) *Sei $G \subset \mathbb{R}^n$ eine nichtleere, konvexe, kompakte Menge und $\mathrm{Ext}(G)$ die Menge ihrer extremen Randpunkte, das heißt der Punkte aus G, die nicht als echte Konvexkombination paarweise verschiedener Elemente aus G darstellbar sind. Für $d \in \mathbb{R}^n$ gilt*

$$\max_{x \in G} d^t x = \max_{x \in \mathrm{Ext}(G)} d^t x.$$

Satz 1.1.21 ([94] Sec. 37) *Seien $C, D \subset \mathbb{R}^n$ nichtleere, kompakte, konvexe Mengen und $\Phi : C \times D \to \mathbb{R}$ eine Funktion mit $\Phi(\cdot, y)$ konvex und $\Phi(x, \cdot)$ konkav für beliebige feste $y \in D$ bzw. $x \in C$.*

1. *$\max_{y \in D} \Phi(\cdot, y)$ ist eine konvexe Funktion in x und $\min_{x \in C} \Phi(x, \cdot)$ eine konkave Funktion in y.*

2. *$\min_{x \in C} \max_{y \in D} \Phi(x, y) = \max_{y \in D} \min_{x \in C} \Phi(x, y)$.*

Satz 1.1.22 (Mittelwertsatz) ([67] Th. 3.2.7) *Sei $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ Lipschitz stetig auf $U \subseteq \mathbb{R}^n$ offen und $x, y \in \mathbb{R}^n$ mit $x \neq y$. Die Strecke $\overline{x, y}$ liege ganz in U. Dann existiert ein Punkt $u \in \mathrm{int}(\overline{x, y})$, so daß gilt*

$$f(y) - f(x) \in \partial f(u)^t (y - x).$$

Lemma 1.1.23 ([67] Le. 3.2.3) *Sei $\Phi : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ quadratisch und interpoliere $t \mapsto f(x_k + t d_k)$ für $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ mit $\Phi(0) = f(x_k), \Phi(t_0) = f(x_k + t_0 d_k)$ und $\Phi'(0) = v_k$. Dann ist*

$$\arg\min\{\Phi(t) : t \in \mathbb{R}\} = \frac{\frac{1}{2} t_0^2 v_k}{t_0 v_k + f(x_k) - f(x_k + t_0 d_k)}.$$

1.2 Techniken der Intervallarithmetik

Es sollen hier nur die grundlegenden Begriffe und Methoden vorgestellt werden, die für unseren Ansatz wichtig sind. Als Literaturquellen seien [30], [77], [78], [84], [85], [86] und [88] genannt.

Betrachtet man $\mathbb{I}(\mathbb{R})$, die Menge der kompakten Intervalle $[a, b]$ über $\mathbb{R}$, so kann man für $A, B \in \mathbb{I}(\mathbb{R})$ die Operationen $+, -, \cdot$ und / mittels

$$A * B = \{a * b : a \in A, b \in B\}$$

definieren, wobei $*$ für die Operationen steht und im Falle der Division $0 \notin B$ gelten möge. Die Tatsache, daß für $\alpha \in A, \beta \in B$ gerade $\alpha * \beta \in A * B$ gilt, wird *Inklusionsisotonie* genannt. Moore bewies in [76], daß $A * B$ wieder in $\mathbb{I}(\mathbb{R})$ liegt. Ebenso zeigte er die Äquivalenz dieser Definition zu folgenden konstruktiven Regeln

$$\begin{array}{lcl} [a,b]+[c,d] & = & [a+c, b+d], \\ [a,b]-[c,d] & = & [a-d, b-c], \\ [a,b]\cdot[c,d] & = & [\min(ac,ad,bc,bd), \max(ac,ad,bc,bd)], \\ [a,b]/[c,d] & = & [a,b]\cdot[1/d, 1/c], \text{ falls } 0 \notin [c,d] \end{array}$$

Basiseigenschaften über $\mathbb{I}(\mathbb{R})$ findet man in [86] oder [88]. Es seien für $A = [a, b] \in \mathbb{I}(\mathbb{R})$ $\mathrm{lb}A := a, \mathrm{ub}A := b$ (*lower bound, upper bound*) sowie

$$\mathrm{mid}\, A := (a + b)/2 \text{ und } w(A) := b - a$$

der *Mittelpunkt* und die *Breite* eines Intervalls. Zur Berechnung dieser Größen und der zuvor besprochenen Operationen findet man eine Sammlung komplexer Formeln in [2] und [81].

Für $A = [a, b], B = [c, d] \in \mathbb{I}(\mathbb{R}^n)$ ist

$$A \le B \iff b \le c \quad \text{und} \quad A < B \iff b < c.$$

Ein n-dimensionales Intervall $A = (A_1, \dots, A_n)^t \in \mathbb{I}(\mathbb{R}^n)$ mit $A_i \in \mathbb{I}(\mathbb{R})$ für $1 \le i \le n$ wird auch (n-dimensionale) Box genannt. Hierfür sind die Breite durch

$$w(A) = \max\{w(A_i) : i = 1, \dots, n\}$$

und der Mittelpunkt durch

$$\mathrm{mid}A = (\mathrm{mid}A_1, \dots, \mathrm{mid}A_n)^t$$

definiert. Die Operationen werden in üblicher Weise erweitert. Der Vergleich $A < B$ wird dann komponentenweise durchgeführt. Sind $A, B \in \mathbb{I}(\mathbb{R}^n)$, so bezeichne $A \vee B$ die kleinste Box aus $\mathbb{I}(\mathbb{R}^n)$, die A und B enthält.

1.2.1 Inklusionsfunktionen und natürliche Intervallerweiterungen

Die Verwendung von Intervallarithmetik im Bereich der mathematischen Optimierung ist stets mit dem Begriff der Inklusionsfunktionen verknüpft.

Definition 1.2.1 *Seien $D \subseteq \mathbb{R}^n$ und $f : D \to \mathbb{R}$. Eine Funktion $F : \mathbb{I}(D) \to \mathbb{I}(\mathbb{R})$ heißt* Inklusionsfunktion *für f, wenn*

$$\diamond f(X) := \{f(x) : x \in X\} \subseteq F(X)$$

für alle $X \in \mathbb{I}(D)$ gilt.

Inklusionfunktionen für vektor- oder matrixwertige Funktionen werden analog eingeführt, wobei die definierende Eigenschaft dann komponentenweise gelten muß.

Sei $f : D \to \mathbb{R}, D \subseteq \mathbb{R}^n$ eine Funktion, die in einer Programmiersprache explizit dargestellt werden kann. Es gibt also einen Ausdruck ohne logische oder bedingte Teilausdrücke, so daß der Funktionswert $f(x)$ darstellbar ist durch einen Term, der nur x, reelle Zahlen, die vier arithmetischen Operationen über $\mathbb{R}$, vordefinierte Standardfunktionen und Hilfssymbole (Klammern, Kommata, etc.) enthält. Dabei sind mit den Standardfunktionen beispielsweise die Sinus- oder die Kosinusfunktion gemeint, für die wiederum bereits Inklusionsfunktionen G in der entsprechenden Programmiersprache existieren. Dann ist die *natürliche Intervallerweiterung* von f als der Ausdruck definiert, den man erhält, wenn jedes Vorkommen von x durch die Box X, jede arithmetische Operation über $\mathbb{R}$ durch die entsprechende Operation über $\mathbb{I}(\mathbb{R})$ und jedes Auftreten einer Standardfunktion g durch deren Erweiterung G ersetzt wird, vgl. [77]. Der so entstandene Ausdruck bzw. der daraus resultierende Wert wird dann mit $f(X)$ bezeichnet.

Aufgrund der Inklusionsisotonie und der Inklusionseigenschaften der $G's$ gilt die sogenannte *fundamentale Eigenschaft der Intervallarithmetik*

$$x \in X \Rightarrow f(x) \in f(X).$$

Liegt eine Funktion vor, die in obiger Weise beschreibbar ist, so ist die Intervallfunktion $F : \mathbb{I}(D) \to \mathbb{I}(\mathbb{R})$, definiert durch $F(X) = f(X)$, eine Inklusionsfunktion für f.

Das Konzept der natürlichen Intervallerweiterung kann nicht mehr auf diese einfache Weise realisiert werden, wenn logische Ausdrücke in der Funktionsdefinition unabdingbar sind.

Beispiel 1.2.2 Sei $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ definiert als

$$f(x) = \begin{cases} x, & \text{falls } x \geq 0 \\ 0, & \text{sonst} \end{cases} .$$

Wendet man das Prinzip der natürlichen Intervallerweiterung an, erhält man

$$f(X) = \begin{cases} X, & \text{falls } X \geq 0 \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}$$

und so die Funktion $F : \mathbb{I}(\mathbb{R}) \to \mathbb{I}(\mathbb{R})$ mit $F(X) = f(X)$. Dies führt jedoch zu falschen Ergebnissen, denn es gilt damit $F([-1, 1]) = 0$, aber $\Diamond f(X) = [0, 1]$. Die Inklusionseigenschaft ist verletzt. Einfache Überlegungen ergeben, daß eine Inklusionsfunktion für f jedoch gegeben ist durch

$$\tilde{F}(X) = \begin{cases} X, & \text{falls } X \geq 0 \\ 0, & \text{falls } X \leq 0 \\ [0, \mathrm{ub}X], & \text{sonst} \end{cases} .$$

Eine andere Beobachtung geht aus den weiteren beiden Beispielen hervor.

Beispiele 1.2.3 1. Sei

$$f(x) = \begin{cases} x \sin x, & \text{falls } x \geq 0 \\ x \cos x, & \text{falls } x \leq 0 \end{cases} .$$

Dann kann die Inklusionsfunktion bestimmt werden als

$$F(X) = \begin{cases} X \sin X, & \text{falls } X \geq 0 \\ X \cos X, & \text{falls } X \leq 0 \\ (X_1 \sin X_1) \vee (X_2 \cos X_2), & \text{falls } 0 \in \text{int } X \end{cases} ,$$

wobei $X = X_1 \cup X_2$ mit $X_1 \geq 0, X_2 \leq 0$.

2. Sei

$$f(x) = \begin{cases} x - y, & \text{falls } x + y \geq 1 \\ (x-y)^2, & \text{sonst} \end{cases} .$$

Dann kann die Inklusionsfunktion bestimmt werden als

$$F(X,Y) = \begin{cases} X - Y, & \text{falls } X + Y \geq 1 \\ (X-Y)^2, & \text{falls } X + Y < 1 \\ (X-Y) \vee (X-Y)^2, & \text{sonst} \end{cases} .$$

Im ersten Beispiel kann man also eine Aufspaltung des Intervalls X bewirken, die die Inklusion unter Umständen verbessert, was jedoch im zweiten Beispiel nicht möglich ist. Wir kommen auf beide Funktionen in Kapitel 5 noch einmal zurück.

In vielen Fällen sind Zusatzüberlegungen notwendig, die jedoch kein größeres Hindernis darstellen. Für detaillierte Darstellungen über die vielfältigen Möglichkeiten, gute Inklusionsfunktionen zu finden, das heißt solche, deren Werte $F(X)$ möglichst gering von $\diamond f(X)$ abweichen, sind die bereits erwähnten Bücher und Artikel heranzuziehen, insbesondere auch [105]. Häufig wird verfügbare Ableitungsinformation geeignet genutzt.

1.2.2 Monotonietest

Ein sehr effizientes Werkzeug bei der Arbeit mit intervallarithmetischen Methoden ist der sogenannte Monotonietest, vergleiche [86] oder [88]. Er trifft eine Aussage darüber, ob eine Funktion f streng monoton in einer Box $X \in \mathbb{I}(\mathbb{R}^n)$ ist und schließt sie gegebenenfalls für die weitere Betrachtung der Optimierung aus. Grundlage ist der folgende Zusammenhang.

Sei $\frac{\partial f(x)}{\partial x^{(i)}}$ die i-te Komponente des Gradienten von f in x bzw. $\partial f^{(i)}(x)$ die i-te Komponente von $\partial f(x)$. Sei $F^{(i)}$ eine Inklusionsfunktion für $\frac{\partial f}{\partial x^{(i)}}$ bzw. $\partial f^{(i)}$, das heißt es gilt für $x \in X$ beliebig

$$\frac{\partial f(x)}{\partial x^{(i)}} \in F^{(i)}(X) \quad \text{bzw.} \quad \partial f^{(i)}(x) \in F^{(i)}(X).$$

Gilt nun $0 \notin F^{(i)}(X)$, so ist f streng monoton in X bezüglich der i-ten Komponente, nämlich streng monoton steigend für $F^{(i)}(X) > 0$ und streng monoton fallend für $F^{(i)}(X) < 0$.

Kapitel 2

Verfahrensansatz mit einer einschließenden Subgradientenbox

Wir führen einen Auszug aus dem gemeinsamen Artikel [22] mit H. Ratschek an. Skizziert wird nur der dortige lokale Ansatz, der die Grundlage dieser Arbeit ist. In [22] und [23] wird als Anschluß an diesen lokalen Algorithmus eine sogenannte globale Phase vorgeschlagen, auf deren Beschreibung wir hier verzichten. Die globalen Optimierungsverfahren auf der Basis von Intervallmethoden, die sich dahinter verbergen, sind in [30], [86] und [88] zu finden; dazu korrespondieren Übertragungen auf den nichtglatten Fall in [46], [84] und [108]. Das Verfahren, das in Kapital 3 entwickelt werden soll, ist unabhängig davon zu betrachten. Während man in [22] lediglich drei erste numerische Ergebnisse findet, liefern wir in Kapitel 6 auch in Bezug auf dieses Ansatzverfahren umfassendere neue Resultate.

2.1 Motivation

Wir möchten eine lokale Lösung des Problems

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) \tag{2.1}$$

für eine lokal Lipschitz stetige Zielfunktion f bestimmen. Ausgangspunkt für die Entwicklung unseres Verfahrens sind die sogenannten ε-Bündelverfahren, deren Hauptansatz in der inneren Approximation des ε-Subdifferentials liegt. Sie wurden ursprünglich für konvexe Funktionen hergeleitet und anschließend auch auf den lokal Lipschitz stetigen Fall erweitert. Als Quellen hierfür sei mit [37], [49], [52], [63], [64], [65], [73], [74], [75] und [113] nur eine kleine Anzahl erwähnt.

Diese Verfahren arbeiten in zwei Schritten, der Richtungs- und der Liniensuche entlang dieser Richtung. Dabei wird die Suchrichtung über einem Polytop bestimmt, welches innere Approximation des ε-Subdifferentials ist. Die Liniensuche beruht meist auf Standardverfahren gemäß [61] mit geeigneten numerischen Varianten. Wir werden in Kapitel 6 näher darauf eingehen. Ein verwandter Verfahrenszweig resultiert aus einem Trust-Region-Ansatz, wie in [97] vorgestellt, auf den wir in Kapitel 4 zurückkommen werden. Den lokalen Verfahren der nichtglatten Optimierung liegt in der Regel die Annahme zugrunde, daß zu jedem $y \in \mathbb{R}^n$ ein Subgradient $g \in \partial f(y)$ bestimmt werden kann. In der Literatur wird diese Annahme meist als *black box* bezeichnet. Solch eine black box wird bei auch ε-Bündelmethoden vorausgesetzt. Hauptprobleme dieser Verfahren sind die Verwaltung des Bündels, welches aus Hilfspunkten und dazu berechneten Subgradienten besteht, und die Tatsache, daß die Vorschrift zur Bestimmung der Suchrichtung aus dem approximierenden Polytop die Abstiegseigenschaft dieser Richtung nicht sichert. Häufig muß zur Verbesserung der Approximation ein sogenannter *Nullschritt* eingefügt werden. Er beinhaltet die Hinzunahme eines weiteren Punktes und dazugehörigen Subgradienten zum Bündel. Über dem so entstandenen Polytop wird dann eine neue Richtung generiert (vergleiche Einleitung).

Unser Ansatz besteht darin, anstatt der Polytopapproximation von innen eine Approximation des ε-Subdifferentials von außen mittels intervallarithmetischer Techniken zu berechnen und diese zur Bestimmung einer geeigneten Suchrichtung auszunutzen. Uns ist kein Verfahren bekannt, daß nach dieser Idee arbeitet. Die Verknüpfung von Intervalltechniken mit dieser Art von lokalen Methoden ist neu. Der Begriff der *äußeren Approximation*, wie er auch in [68] verwendet wird, ist ein anderer.

2.2 Durchführung

Zu einem Punkt $x_k \in \mathbb{R}^n$ sei $X_k^\varepsilon \in \mathbb{I}(\mathbb{R}^n)$ die n-dimensionale achsenparallele Box mit Mittelpunkt x_k und Kantenlänge 2ε. Die Box $F_k' \in \mathbb{I}(\mathbb{R}^n)$ sei nun eine äußere Approximation von

$$\partial f(X_k^\varepsilon) = \bigcup_{u \in X_k^\varepsilon} \partial f(u). \tag{2.2}$$

Da sie als Box konvex ist, enthält sie $\partial_\varepsilon f(x_k)$ automatisch. Mögliche Techniken zur Konstruktion dieser Box F'_k werden in Kapitel 5 betrachtet.

Das Verfahren kann damit formuliert werden.

Algorithmus 2.2.1 *Gegeben seien der Startvektor $x_0 \in \mathbb{R}^n$ und der Parameter $\varepsilon > 0$. Für $k = 0, 1, 2, \dots$ führe folgende Schritte durch:*

1. *Bestimme X_k^ε und F'_k gemäß obiger Beschreibung.*
2. *Liegt $0 \in F'_k$, beende das Verfahren.*
3. *Berechne $g_k = \arg\min\{\|p\| : p \in F'_k\}$, und setze $d_k := -g_k/\|g_k\|$.*
4. *Bestimme t_k als Lösung von $\min f(x_k + t\, d_k)$ für $t > 0$.*
5. *Setze $x_{k+1} := x_k + t_k\, d_k$.*
6. *Gehe zu 1.*

Bemerkung 2.2.2 1. *Abweichend von der zitierten Arbeit [22] wurde das Abbruchkriterium in Übereinstimmung mit den theoretischen Überlegungen gewählt und nicht als*

$$\min_{g \in F'_k} \|g\| \leq \delta$$

für eine geeignete Konstante $\delta > 0$. Diese Festlegung, die in der Praxis Gültigkeit besitzt, führt in jedem Fall zu einem Abbruch nach endlich vielen Schritten entsprechend der Konvergenzaussage im folgenden Abschnitt.

2. *ε-Bündel-Verfahren arbeiten mit analogen Abbruchkriterien, wenn sie*

$$\min_{g \in P_k} \|g\| \leq \delta$$

fordern, wobei P_k das approximierende Polytop ist.

3. *ε-Bündel-Verfahren erfordern in der Regel die Lösung eines quadratischen Optimierungsproblems zur Bestimmung der Suchrichtung. Da hier eine achsenparallele Box F_k' betrachtet wird, besteht Schritt 3 nur aus einem Ablesen der Lösung. Die Abbruchbedingung kann mittels einer einfachen Abfrage überprüft werden.*

4. *Die zugrundegelegte exakte Liniensuche ist nur in der Theorie anzusetzen. Sie ist nicht das praktische Hilfsmittel für nichtglatte Probleme. An ihre Stelle treten in der Implementierung unexakte Verfahren, wie sie in Kapitel 6 vorgestellt werden.*

5. *Die globale Anschlußphase, die in* [22] *vorgeschlagen wird, setzt nach Abbruch des Algorithmus 2.2.1 ein. Neben der angesprochenen Realisierung durch Intervallmethoden können hierfür beliebige globale Verfahren benutzt werden, wie sie in* [3], [6], [16], [31], [32], [33], [39], [40], [42], [44], [45], [83], [90], [91] *und* [106] *zu finden sind.*

Um in den folgenden Kapiteln darauf zurückgreifen zu können, gelte die Bezeichnung

$$\textbf{(UP0)} \ \min_{g \in F_k'} \|g\|.$$

2.3 Konvergenz

Wir beweisen nun die Konvergenz des Algorithmus 2.2.1 unter der Standardannahme, daß $N_0 := \{x \in \mathbb{R}^n : f(x) \leq f(x_0)\}$ beschränkt sei für einen beliebigen Vektor $x_0 \in \mathbb{R}^n$.

Zunächst beschreiben wir die Situation nach der Richtungssuche in Schritt 3 des Verfahrens.

Lemma 2.3.1 *Gilt $0 \notin F_k'$, so folgt*

1. *d_k ist eine Abstiegsrichtung von f in jedem Punkt $u \in X_k^\varepsilon$ und*

2. *$x_{k+1} \notin X_k^\varepsilon$.*

BEWEIS: Wir wenden Lemma 1.1.19 auf $g_k = \arg\min\{\|p\| : p \in F'_k\}$ aus Schritt 3 des Algorithmus an und erhalten

$$p^t g_k \geq \|g_k\|^2 \text{ für alle } p \in F'_k.$$

Mit $d_k = -g_k/\|g_k\|$, $g_k \neq 0$ und $\partial f(X_k^\varepsilon) \subseteq F'_k$ folgt

$$p^t d_k \leq -\|g_k\| < 0 \text{ für alle } p \in \partial f(X_k^\varepsilon).$$

Betrachte $u \in X_k^\varepsilon$ beliebig. Dann ist

$$p^t d_k \leq -\|g_k\| < 0 \text{ für alle } p \in \partial f(u), \tag{2.3}$$

also Behauptung 1 gezeigt.

Behauptung 2 ist damit offensichtlich: Läge $x_{k+1} = x_k + t_k d_k \in X_k^\varepsilon$, dann wäre d_k nach Teil 1 Abstiegsrichtung für f in x_{k+1} und t_k keine Lösung der exakten Liniensuche. □

Satz 2.3.2 *Sei $(x_k) \subseteq N_0$ eine durch Algorithmus 2.2.1 generierte unendliche Folge und (g_k) die entsprechende Folge der Elemente minimaler Norm aus F'_k, wie in Schritt 3 bestimmt. Dann gilt* $\lim_{k\to\infty} g_k = 0$.

BEWEIS: Nach der Standardvoraussetzung existieren ein Häufungspunkt x^* von (x_k) und eine Teilfolge (x_{k_n}) mit

$$\lim_{n\to\infty} x_{k_n} = x^*.$$

Mit Lemma 2.3.1 ist die Schrittweite für alle k größer als ε. Mit Satz 1.1.22 gilt in jedem Schritt

$$f(x_k + \varepsilon d_k) - f(x_k) = \varepsilon h^t d_k,$$

wobei $h \in \partial f(u)$ mit $u \in \overline{x_k, x_k + \varepsilon d_k}$ ist. Wegen $\|d_k\| = 1$ ist $u \in X_k^\varepsilon$ und somit $\partial f(u) \subseteq F'_k$. Mit (2.3) erhalten wir insgesamt die Abschätzung

$$f(x_k + t_k d_k) - f(x_k) \leq f(x_k + \varepsilon d_k) - f(x_k) \leq -\varepsilon \|g_k\| \tag{2.4}$$

für den Abstieg in jedem Iterationsschritt. Die hieraus ersichtliche monotone Abnahme von $(f(x_k))$ kombiniert mit $x_{k_n} \to x^*$ und der Stetigkeit von f liefert

$$\lim_{k\to\infty} f(x_k) = f(x^*)$$

für die gesamte Funktionswertfolge.

Betrachten wir die Folge (g_k) unter der Widerspruchsannahme, daß sie nicht gegen 0 konvergiert, so gilt

$$\exists \mu > 0 \, \forall k_0 \, \exists k \geq k_0 : \|g_k\| \geq \mu.$$

Mit der dazugehörigen Teilfolge (g_{k_l}) mit $\|g_{k_l}\| \geq \mu$ für alle l fassen wir zusammen

$$\begin{aligned} f(x^*) - f(x_0) &= \sum_{k=0}^{\infty} (f(x_{k+1}) - f(x_k)) \\ &\leq \sum_{l=0}^{\infty} (f(x_{k_l+1}) - f(x_{k_l})) \\ &\overset{(2.4)}{\leq} -\varepsilon \sum_{l=0}^{\infty} \|g_{k_l}\| \\ &\leq -\varepsilon \sum_{l=0}^{\infty} \mu \end{aligned}$$

und erhalten den Widerspruch, da die rechte Seite den Wert $-\infty$ hat. □

2.4 Vor- und Nachteile

Wir fassen noch einmal die Vorteile zusammen.

1. Die Richtung d_k wird durch simples Ablesen bestimmt. Möchte man in einer n-dimensionalen Box

$$A = \begin{pmatrix} [a_1, b_1] \\ \vdots \\ [a_n, b_n] \end{pmatrix}$$

das Element p minimaler euklidischer Norm bestimmen, so ist lediglich für jede Komponente $[a_i, b_i], i = 1, \ldots, n$

$$p_i := \min_{c \in [a_i, b_i]} |c|$$

abzulesen. Dies geschieht in der Praxis mittels einer einfachen Abfrage.

2. Durch die Berechnung der Box F_k' ist die gesamte benötigte Subgradienteninformation verfügbar. Es fällt keine Verwaltung des Bündels an.

3. Die generierte Richtung ist automatisch eine Abstiegsrichtung; Nullschritte kommen nicht vor.

Diesen Vorteilen steht jedoch ein entscheidender Nachteil gegenüber. In Abhängigkeit von der Beschaffenheit der betrachteten Zielfunktion und der entsprechenden Konstruktion der Box F_k' ist es möglich, daß ein Abbruch des Verfahrens an falscher Stelle aus einem unvermeidbaren *Einfangen* der 0 in F_k' resultiert. Diese Problematik möchten wir an einem einfachen Beispiel demonstrieren. Es ist die 2-dimensionale Form eines Standardbeispiels für Bündel- und verwandte Verfahren, das wir später für die Dimension 20 auch in der Implementierung testen werden. Man findet es in [67] und [97].

Beispiel 2.4.1
Maxl (Dimension 2):

$$f(x) = \max\{|x^{(1)}|, |x^{(2)}|\} \tag{2.5}$$

Betrachtet man das Subdifferential an der Stelle $x_k = (1,1)^t$, so liest man direkt ab $\partial f(x_k) = \operatorname{conv}\{(1,0)^t, (0,1)^t\}$. Wird nun F_k' in X_k^ε für ein $\varepsilon > 0$ gebildet, so soll laut der gestellten Forderungen $\partial f(x_k)$ darin enthalten sein. Die kleinste Box in $\mathbb{R}^2$, die dieser Bedingung genügt, ist

$$A = \begin{pmatrix} [1,0] \\ [0,1] \end{pmatrix}.$$

Also ist $0 \in A \subseteq F_k'$, obwohl man sich nicht einmal in der Nähe einer lokalen Minimalstelle befindet.

Je komplexer die Zielfunktion wird, desto häufiger kann so ein Fall eintreten. Genau diese Beobachtung motivierte die folgenden Untersuchungen und die Entwicklung eines neuen lokalen Algorithmus mit dem Ziel, das Verfahren an dieser Stelle nicht abzubrechen, sondern in geeigneter Weise fortsetzen zu können.

Wir leiten eine Methode her, die sowohl diese Konstellation als Ausgangspunkt haben kann und dann als Anschlußverfahren zu sehen ist als auch eigenständig von Beginn an arbeitet.

Kapitel 3

Herleitung des lokalen Algorithmus

Wir entwickeln einen neuen Ansatz zur Lösung von Problem (2.1),

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

für f lokal Lipschitz stetig. Die Box F_k', die dem bisherigen Algorithmus aus dem vorigen Kapitel zugrundelag, wird weiterhin genutzt. Die Methode wird ebenfalls aus Richtungs- und Liniensuche bestehen. Dies bedeutet, daß die Arbeit im wesentlichen aus der Herleitung eines neuen Unterproblems besteht, welches an die Stelle von (UP0), $\min_{g \in F_k'} \|g\|$, tritt.

3.1 Entwicklung einer neuen Richtungssuche

3.1.1 Motivation

Die Idee für die folgende Vorgehensweise gründet sich auf eine Beobachtung, die anhand von Standardtestbeispielen in der Literatur gemacht wurde.

Funktionen im Bereich der nichtglatten Optimierung können häufig so formuliert werden, daß sie mittels Hilfsfunktionen darstellbar sind. Diese gelten in verschiedenen Teilmengen des Definitionsbereiches. Die Funktionen sind also anschaulich gesprochen durch Fallunterscheidungen charakterisierbar.

Die folgende Funktion, die auf dem $\mathbb{R}^2$ definiert ist, stammt aus [113] und ist eine Modifikation eines sehr bekannten Beispiels von Wolfe aus [107], welches dazu diente zu zeigen, daß eine simple Übertragung des Verfahrens des steilsten Abstiegs, das für C^1-Funktionen global konvergent ist, auf nichtglatte Funktionen der hier vorliegenden Form nicht möglich ist.

Beispiel 3.1.1
Wolfe:

$$f(x) = \begin{cases} 5(9{x^{(1)}}^2 + 16{x^{(2)}}^2)^{1/2}, & \text{falls } x^{(1)} \geq |x^{(2)}| \\ 9x^{(1)} + 16|x^{(2)}|, & \text{falls } 0 < x^{(1)} < |x^{(2)}| \\ 9x^{(1)} + 16|x^{(2)}| - {x^{(1)}}^9, & \text{falls } x^{(1)} \leq 0 \end{cases} .$$

Während diese Funktion bereits durch Fallunterscheidungen dargestellt ist, kann man Maxl, wie in (2.5) definiert, durch einfaches formales Umschreiben auf solch eine Gestalt bringen, denn es ist offenbar gleichwertig zu folgendem Ausdruck

$$f(x) = \begin{cases} |x^{(1)}|, & \text{falls } |x^{(1)}| \geq |x^{(2)}| \\ |x^{(2)}|, & \text{falls } |x^{(2)}| \geq |x^{(1)}| \end{cases} .$$

Eine derartige *Behandlung* der Zielfunktion ist vielfach möglich. Wir werden nun im ersten Schritt eine Abstraktion dieser Beobachtung vornehmen, um damit unseren Ansatz aufzubauen.

3.1.2 Betrachtung des Arbeitsbereiches

Sei wie in Kapitel 2 $N_0 := \{x \in \mathbb{R}^n : f(x) \leq f(x_0)\}$ beschränkt für jeden beliebigen Vektor $x_0 \in \mathbb{R}^n$. Es seien mit $\varepsilon > 0$ in Anlehnung an das vorige Kapitel $N := N_0 + B(0, 3\varepsilon)$ kompakt und $M_0 \supset N$ offen und beschränkt. Mit Lemma 1.1.2 und Satz 1.1.3 von Rademacher ist f fast überall differenzierbar auf M_0. Seien

$$\tilde{\Omega}_f := \{x \in M_0 : f \text{ in } x \text{ nicht differenzierbar}\}$$

und

$$\Omega_f := \tilde{\Omega}_f \cap N$$

die dazugehörigen Nullmengen.

Bemerkung 3.1.2 *In der vorliegenden Situation gelten folgende Eigenschaften:*

1. $\forall x \in \Omega_f \forall \delta > 0 \, \exists y \in U_\delta(x) \cap N : y \notin \Omega_f$
2. $\forall x \in N \, \exists (x_n) \to x$ *mit* $(x_n) \subseteq N \setminus \Omega_f$

Um in den nächsten Abschnitten ein neues Unterproblem zur Bestimmung der Suchrichtung einführen zu können, betrachten wir die folgende Charakterisierung des kompakten Arbeitsbereiches N.

Definition 3.1.3 $A \subseteq E \subseteq \mathbb{R}^n$ *heißt* C^1-zusammenhängend *in* E *oder* C^1-Komponente *von* E *genau dann, wenn es zu je zwei beliebigen Punkten* $x, y \in A$ *einen* C^1*-Weg* $\gamma : [a, b] \mapsto E$ *mit* $\gamma(a) = x$ *und* $\gamma(b) = y$ *gibt.*

Definiere die Relationen

$$\mathrm{R} \subseteq N \setminus \Omega_f \times N \setminus \Omega_f \text{ und } \tilde{\mathrm{R}} \subseteq \Omega_f \times \Omega_f$$

durch

$$x \, \mathrm{R} \, y :\Longleftrightarrow \; \exists \, C^1\text{-Weg } \gamma : [a, b] \mapsto N \setminus \Omega_f \text{ mit } \gamma(a) = x, \, \gamma(b) = y \tag{3.1}$$

sowie

$$x \, \tilde{\mathrm{R}} \, y :\Longleftrightarrow \; \exists \, C^1\text{-Weg } \gamma : [a, b] \mapsto \Omega_f \text{ mit } \gamma(a) = x, \, \gamma(b) = y. \tag{3.2}$$

Es stehen also je zwei Elemente aus $N \setminus \Omega_f$ bzw. Ω_f in Relation zueinander, wenn sie durch einen ganz in der jeweiligen Menge liegenden C^1-Weg verbunden werden können. Die C^1-Komponenten von $N \setminus \Omega_f$ seien mit $\tilde{A}_i, i \in I$, und die von Ω_f mit $\tilde{B}_j, j \in J$, für Indexmengen I und J bezeichnet. Identifiziert man nun noch jeden einzelnen Punkt, der keiner Relation genügt, mit einer sogenannten *entarteten* C^1-Komponente, so wird insgesamt eine Unterteilung von $N \setminus \Omega_f$ bzw. Ω_f und somit von ganz N in (entartete) C^1-Komponenten induziert. Es gilt also

$$N \setminus \Omega_f = \bigcup_{i \in I} \tilde{A}_i \text{ und } \Omega_f = \bigcup_{j \in J} \tilde{B}_j. \tag{3.3}$$

Im weiteren Verlauf verzichten wir auf die gesonderte Bezeichnung der entarteten C^1-Komponenten und erfassen sie als C^1-Komponenten mit.

Bemerkung 3.1.4

$$\Omega_f = \mathrm{cl}\left(\bigcup_{i\in I}\tilde{A}_i\right) \setminus \bigcup_{i\in I}\tilde{A}_i,$$

denn aus der Darstellung (3.3) für $N \setminus \Omega_f$ ergibt sich

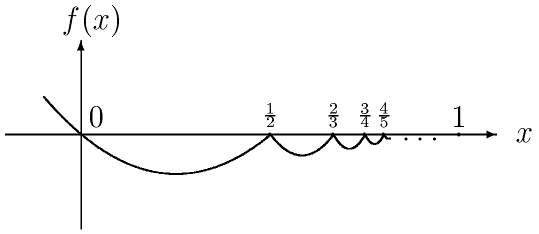
$$N = \mathrm{cl}\left(\bigcup_{i\in I}\tilde{A}_i\right),$$

da für jedes $x \in \Omega_f$ mit Bemerkung 3.1.2 Folgen aus $N \setminus \Omega_f$ mit Grenzwert x existieren.

Beispiel 3.1.5 Betrachte $f : \mathbb{R} \mapsto \mathbb{R}$ mit $N = [0,1]$ und folgender Eigenschaft: f sei für alle $n \in \mathbb{N}^{>1}$ in $x = 1 - 1/n$ und $x = 1$ nicht differenzierbar. Es gelte beispielsweise

$$f(x) = -|(1-1/n)x - (1-1/n)^2| \text{ für } x \in [1 - \tfrac{1}{n} - \tfrac{1}{n^4}, 1 - \tfrac{1}{n} + \tfrac{1}{n^4}].$$

f sei an den übrigen Stellen stetig differenzierbar, habe also etwa folgendes Aussehen:



Man erkennt, daß $\tilde{A}_1 = [0, 1/2)$ und $\tilde{A}_i = (\frac{i-1}{i}, \frac{i}{i+1})$ für $i > 1$ sind. Es existiert kein $\tilde{A}_i$ der Form $(a, 1)$, da in jeder beliebig kleinen Umgebung von 1 wieder ein Element aus Ω_f liegt. Damit ist

$$\bigcup_{i\in I}\mathrm{cl}(\tilde{A}_i) = \bigcup_{i\in\mathbb{N}^{\neq 0}} [\tfrac{i-1}{i}, \tfrac{i}{i+1}] = [0,1) \neq N.$$

Dieses Beispiel demonstriert zwar nur den einfachen topologischen Sachverhalt, daß man mit den Abschlüssen der einzelnen $\tilde{A}_i$ nicht auskommt, doch hilft es auch, die Idee des Ansatzes zu verdeutlichen. Wir werden später noch einmal darauf zurückkommen.

Um geeignete Voraussetzungen für eine angemessene theoretische Betrachtung der folgenden Konstruktionen zu schaffen, werden die $\tilde{A}_i$, $i \in I$, und $\tilde{B}_j$, $j \in J$, nun abgeschlossen. Dies macht auch im Hinblick auf einen spätere Realisierung Sinn. Seien also für $i \in I$ und $j \in J$

$$A_i := \mathrm{cl}(\tilde{A}_i) \text{ und } B_j := \mathrm{cl}(\tilde{B}_j)$$

sowie

$$\mathcal{A} := \{A_i : i \in I\} \text{ und } \mathcal{B} := \{B_j : j \in J\}.$$

Denkt man an das Cantorsche Diskontinuum als überabzählbare Menge mit Maß 0, so sind überabzählbare Indexmengen apriori nicht auszuschließen. Mit Bezug auf den Begriff der programmierbaren Funktion, dessen Definition in Kapitel 5 erfolgt, nehmen wir jedoch an, daß I und J abzählbar seien.

Betrachten wir noch einmal die Funktion von Wolfe aus Beispiel 3.1.1 und Maxl (2.5), um daran die soeben eingeführte Unterteilung in C^1-Komponenten und deren Abschlüsse zu verdeutlichen.

Für das Beispiel von Wolfe entstehen trotz der Fallunterscheidungen bei beispielsweise $N = [10, 10]^2 \subset \mathbb{R}^2$ nur eine Komponente in $N \setminus \Omega_f$ und eine in Ω_f, denn die Funktion ist nur für

$$x \in \{(x^{(1)}, x^{(2)}) : x^{(1)} \leq 0, x^{(2)} = 0\} =: B_1$$

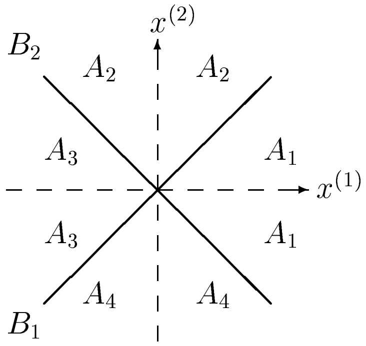
nicht differenzierbar, also $\tilde{A}_1 := N \setminus B_1$ und $A_1 = N$.

Im Fall von Maxl ist eine weitere Aufspaltung der Fallunterscheidungen sinnvoll, um die Komponenten ablesen zu können.

Beispiel 3.1.6
Maxl (Dimension 2):

$$f(x) = \begin{cases} x^{(1)}, & \text{falls } x^{(1)} \geq |x^{(2)}| \\ x^{(2)}, & \text{falls } x^{(2)} \geq |x^{(1)}| \\ -x^{(1)}, & \text{falls } -x^{(1)} \geq |x^{(2)}| \\ -x^{(2)}, & \text{falls } -x^{(2)} \geq |x^{(1)}| \end{cases}$$

Betrachtet man wieder $N = [10, 10]^2$, ergeben sich hieraus vier Komponenten in $N \setminus \Omega_f$ und zwei in Ω_f. Die Unterteilungen sehen folgendermaßen aus, wenn die Numerierung der Abschlüsse der Komponenten fortlaufend gemäß der Fälle in obiger Formulierung erfolgt.



Es wäre auch denkbar gewesen, die Relationen (3.1) und (3.2) zur Festlegung der Komponenten mittels stückweiser C^1-Wege festzulegen, doch eine solche Definition käme der Motivation nicht so nahe, wie man anhand der Skizze zu Maxl erkennt. In dem Fall wäre dort nämlich nur eine Komponente in Ω_f entstanden, was die spätere Auswahl der Subgradienten eingeschränkt hätte, wie wir noch sehen werden.

3.1.3 Konstruktionselemente zur Auswahl der Subgradienten und ihre Eigenschaften

Es wird mit Hilfe der hergeleiteten Unterteilung von N eine geeignete Subgradientenauswahl entwickelt, die den neuen Ansatz charakterisiert.

Sei zu $x \in \mathbb{R}^n$

$$X^\varepsilon := \{y : \|y - x\|_\infty \leq \varepsilon\}$$

die Box um Mittelpunkt x mit Breite $w(X^\varepsilon) = 2\varepsilon$, wie bereits in Kapitel 2 kennengelernt. Definiere desweiteren folgende Indexmengen in Abhängigkeit von $x \in N$ und $\varepsilon > 0$:

$$\mathcal{I}_\mathcal{A}(x, \varepsilon) := \{i \in I : A_i \cap X^\varepsilon \neq \emptyset\}, \tag{3.4}$$

$$\mathcal{I}_\mathcal{B}(x, \varepsilon) := \{j \in J : B_j \cap X^\varepsilon \neq \emptyset\}, \tag{3.5}$$

$$\mathcal{I}(x,\varepsilon) := \mathcal{I}_{\mathcal{A}}(x,\varepsilon) \cup \mathcal{I}_{\mathcal{B}}(x,\varepsilon). \tag{3.6}$$

Offensichtlich gilt hierfür $\mathcal{I}(x,0) \subseteq \mathcal{I}(x,\varepsilon)$ für alle $\varepsilon > 0$.

Wird ein $l \in \mathcal{I}(x,\varepsilon)$ betrachtet, gehen wir von einer eindeutigen Zuordnung dieses Indizes zu $\mathcal{I}_{\mathcal{A}}(x,\varepsilon)$ oder $\mathcal{I}_{\mathcal{B}}(x,\varepsilon)$ aus.

Bemerkung 3.1.7 *1. Für eine Folge (x_k) mit $f(x_{k+1}) \leq f(x_k)$ für alle k gilt $(X_k^\varepsilon) \subseteq N$ aufgrund der Definition von N.*

2. Im folgenden werden Abgeschlossenheitseigenschaften diverser mengenwertiger Abbildungen in N untersucht. Wir treffen hierfür eine **Vereinbarung**: *Die Abgeschlossenheit einer Abbildung $h : N \to \wp(N)$ verstehen wir in dem Sinne, daß zum Nachweis lediglich Folgen in N betrachtet werden. Der Grund hierfür liegt in der Definition sämtlicher Begriffe auf N. Dies bedeutet mit Punkt 1 keine wirkliche Einschränkung der Ergebnisse, da wir ein Abstiegsverfahren entwickeln.*

Lemma 3.1.8 *Die mengenwertigen Abbildungen*

1. $x \mapsto \mathcal{I}_{\mathcal{A}}(x,\varepsilon)$ und $\varepsilon \mapsto \mathcal{I}_{\mathcal{A}}(x,\varepsilon)$ sowie

2. $x \mapsto \mathcal{I}_{\mathcal{B}}(x,\varepsilon)$ und $\varepsilon \mapsto \mathcal{I}_{\mathcal{B}}(x,\varepsilon)$

sind abgeschlossen in N bzw. $\mathbb{R}^{>0}$.

BEWEIS: Seien zunächst Folgen (x_k) und (l_k) mit $\lim_{k\to\infty} x_k = x \in N$, $\lim_{k\to\infty} l_k = l$ und $l_k \in \mathcal{I}_{\mathcal{A}}(x_k,\varepsilon)$ für alle k gegeben. Aufgrund der Abzählbarkeit der Menge I existiert ein k_0, so daß für alle $k \geq k_0$ gerade $l_k = l$ ist. Nun gilt nach Definition von $\mathcal{I}_{\mathcal{A}}(x,\varepsilon)$

$$\forall k \geq k_0 \, \exists y_k \in X_k^\varepsilon \cap A_{l_k}.$$

Für diese Punkte y_k ist

$$\|y_k - x_k\|_\infty \leq \varepsilon.$$

Da $(y_k)_{k\geq k_0} \subseteq N$ kompakt ist, existiert eine konvergente Teilfolge (y_{k_ν}) mit $y_{k_\nu} \in X_{k_\nu}^\varepsilon \cap A_l$ sowie $y \in N$ derart, daß

$$\lim_{\nu\to\infty} y_{k_\nu} = y$$

ist. Aufgrund der Stetigkeit der Norm gilt $y \in X^\varepsilon$ und mit der Abgeschlossenheit von A_l gerade

$$y \in A_l \cap X^\varepsilon,$$

also $l \in \mathcal{I}_\mathcal{A}(x, \varepsilon)$.

Der Beweis der zweiten Aussage unter Punkt 1 verläuft analog. Dabei wird x fixiert und nur die Breite der Box um x variiert. Für eine konvergente Folge (y_k) mit $y_k \in X^{\varepsilon_k}$ für alle k und Grenzwert y gilt $y \in X^\varepsilon$.

Die zweite Teilbehauptung ergibt sich auf die gleiche Weise. □

Korollar 3.1.9 *Die mengenwertigen Abbildungen* $x \mapsto \mathcal{I}(x, \varepsilon)$ *und* $\varepsilon \mapsto \mathcal{I}(x, \varepsilon)$ *sind abgeschlossen in* N *bzw.* $\mathbb{R}^{>0}$.

Lemma 3.1.10 *Sei* (x_k) *eine Folge in* N *mit* $\lim_{k\to\infty} x_k = x$. *Dann gilt*

$$\exists k_0 \, \forall k \geq k_0 : \mathcal{I}(x_k, 0) \cup \mathcal{I}(x, 0) \subseteq \mathcal{I}(x_k, \varepsilon) \cap \mathcal{I}(x, \varepsilon).$$

BEWEIS: Laut Voraussetzung existiert ein Index k_0, so daß gilt:

$$\forall k \geq k_0 : \mathcal{I}(x_k, 0) \subseteq \mathcal{I}(x, \varepsilon) \text{ und } \mathcal{I}(x, 0) \subseteq \mathcal{I}(x_k, \varepsilon).$$

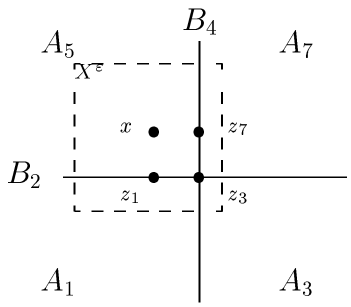
Da $\mathcal{I}(x, 0) \subseteq \mathcal{I}(x, \varepsilon)$ ohnehin für alle $x \in N$ gilt, folgt die Behauptung. □

Definiere nun zu $l \in \mathcal{I}(x, \varepsilon)$ eine mengenwertige Abbildung $g_l : N \to \wp(N)$ durch

$$g_l(x) := \{z \in X^\varepsilon \cap C_l : \|x - z\| \leq \|x - y\| \, \forall y \in C_l \cap B(x, \sqrt{n}\varepsilon)\}. \quad (3.7)$$

Hierbei sei $C_l = A_l$ für $l \in \mathcal{I}_\mathcal{A}(x, \varepsilon)$ bzw. $C_l = B_l$ für $l \in \mathcal{I}_\mathcal{B}(x, \varepsilon)$.

$g_l(x)$ enthält also die zu x am nächsten gelegenen Punkte der Abschlüsse aller Komponenten, die einen nichtleeren Schnitt mit X^ε haben. An einer einfachen Konstellation demonstriert sieht das so aus:



In dieser Situation werden $g_1(x) = g_2(x) = \{z_1\}$, $g_3(x) = \{z_3\}$, $g_4(x) = g_7(x) = \{z_7\}$ und $g_5(x) = \{x\}$ gesetzt. Durch die Abschlußbildung der C^1-Komponenten sind die Punkte z_1 und z_7 je zweimal die nächstliegenden Elemente.

g_l ist wohldefiniert, da $X^\varepsilon \cap C_l$ kompakt und $\|\cdot\|$ stetig ist. Es ist durchaus möglich, daß $g_l(x) = \emptyset$ ist. Man beachte, daß in der Schnittbildung mit C_l auch der Schnitt mit N enthalten ist.

Lemma 3.1.11 *Sei $l \in \mathcal{I}(x, \varepsilon)$ beliebig.*

1. *$l \in \mathcal{I}(x, 0) \iff g_l(x) = \{x\}$.*
2. *g_l als mengenwertige Abbildung betrachtet ist abgeschlossen in N.*

BEWEIS: Die erste Behauptung ist offensichtlich. Zum Beweis der zweiten seien Folgen (x_k) und (z_k) aus N mit $\lim_{k\to\infty} x_k = x, \lim_{k\to\infty} z_k = z$ und $z_k \in g_l(x_k)$ für alle k gegeben. Zu zeigen ist $z \in g_l(x)$. Da $z_k \in X_k^\varepsilon$ für alle k ist, folgt wie im Beweis zu Lemma 3.1.9 und aus der Kompaktheit von C_l

$$z \in X^\varepsilon \cap C_l.$$

Zum anderen bedeutet $z_k \in g_l(x_k)$

$$\forall k\, \forall y \in B(x_k, \sqrt{n}\varepsilon) \cap C_l : \|x_k - z_k\| \leq \|x_k - y\|.$$

Zum Beweis der Minimalitätseigenschaft von z nehmen wir die Existenz eines $\bar{z} \in X^\varepsilon \cap C_l$ mit $\|x - \bar{z}\| < \|x - z\| \leq \sqrt{n}\varepsilon$ an. Das bedeutet $\bar{z} \in U(x, \sqrt{n}\varepsilon)$. Es gibt ein $0 < \delta < \sqrt{n}\varepsilon$ mit

$$\|x - \bar{z}\| = \sqrt{n}\varepsilon - \delta.$$

Zu diesem δ existiert andererseits ein k_0, so daß

$$\forall k \geq k_0 : \|x_k - x\| < \delta$$

gilt. Damit setzt man zusammen

$$\forall k \geq k_0 : \|x_k - \bar{z}\| \leq \|x_k - x\| + \|x - \bar{z}\| < \delta + \sqrt{n}\varepsilon - \delta = \sqrt{n}\varepsilon,$$

also ist für alle $k \geq k_0$ $\bar{z} \in U(x_k, \sqrt{n}\varepsilon)$. Da $\bar{z} \in C_l$ ist, folgt

$$\forall k \geq k_0 : \|x_k - z_k\| \leq \|x_k - \bar{z}\|,$$

und die Stetigkeit der Norm liefert bei Grenzübergang den Widerspruch $\|x - z\| \leq \|x - \bar{z}\|$. □

Seien nun zu $x \in N$

$$G(x) := \{\xi \in \mathbb{R}^n : \exists (x_m^l) \subseteq M_0 \setminus \tilde{\Omega}_f \text{ mit } \lim_{m\to\infty} x_m^l = \eta_l \in g_l(x), \lim_{m\to\infty} \nabla f(x_m^l) = \xi, l \in \mathcal{I}(x,\varepsilon)\} \tag{3.8}$$

und

$$G_{ko}(x) := \operatorname{conv}(G(x)). \tag{3.9}$$

Hierbei waren $M_0 = \operatorname{int}(N_0 + B(0, 4\varepsilon))$ und
$\tilde{\Omega}_f := \{x \in M_0 : f \text{ in } x \text{ nicht differenzierbar}\}$. Mit Satz 1.1.12 sehen wir direkt

Lemma 3.1.12 *Es gilt für alle $x \in N$:*

1. $\forall l \in \mathcal{I}(x,\varepsilon)\, \forall \eta_l \in g_l(x) : \partial f(\eta_l) \subseteq G_{ko}(x)$.
2. $G(x) \subseteq \bigcup_{\substack{\eta_l \in g_l(x) \\ l \in \mathcal{I}(x,\varepsilon)}} \partial f(\eta_l)$.

Da für alle $l \in \mathcal{I}(x, 0)$ gerade $g_l(x) = \{x\}$ ist, heißt Teil 1 insbesondere

Korollar 3.1.13 $\partial f(x) \subseteq G_{ko}(x)$.

Korollar 3.1.14 $G(N) := \bigcup_{x\in N} G(x)$ *ist beschränkt.*

BEWEIS: Auf der kompakten Menge N existiert eine globale Lipschitzkonstante L für f. Da nun nach Definition jedes $\xi \in G(N)$ zu einem Subdifferential $\partial f(y)$ mit $y \in N$ gehört, folgt die Behauptung mit Lemma 1.1.11 Punkt 1. □

Satz 3.1.15 *Gilt $\#(I \cup J) < \infty$, so ist die mengenwertige Abbildung $x \mapsto G(x)$ abgeschlossen in N.*

BEWEIS: Seien Folgen (x_k) und (ξ_k) mit $\lim_{k\to\infty} x_k = x \in N, \lim_{k\to\infty} \xi_k = \xi$ und $\xi_k \in G(x_k)$ für alle k gegeben. Zu zeigen ist $\xi \in G(x)$. Laut Definition von $G(x_k)$ gilt

$$\forall k\, \exists l_k \in \mathcal{I}(x_k, \varepsilon)\, \exists (a_m^{l_k,k}) \subseteq M_0 \setminus \tilde{\Omega}_f\, \exists \eta_{l_k}^k \in g_{l_k}(x_k)$$

mit

$$\lim_{m\to\infty} a_m^{l_k,k} = \eta_{l_k}^k \text{ und } \lim_{m\to\infty} \nabla f(a_m^{l_k,k}) = \xi_k. \tag{3.10}$$

Wir nutzen nun die Endlichkeitsvoraussetzung an die Anzahl der möglichen Indizes, um auf Teilfolgen (ξ_{k_ν}) und (x_{k_ν}) einzuschränken, so daß für alle ν gerade $l_{k_\nu} = l$ ist. Mit der Abgeschlossenheit von $x \mapsto \mathcal{I}(x, \varepsilon)$ laut Korollar 3.1.9 heißt das $l \in \mathcal{I}(x, \varepsilon)$. Die Folge $(\eta_l^{k_\nu})$ liegt in N kompakt, also existiert für $\nu \in \mathbb{N}$ eine konvergente Teilfolge, die oBdA auch mit $(\eta_l^{k_\nu})$ bezeichnet sei, mit Grenzwert η_l in N. Dieser wiederum liegt, da

$$\eta_l^{k_\nu} \in g_l(x_{k_\nu})$$

für alle ν ist, wegen der Abgeschlossenheit von $x \mapsto g_l(x)$ nach Lemma 3.1.11 in $g_l(x)$. Wir beenden den Beweis in ähnlicher Weise wie bei Satz 1.1.12. Die Konvergenzen für $m \to \infty$ liefern

$$\begin{aligned}\forall \mu > 0\, \forall \nu\, \exists m_0(\mu, \nu)\, \forall m \geq m_0(\mu, \nu) : \quad & \|a_m^{l,k_\nu} - \eta_l^{k_\nu}\| < \mu \\ \text{und} \quad & \|\nabla f(a_m^{l,k_\nu}) - \xi_{k_\nu}\| < \mu.\end{aligned}$$

Dementsprechend gibt es zu jedem ν ein minimales $m_0(\nu)$ mit

$$\|a_{m_0(\nu)}^{l,k_\nu} - \eta_l^{k_\nu}\| < \frac{1}{2\nu} \quad \text{und} \quad \|\nabla f(a_{m_0(\nu)}^{l,k_\nu}) - \xi_{k_\nu}\| < \frac{1}{2\nu}.$$

Hiermit definieren wir eine Folge $(b_\nu) \subseteq M_0 \setminus \tilde{\Omega}_f$ durch

$$b_\nu := a_{m_0(\nu)}^{l,k_\nu}.$$

Sei nun $\mu > 0$ beliebig. Dann existiert ein ν_0 derart, daß für alle $\nu \geq \nu_0$ gilt:

$$1/\nu < \mu,\ \|\eta_l^{k_\nu} - \eta_l\| < \mu/2 \quad \text{und} \quad \|\xi_{k_\nu} - \xi\| < \mu/2.$$

Insgesamt erhalten wir für alle $\nu \geq \nu_0$

$$\|b_\nu - \eta_l\| \leq \|b_\nu - \eta_l^{k_\nu}\| + \|\eta_l^{k_\nu} - \eta_l\| < \mu/2 + \mu/2 = \mu$$

und

$$\|\nabla f(b_\nu) - \xi\| \le \|\nabla f(b_\nu) - \xi_{k_\nu}\| + \|\xi_{k_\nu} - \xi\| < \mu/2 + \mu/2 = \mu.$$

Wir haben demnach eine Folge $(b_\nu) \subseteq M_0 \setminus \tilde{\Omega}_f$ konstruiert mit $\lim_{\nu\to\infty} b_\nu = \eta_l \in g_l(x), l \in \mathcal{I}(x,\varepsilon)$ und $\lim_{\nu\to\infty} \nabla f(b_\nu) = \xi$, woraus $\xi \in G(x)$ folgt. $\square$

Man kann die Voraussetzung des Satzes auf eine Umgebung von x einschränken und erhält folgende lokale Aussage:

Korollar 3.1.16 *Gilt $\#\mathcal{I}(y,\varepsilon) < \infty$ für alle y in einer Umgebung $U(x)$, so ist die mengenwertige Abbildung $x \mapsto G(x)$ abgeschlossen in x.*

Bemerkung 3.1.17 *Von nun an werden wir immer nur die Aussage über ganz N anführen. Wird keine explizite Einschränkung gemacht, kann man jeweils auch lokale Aussagen der obigen Form treffen.*

Mit den Korollaren 1.1.7 Punkt 2 und 3.1.14 folgt

Korollar 3.1.18 *Für $\#(I \cup J) < \infty$ und $x \in N$ ist die Menge $G(x)$ kompakt.*

Korollar 3.1.19 *Die mengenwertige Abbildung $x \mapsto G_{ko}(x)$ ist für den Fall $\#(I \cup J) < \infty$ abgeschlossen in N.*

BEWEIS: Seien Folgen (x_k) und (ξ_k) mit $\lim_{k\to\infty} x_k = x \in N, \lim_{k\to\infty} \xi_k = \xi$ und $\xi_k \in G_{ko}(x_k)$ für alle k gegeben. Zu zeigen ist $\xi \in G_{ko}(x)$.
Jedes ξ_k besitzt nach dem Satz von Carathéodory eine Darstellung der Form

$$\xi_k = \sum_{i=1}^{n+1} \lambda_{k,i}\xi_k^i, \; \sum_{i=1}^{n+1} \lambda_{k,i} = 1, \; \lambda_{k,i} \ge 0\,, \xi_k^i \in G(x_k)\,, i = 1, \dots, n+1.$$

Mit der Beschränkheit von $G(N)$ folgt die Existenz konvergenter Teilfolgen. Die Grenzwerte ξ^i, $i = 1, \dots, n+1$, dieser Teilfolgen liegen nach Satz 3.1.15 in $G(x)$.

Da die Koeffizienten $\lambda_{k,i}$ Elemente des Einheitssimplex sind, kann durch jeweiligen Übergang zu weiteren Teilfolgen auch eine Konvergenz

$$\lambda_k := (\lambda_{k,1}, \dots, \lambda_{k,n+1}) \to \lambda := (\lambda_1, \dots, \lambda_{n+1})$$

mit $\sum_{i=1}^{n+1} \lambda_i = 1$, $\lambda_i \geq 0$, $i = 1, \ldots, n+1$ erzielt werden. Insgesamt folgt somit für eine Teilfolge (ξ_{k_ν})

$$\lim_{\nu \to \infty} \xi_{k_\nu} = \xi = \sum_{i=1}^{n+1} \lambda_i \xi^i \in G_{ko}(x).$$

□

Satz 3.1.20 *Ist $\#(I \cup J) \leq \infty$, so gilt: Für $(x_k) \subseteq N$ mit $\lim_{k\to\infty} x_k = x, (\xi_k) \subseteq \mathbb{R}^n$ mit $\lim_{k\to\infty} \xi_k = \xi$ und $\xi_k \in G(x_k)$ für alle k folgt $\xi \in \partial f(y)$ für ein $y \in X^\varepsilon$.*

BEWEIS: Der Beweis verläuft zunächst wie der zu Satz 3.1.15. Die Ausgangssituation liefert

$$\forall k \, \exists l_k \in \mathcal{I}(x_k, \varepsilon) \, \exists (a_m^{l_k,k}) \subseteq M_0 \setminus \tilde{\Omega}_f \, \exists \eta_{l_k}^k \in g_{l_k}(x_k)$$

mit

$$\lim_{m\to\infty} a_m^{l_k,k} = \eta_{l_k}^k \text{ und } \lim_{m\to\infty} \nabla f(a_m^{l_k,k}) = \xi_k.$$

Die Folge $(\eta_{l_k}^k)$ liegt in N kompakt, so daß eine konvergente Teilfolge $(\eta_{l_{k_\nu}}^{k_\nu})$ mit $\eta_{l_{k_\nu}}^{k_\nu} \in g_{l_{k_\nu}}(x_{k_\nu})$ und Grenzwert $\eta \in N$ existiert. Da nach Definition des Subdifferentials für alle k

$$\nabla f(a_m^{l_k,k}) \in \partial f(a_m^{l_k,k})$$

ist, folgt mit der Abgeschlossenheit von $x \mapsto \partial f(x)$ gerade $\xi_k \in \partial f(\eta_{l_k}^k)$ für alle k beim Grenzübergang $m \to \infty$, also für die Teilfolgen

$$\xi_{k_\nu} \in \partial f(\eta_{l_{k_\nu}}^{k_\nu})$$

für alle ν. Dieselbe Eigenschaft nochmals angewandt liefert

$$\xi \in \partial f(\eta).$$

Wie schon mehrmals benutzt, gilt mit $\eta_{l_{k_\nu}}^{k_\nu} \in X_{k_\nu}^\varepsilon$ für alle ν auch $\eta \in X^\varepsilon$. □

Korollar 3.1.21 *Unter den gleichen Vorausssetzungen wie im vorhergehenden Satz mit $G_{ko}(x_k)$ statt $G(x_k)$ folgt $\xi \in \partial_{\sqrt{n}\varepsilon} f(x)$.*

BEWEIS: Für alle ξ_k existiert eine Darstellung der Form

$$\xi_k = \sum_{i=1}^{n+1} \lambda_{k,i}\xi_k^i,\ \sum_{i=1}^{n+1} \lambda_{k,i} = 1,\ \lambda_{k,i} \geq 0\, i = 1, \ldots, n+1,\ \xi_k^i \in G(x_k).$$

In Analogie zum Beweis von Korollar 3.1.19 existieren für $k \in \mathbb{N}$ konvergente Teilfolgen der Folgen (ξ_k^i), für deren Grenzwerte ξ^i aufgrund des gerade gezeigten Satzes 3.1.20 gilt:

$$\forall 1 \leq i \leq n+1\, \exists y_i \in X^\varepsilon : \xi^i \in \partial f(y_i).$$

Damit folgt bei möglicherweise weiteren Übergängen zu Teilfolgen bezüglich der Koeffizienten nach bekannter Argumentation

$$\lim_{\nu\to\infty} \xi_{k_\nu} = \xi = \sum_{i=1}^{n+1} \lambda_i \xi^i \in \operatorname{conv}\{\partial f(y_i) : y_i \in X^\varepsilon, 1 \leq i \leq n+1\}$$

und damit $\xi \in \partial_{\sqrt{n}\varepsilon} f(x)$. □

Wir greifen an dieser Stelle auf Beispiel 3.1.5 zurück und zeigen, daß die Menge $G(x)$ für eine unendliche Anzahl von A_i bzw. B_j mit $i \in I$ und $j \in J$, die nichtleeren Schnitt mit X^ε haben, nicht abgeschlossen sein muß. Dann kann erst recht die entsprechende mengenwertige Abbildung nicht diese Eigenschaft aufweisen.

Beispiel 3.1.22 Betrachte f aus Beispiel 3.1.5 mit dem Unterschied, daß f an der Stelle 1 differenzierbar sei und auf zwei Dimensionen erweitert werde. Wir setzen $\varepsilon = 0.6$, $x = (0.5, 0)^t$ und $X^\varepsilon = N$. Bezüglich der ersten Komponente habe f die Form des zitierten Beispiels und sei somit in $(1 - 1/n, 0)^t$ nicht differenzierbar. Ansonsten gelte Differenzierbarkeit. Die Box X^ε bildet den Abschluß der einzigen Komponente von $N \setminus \Omega_f$. Die Subdifferentiale an den nicht differenzierbaren Stellen werden von den Elementen $\pm(1 - 1/n, 0)^t$ erzeugt. Die Argumentpunkte werden bei der Bildung von $G(x)$ als entartete C^1-Komponenten von Ω_f berücksichtigt. x selbst wird zweifach betrachtet. Damit sind alle Punkte zur Bildung von $G(x)$ erfaßt. Dementsprechend läßt sich eine Folge von Elementen $\xi_n \in G(x)$ der Form $\xi_n = (1 - 1/n, 0)^t$ bilden. Diese konvergiert gegen $(1, 0)^t$, was wiederum aber in keinem $\partial f(1 - 1/n, 0)$ und damit auch nicht in $G(x)$ liegt. Die bekannte Theorie liefert lediglich $(1, 0)^t \in \partial f(1, 0)$ in Übereinstimmung mit der Aussage von Satz 3.1.20.

Motiviert durch dieses Beispiel setzen wir

$$G_k := \mathrm{cl}(\mathrm{conv}(G(x_k))) = \mathrm{cl}(G_{ko}(x_k)) \tag{3.11}$$

für beliebiges $x_k \in N$.

Da $G(x)$ beschränkt ist für alle $x \in N$, gilt hierfür

$$\mathrm{conv}(\mathrm{cl}(G(x_k))) = \mathrm{cl}(\mathrm{conv}(G(x_k))) \tag{3.12}$$

(vgl. [36], S. 101) und G_k kompakt.

Für $\#(I \cup J) < \infty$ ist laut Korollar 3.1.18 $G_{ko}(x_k) = G_k$.

Satz 3.1.23 *Sei $\#(I \cup J) = \infty$. Dann gilt:*
Für $(x_k) \subseteq N$ mit $\lim_{k\to\infty} x_k = x, (\xi_k) \subseteq \mathbb{R}^n$ mit $\lim_{k\to\infty} \xi_k = \xi$ und $\xi_k \in \mathrm{cl}(G(x_k)) \setminus G(x_k)$ für alle k folgt

$$\forall \sigma > 0\, \exists y \in X^\varepsilon\, \exists g \in \partial f(y) : \|\xi - g\| < \sigma,$$

also

$$\xi \in \mathrm{cl}\left(\bigcup_{y \in X^\varepsilon} \partial f(y) \right).$$

BEWEIS: Aus $\xi_k \in \mathrm{cl}(G(x_k)) \setminus G(x_k)$ für alle k folgt

$$\forall k\, \forall \mu > 0\, \exists g_k \in G(x_k) : \|g_k - \xi_k\| < \mu. \tag{3.13}$$

Sei nun $\sigma > 0$ beliebig aber fest. Dann existiert also zu (ξ_k) eine korrespondierende Folge (g_k) mit der Eigenschaft (3.13) für $\mu = \sigma/3$. Aufgrund der Beschränktheit von $G(N)$ existiert hierzu eine konvergente Teilfolge (g_{k_ν}) mit $g_{k_\nu} \in G(x_{k_\nu})$ für alle ν und

$$\lim_{\nu\to\infty} g_{k_\nu} = g.$$

Hierfür liefert Satz 3.1.20 die Aussage

$$g \in \partial f(y) \text{ für ein } y \in X^\varepsilon.$$

Die Abschätzung $\|\xi - g\| < \sigma$ folgt aus der Kombination dieser drei Argumente. □

Wendet man im letzten Beweisschritt Korollar 3.1.21 statt Satz 3.1.20 an, so erhält man analog

Korollar 3.1.24 *Sei $\#(I \cup J) = \infty$. Dann gilt:*
Für $(x_k) \subseteq N$ mit $\lim_{k\to\infty} x_k = x, (\xi_k) \subseteq \mathbb{R}^n$ mit $\lim_{k\to\infty} \xi_k = \xi$ und $\xi_k \in \mathrm{cl}(G_{ko}(x_k)) \setminus G_{ko}(x_k)$ für alle k folgt

$$\forall \sigma > 0 \, \exists g \in \partial_{\sqrt{n}\varepsilon} f(x) : \|\xi - g\| < \sigma.$$

3.1.4 Das neue Unterproblem

Wir nehmen für die Konstruktion der Box F'_k im k-ten Schritt zum Iterationspunkt x_k weiterhin die Gültigkeit der Eigenschaft (2.2)

$$F'_k \supseteq \partial f(X_k^\varepsilon) = \bigcup_{u \in X_k^\varepsilon} \partial f(u)$$

an. Andererseits gilt $G_k \subseteq F'_k$ sowie $G_k \subseteq \partial_a f(x_k)$ mit

$$a := \sup_{l \in \mathcal{I}(x_k,\varepsilon)} \{\|\eta_l - x_k\| : \eta_l \in g_l(x_k)\}.$$

Im Falle $a \leq \varepsilon$ erhalten wir mit der Konvexität der Box F'_k die Inklusionskette

$$G_k \subseteq \partial_a f(x_k) \subseteq F'_k. \tag{3.14}$$

Eine weitere Voraussetzung für die Anwendung des nun herzuleitenden Verfahrens im k-ten Schritt sei

$$\#\mathcal{I}(x_k, \varepsilon) > 1. \tag{3.15}$$

Andernfalls verlieren die Konstruktionen ihre Wirkung. Unter Verwendung von $-F'_k$ und G_k soll die Richtung d_k nun als Lösung des Problems

$$\textbf{(UP1)} \quad \min_{d \in -F'_k} \max_{\xi \in G_k} \xi^t d$$

bestimmt werden, welches die Minimierung einer konvexen Funktion über einer konvexen, kompakten Menge ist (vgl. Satz 1.1.21). Dabei gilt mit Lemma 1.1.20

$$\max_{\xi \in G_k} \xi^t d = \max_{\xi \in \mathrm{cl}(G(x_k))} \xi^t d$$

und kombiniert mit Korollar 3.1.13

$$\min_{d \in -F'_k} f^\circ(x_k, d) \leq \min_{d \in -F'_k} \max_{\xi \in \mathrm{cl}(G(x_k))} \xi^t d. \tag{3.16}$$

Lege dementsprechend folgende **Abbruchbedingung** fest:

$$\exists \xi \in \mathrm{cl}(G(x_k)) : \xi^t d_k \geq 0. \tag{3.17}$$

Satz 3.1.25 *Sei d_k Lösung von* (UP1) *zum Punkt x_k mit $\xi^t d_k < 0$ für alle $\xi \in \mathrm{cl}(G(x_k))$. Dann gilt mit $g_k := -\arg\min\{\|p\| : p \in G_k\}$*

$$\xi^t d_k \leq -\|g_k\|^2 \text{ für alle } \xi \in G_k.$$

BEWEIS: Nach Lemma 1.1.19 gilt mit $h_k := \arg\min\{\|p\| : p \in G_k\}$

$$\forall \xi \in G_k : \xi^t h_k \geq \|h_k\|^2,$$

was (vgl. Beweis zu Lemma 2.3.1) gleichwertig ist mit

$$\forall \xi \in G_k : \xi^t g_k \leq -\|g_k\|^2.$$

Mit der Wahl von d_k als Lösung von (UP1) und $g_k \in -F'_k \supseteq -G_k$ folgt insgesamt

$$\max_{\xi \in G_k} \xi^t d_k \leq \max_{\xi \in G_k} \xi^t g_k \leq -\|g_k\|^2.$$

□

Bemerkung 3.1.26 *Falls die Abbruchbedingung nicht erfüllt ist, gilt insbesondere $\xi^t d_k < 0$ für alle $\xi \in \partial f(x_k)$, also die Abstiegseigenschaft der generierten Richtung.*

Wir verdeutlichen noch einmal den Zusammenhang zwischen der Aussage des letzten Satzes und der Abbruchbedingung.

Korollar 3.1.27 $0 \in G_k \iff \exists \xi \in \mathrm{cl}(G(x_k)) : \xi^t d_k \geq 0$

BEWEIS: Die eine Richtung des Beweises folgt unmittelbar aus der Konstruktion in Satz 3.1.25. Nimmt man nämlich an, daß $0 \notin G_k$ sei, so folgt

$$\forall \xi \in \mathrm{cl}(G(x_k)) : \xi^t d_k \leq -\|g_k\|^2 < 0$$

mit g_k wie in Satz 3.1.25 im Widerspruch zur Voraussetzung.
Die andere Implikation zeigt man indirekt durch die Annahme

$$\forall \xi \in \mathrm{cl}(G(x_k)) : \xi^t d_k < 0.$$

Hieraus folgt durch Ansehen der Konvexkombination sofort

$$\forall \xi \in G_k : \xi^t d_k < 0$$

und damit auch der Widerspruch $0 \notin G_k$. □

Wir stellen einen kurzen Vergleich zwischen dem neuen Problem (UP1) und dem alten (UP0) aus Kapitel 2 und einer Minimierung der verallgemeinerten Richtungsableitung über $-F'_k$ an. Die Lösung von (UP0) sei mit g_{alt} bezeichnet. Wir benutzen Satz 1.1.21.

$$\begin{aligned}
\min_{d \in -F'_k} f^\circ(x_k, d) &\leq \min_{d \in -F'_k} \max_{\xi \in G_k} \xi^t d \qquad \text{(UP1)} \\
&\leq \min_{d \in -G_k} \max_{\xi \in G_k} \xi^t d \\
&= \max_{\xi \in G_k} \min_{d \in -G_k} \xi^t d \\
&\leq \max_{\xi \in G_k} -\|\xi\|^2 \\
&= -\min_{\xi \in G_k} \|\xi\|^2 \\
&\leq -\min_{\xi \in F'_k} \|\xi\|^2 \\
&= -\|g_{alt}\|^2 \qquad \text{(UP0)}
\end{aligned}$$

Der Optimalwert des neuen Unterproblems (UP1) liegt also in der Mitte der Ansätze.

3.2 Charakterisierung der C^1-Komponenten durch Einzelfunktionen

Wir führen eine andere Charakterisierung der C^1-Komponenten bzw. der Zielfunktion hierauf ein. Diese wird die aufgebaute Theorie nicht verändern, sondern lediglich der Erleichterung bei der Betrachtung unterschiedlicher Voraussetzungen an die Zielfunktion und der Übertragung des Ansatzes auf konkrete Probleme dienen. Diesen Vorteil werden wir anschließend im Zuge der Konvergenzüberlegungen für ein Verfahren unter Verwendung von (UP1) nutzen.

Es korrespondiere zu jedem $i \in I$ und der entsprechenden C^1-Komponente $\tilde{A}_i$ eine Funktion $f_i : \tilde{A}_i \to \mathrm{I\!R}$ mit $f|_{\tilde{A}_i} \equiv f_i$, also auch mit denselben Eigenschaften, wie f sie hat. Mit A_i sei weiterhin der Abschluß $\mathrm{cl}(\tilde{A}_i)$ bezeichnet.

Bemerkung 3.2.1 *Für ein Element $x \in N$ und eine Folge $(x_k) \subseteq N \setminus \Omega_f$ mit $\lim_{k\to\infty} x_k = x$ gibt es zwei Fälle:*

1. *Es existiert ein $i \in I$ und ein Index k_0, so daß $x_k \in \tilde{A}_i$ für alle $k \geq k_0$ gilt; das bedeutet $x \in A_i$.*
2. *Zu jedem k_0 existiert ein $k \geq k_0$ mit $x_{k_0} \in \tilde{A}_i$ und $x_k \in \tilde{A}_j$, $j \neq i$. (vgl. Beispiel 3.1.5)*

Liegt $x \in N \setminus \Omega_f$, so gehört es einer Komponente $\tilde{A}_i$ an, und die Funktion f_i wird zugeordnet.

Legt man nun eine weitere Indexmenge

$$\mathcal{I}_f(x) := \{i \in I : x \in A_i\} \tag{3.18}$$

fest, die den Bezug zu dieser Interpretation herstellt, sieht man direkt, daß die Mengen $\mathcal{I}_{\mathcal{A}}(x, 0)$ und $\mathcal{I}_f(x)$ identisch sind. Gilt für $x \in \Omega_f$ der oben beschriebene zweite Fall für alle Folgen (x_k) mit $\lim_{k\to\infty} x_k = x$, so ist $\mathcal{I}_f(x) = \emptyset$.

Bemerkung 3.2.2 *Ist $\#I < \infty$, so existiert für jede Folge $(x_k) \subseteq N \setminus \Omega_f$ eine Teilfolge, deren Folgenglieder alle in der gleichen C^1-Komponente über $N \setminus \Omega_f$ liegen. Damit ist hierfür $\mathcal{I}_f(x) \neq \emptyset$ für alle $x \in N$.*

Von nun an wird die Charakterisierung der Komponenten durch Einzelfunktionen - wie bereits angekündigt - vorrangig im Zusammenhang mit der Formulierung verschiedener Voraussetzungen an f und damit eben an die f_i verwendet werden. Aufgrund der soeben erwähnten Gleichheit der Indexmengen, die aus unterschiedlichen Gedankenansätzen resultieren, ist es möglich, ohne größere Zusatzüberlegungen zwischen beiden zu wechseln. Das folgende Ergebnis hat lediglich formalen Charakter.

Lemma 3.2.3 *Es liege die soeben beschriebene Situation vor.*

1. *Für alle $i \in \mathcal{I}_f(x)$ und Folgen $x_m \to x \in N$ mit $(x_m) \subseteq \tilde{A}_i$ gilt $\lim_{m\to\infty} f_i(x_m) = f(x)$.*

2. *Gilt Eigenschaft 1 aus Bemerkung 3.2.1 für jede Folge* (x_k), *die gegen* $x \in \operatorname{int}(N)$ *konvergiert, so ist* $\partial f(x) \subseteq \operatorname{conv}\{\partial f_i(x) : i \in \mathcal{I}_f(x)\}$.

BEWEIS 1. Teil: Die erste Behauptung folgt direkt aus der Stetigkeit der Zielfunktion bzw. demzufolge der Einzelfunktionen in der jeweiligen C^1-Komponente.

Bemerkung 3.2.4 *Aufgrund dieses ersten Teils können die Einzelfunktionen Lipschitz stetig auf* A_i *fortgesetzt werden. Es gilt damit* $f|_{A_i} \equiv f_i$. *Oftmals ist der tatsächliche Definitionsbereich der* f_i *sogar größer, und diese Möglichkeit möchten wir auch nicht ausschließen.*

BEWEIS 2. Teil: Ein Element $g \in \partial f(x)$ besitzt nach dem Satz von Carathéodory eine Darstellung der Form

$$g = \sum_{\nu=1}^{n+1} \lambda_\nu g_\nu, \; \sum_{\nu=1}^{n+1} \lambda_\nu = 1, \; \lambda_\nu \geq 0, \; i = 1, \ldots, n+1,$$

wobei zu jedem dieser g_ν eine Folge $(x_m^\nu) \subseteq N \setminus \Omega_f$ existiert mit

$$\lim_{m \to \infty} x_m^\nu = x \text{ und } \lim_{m \to \infty} \nabla f(x_m^\nu) = g_\nu.$$

Nach Voraussetzung gibt es jeweils ein m_0 und ein $i \in \mathcal{I}_f(x)$, so daß für alle $m \geq m_0$ gilt

$$x_m^\nu \in \tilde{A}_i \text{ und damit } \nabla f(x_m^\nu) = \nabla f_i(x_m^\nu).$$

□

3.3 Konvergenzuntersuchungen

In diesem Abschnitt sollen Konvergenzaussagen für den Algorithmus gezeigt werden, der mit dem Unterproblem (UP1) und exakter Liniensuche arbeitet. Wir werden Modifikationen bzw. Erweiterungen herleiten, um im allgemeinen Fall, der keine weiteren Voraussetzungen an die Zielfunktion beinhaltet als die lokale Lipschitzstetigkeit und die Abzählbarkeit von I und J, auch auf entsprechende Resultate zu kommen. Zunächst wird ein Spezialfall betrachtet, der sich aus Zusatzbedingungen an die f_i mit $i \in I$ ergibt und mit Hilfe dieser Einzelfunktionen beschrieben wird.

3.3.1 Stetig differenzierbare Einzelfunktionen

Innerhalb dieses Abschnitts seien die f_i, die auf A_i mit der Zielfunktion f übereinstimmen, C^1-Funktionen auf $\mathrm{int}(A_i^\iota)$ für ein $\iota > 0$ mit

$$A_i^\iota := \{y : y \in Z^\iota, z \in A_i\}.$$

Wie wir später noch sehen werden, liegt diese Situation in der Praxis häufig vor. Dies bedeutet dann insbesondere, daß die Ableitungen sogar gleichmäßig stetig sind in dem jeweiligen Kompaktum A_i und f selbst in $N \setminus \Omega_f$ stetig differenzierbar ist. Wir erhalten also für die Einzelfunktionen f_i die Eigenschaft

$$\forall \mu > 0\, \exists \delta_i(\mu) > 0\, \forall x, y \in A_i : [\|x - y\| < \delta_i \Rightarrow \|\nabla f_i(x) - \nabla f_i(y)\| < \mu]. \tag{3.19}$$

Hieran sei nun folgende Bedingung geknüpft:

$$\forall \mu > 0 : \inf_{i \in I}\{\delta_i(\mu)\} > 0. \tag{3.20}$$

Diese Forderung wird gleich im Konvergenzbeweis benötigt. Sie muß im Prinzip aber nur in einer abgeschwächten Form erfüllt sein in der Hinsicht, daß die Konstanten nicht unbedingt über dem gesamten Definitionsbereich jeder Funktion gelten müssen, sondern nur in einer geeigneten kleinen kompakten Umgebung eines ausgezeichneten Punktes (des Häufungspunktes x^*, siehe unten). (3.20) führt zu keinerlei Einschränkung im Falle nur endlich vieler C^1-Komponenten. Weiterhin ist

$$\forall i \in I\, \forall x \in A_i : \partial f_i(x) = \{\nabla f_i(x)\} \text{ und } f_i^\circ(x, d) = \nabla f_i(x)^t d.$$

Sei nun $M_i > 0$ obere Schranke von ∇f_i über A_i und

$$M := \sup_{i \in I}(M_i, 1). \tag{3.21}$$

Die Existenz ist durch die allgemeinen Überlegungen zur Beschränkung der Subgradienten über dem kompakten N gesichert. oBdA können wir damit M auch als obere Schranke für unsere Boxen F_k' annehmen.

Lemma 3.3.1 *Gilt Eigenschaft 1 aus Bemerkung 3.2.1 für jede Folge (x_k), die gegen $x \in \mathrm{int}(N)$ konvergiert, so ist*

$$\partial f(x) = \mathrm{conv}\{\nabla f_i(x) : i \in \mathcal{I}_f(x)\}$$

und damit auch

$$f^\circ(x,d) = \max\{\nabla f_i(x)^t d : i \in \mathcal{I}_f(x)\}.$$

BEWEIS: Die eine Inklusion ist Analogon zu Punkt 2 des Lemmas 3.2.3, übertragen auf die spezielle Situation. Aufgrund der C^1-Eigenschaft der f_i in A_i^t kann man auch umgekehrt schließen, da die Grenzwerte der Gradientenfolgen immer eindeutig durch $\nabla f_i(x)$ bestimmt sind. □

Korollar 3.3.2 *Für $x \in N$ und $i \in \mathcal{I}_f(x)$ gilt $\nabla f_i(x) \in \partial f(x)$.*

Bemerkung 3.3.3
1. *Im allgemeinen Fall war der letzte Schluß im obigen Beweis nicht möglich. Für ein Element g aus $\partial f_i(x)$ derart, daß es dazugehörige Folgen (x_m) mit $\lim_{m\to\infty} x_m = x$ und $(\nabla f_i(x_m))$ mit $\lim_{m\to\infty} \nabla f_i(x_m) = g$ gibt, gilt nicht notwendig die Identifikation von $\nabla f_i(x_m)$ mit $\nabla f(x_m)$, da nicht auszuschließen ist, daß $\nabla f_i(y)$ auch ausserhalb von A_i gebildet werden kann. Ist der Definitionsbereich der Einzelfunktionen größer, kann dieser Fall eintreten und somit $g \notin \partial f(x)$ sein. Deshalb ermöglicht nur die Eindeutigkeit des Grenzwertes, wie sie im C^1-Fall vorliegt, den Beweis.*

2. *Ist $\mathcal{I}_f(x) = \emptyset$, kann keine natürliche Übertragung auf Einzelfunktionen im bisherigen Sinne erfolgen.*

Satz 3.3.4 *Sei $(x_k) \subseteq N$ eine durch den nicht abbrechenden Algorithmus bestehend aus* (UP1) *und exakter Liniensuche generierte Folge. Dann ist die zugehörige Folge der (h_k) mit $h_k := \arg\min\{\|p\| : p \in G_k\}$ konvergent mit*

$$\lim_{k\to\infty} h_k = 0. \tag{3.22}$$

Insbesondere gelten für einen Häufungspunkt x^* von (x_k) und die dazugehörige konvergente Teilfolge (x_{k_ν}):

1. *$\#(I \cup J) < \infty$: Es ist $0 \in G_{ko}(x^*)$.*
2. *$\#(I \cup J) \leq \infty$:*
   (a) *Für $\lim_{\nu\to\infty} h_{k_\nu} = 0$ mit $h_{k_\nu} \in G(x_{k_\nu})$ für alle ν folgt*

$$0 \in \partial f(y) \text{ für ein } y \in (X^*)^\varepsilon.$$

(b) *Für* $\lim_{\nu\to\infty} h_{k_\nu} = 0$ *mit* $h_{k_\nu} \in G_{ko}(x_{k_\nu})$ *für alle* ν *folgt*

$$0 \in \partial_{\sqrt{n}\varepsilon} f(x^*).$$

3. $\#(I \cup J) = \infty$*:*

(a) *Für* $\lim_{\nu\to\infty} h_{k_\nu} = 0$ *mit* $h_{k_\nu} \in \mathrm{cl}(G(x_{k_\nu})) \setminus G(x_{k_\nu})$ *für alle* ν *folgt*

$$\forall \sigma > 0 \, \exists y \in (X^*)^\varepsilon \, \exists g \in \partial f(y) : \|g\| < \sigma.$$

(b) *Für* $\lim_{\nu\to\infty} h_{k_\nu} = 0$ *mit* $h_{k_\nu} \in \mathrm{cl}(G_{ko}(x_{k_\nu})) \setminus G_{ko}(x_{k_\nu})$ *für alle* ν *folgt*

$$\forall \sigma > 0 \, \exists g \in \partial_{\sqrt{n}\varepsilon} f(x^*) : \|g\| < \sigma.$$

BEWEIS: Ein Häufungspunkt x^* der Iterationsfolge existiert aufgrund der Kompaktheit von N. Sei (x_{k_ν}) die dementsprechende konvergente Teilfolge mit

$$\lim_{\nu\to\infty} x_{k_\nu} = x^*.$$

Satz 3.1.25 liefert für alle k

$$\forall \xi \in G_k : \xi^t d_k \leq -\|h_k\|^2.$$

Nehmen wir an, daß (h_k) nicht gegen 0 konvergiert, so existiert ein $\rho < 0$ und

$$\forall k_0 \, \exists k \geq k_0 : -\|h_k\|^2 \leq \rho.$$

Wir betrachten die dementsprechende Teilfolge, die mit (h_{k_n}) bezeichnet werde. Hierfür gilt

$$\forall \xi \in G_{k_n} : \xi^t d_{k_n} \leq \rho/2.$$

Nach (3.19) existiert für alle $i \in I$ zu $-\rho/(8M)$ ein $\delta_i := \delta_i(-\rho/(8M)) > 0$, so daß

$$\forall x, y \in A_i : [\|x - y\| < \delta_i \Rightarrow \|\nabla f_i(x) - \nabla f_i(y)\| < -\rho/(8M)]. \tag{3.23}$$

Kombiniert mit der anschließenden Forderung (3.20) ermöglicht dies die Definition

$$\delta := \inf_{i \in \cup_{n\in\mathbb{N}} \mathcal{I}_\mathcal{A}(x_{k_n}, \varepsilon)} (\delta_i, \varepsilon) > 0.$$

Sei $z \in U(x_{k_n}, \delta/4)$, $n \in \mathbb{N}$, beliebig. Da nach Bemerkung 3.1.7 $(X_k^\varepsilon) \subseteq N$ ist, liegt z im Inneren von N. Wir betrachten einen beliebigen Subgradienten $\xi \in \partial f(z)$. Er ist Konvexkombination von Elementen ξ_l, für die es Folgen $(z_m^l) \subseteq N \setminus \Omega_f$ mit $\lim_{m\to\infty} z_m^l = z$ und $\lim_{m\to\infty} \nabla f(z_m^l) = \xi_l$ gibt. Hierfür unterscheiden wir gemäß Bemerkung 3.2.1 zwei Fälle:

1. Es existiert ein $j \in I$ und ein m_0, so daß für alle $m \geq m_0$

$$z_m^l \in \tilde{A}_j \text{ und } \nabla f(z_m^l) = \nabla f_j(z_m^l)$$

gilt. Es ist damit $z \in A_j$ und wegen der C^1-Voraussetzung $\xi_l = \nabla f_j(z)$. Nach Definition von δ ist $j \in \mathcal{I}_\mathcal{A}(x_{k_n}, \varepsilon)$. Wir unterscheiden nochmals:

(a) $j \in \mathcal{I}_\mathcal{A}(x_{k_n}, 0)$:
Es folgt $g_j(x_{k_n}) = \{x_{k_n}\}$, also $\nabla f_j(x_{k_n}) \in G_{k_n}$. Man schreibt hiermit

$$\nabla f_j(z)^t d_{k_n} = (\nabla f_j(z)^t d_{k_n} - \nabla f_j(x_{k_n})^t d_{k_n}) + \nabla f_j(x_{k_n})^t d_{k_n}$$

um, wobei der letzte Summand $\leq \rho/2$ ist. Es gilt mit der Definition von δ und (3.23)

$$\begin{aligned} |\nabla f_j(z)^t d_{k_n} - \nabla f_j(x_{k_n})^t d_{k_n}| &\leq \|\nabla f_j(z) - \nabla f_j(x_{k_n})\| \|d_{k_n}\| \\ &< -\frac{\rho}{8M} \cdot M = -\rho/8, \end{aligned}$$

so daß insgesamt

$$\nabla f_j(z)^t d_{k_n} < 3\rho/8 < 0$$

folgt.

(b) $j \notin \mathcal{I}_\mathcal{A}(x_{k_n}, 0)$:
Da $\delta/4 < \varepsilon$ ist, existiert $\eta_j \in g_j(x_{k_n})$, $\eta_j \neq x_{k_n}$, mit $\|\eta_j - x_{k_n}\| \leq \|z - x_{k_n}\| < \delta/4$ und $\nabla f_j(\eta_j) \in G_{k_n}$. Analog zum ersten Fall schätzt man hiermit

$$\nabla f_j(z)^t d_{k_n} = (\nabla f_j(z)^t d_{k_n} - \nabla f_j(\eta_j)^t d_{k_n}) + \nabla f_j(\eta_j)^t d_{k_n} < 3\rho/8$$

ab, da $\|z - \eta_j\| \leq 2\|z - x_{k_n}\| < \delta/2$ ist.

2. Es gilt Eigenschaft 2 der Bemerkung 3.2.1. Da $(z_m^l) \subseteq N \setminus \Omega_f$ ist, existiert für jedes z_m^l ein $j_m \in I$ mit $j_m \in \mathcal{I}_\mathcal{A}(z_m^l, 0)$ und $\nabla f(z_m^l) = \nabla f_{j_m}(z_m^l)$. Sei m_0 so gewählt, daß für alle $m \geq m_0$

$$\|z_m^l - z\| < \delta/4 \quad \text{und} \quad \|\nabla f_{j_m}(z_m^l) - \xi_l\| < -\rho/8M \tag{3.24}$$

ist. Damit ist auch

$$\|z_m^l - x_{k_n}\| \leq \|z_m^l - z\| + \|z - x_{k_n}\| < \delta/2,$$

also $j_m \in \mathcal{I}_\mathcal{A}(x_{k_n}, \varepsilon)$ und $g_{j_m}(x_{k_n}) \neq \emptyset$. Zu jedem j_m für $m \geq m_0$ existiert demnach ein $\eta_{j_m} \in g_{j_m}(x_{k_n})$ mit

$$\|\eta_{j_m} - x_{k_n}\| \leq \|z_m^l - x_{k_n}\| < \delta/2 \quad \text{und} \quad \nabla f_{j_m}(\eta_{j_m}) \in G_{k_n}.$$

Insgesamt schätzt man ab:

$$\begin{aligned} \|\xi_l - \nabla f_{j_m}(\eta_{j_m})\| &\leq \|\xi_l - \nabla f_{j_m}(z_m^l)\| + \|\nabla f_{j_m}(z_m^l) - \nabla f_{j_m}(\eta_{j_m})\| \\ &< -\rho/8M - \rho/8M = -\rho/4M. \end{aligned}$$

Dabei benutzt man (3.23) mit

$$\|z_m^l - \eta_{j_m}\| \leq \|z_m^l - x_{k_n}\| + \|x_{k_n} - \eta_{j_m}\| < 2\delta/2 = \delta.$$

Nun kann man analog zum ersten Fall zusammensetzen

$$\xi_l^t d_{k_n} = (\xi_l^t d_{k_n} - \nabla f_{j_m}(\eta_{j_m})^t d_{k_n}) + \nabla f_{j_m}(\eta_{j_m})^t d_{k_n},$$

wobei der letzte Summand $\leq \rho/2$ und der Gesamtausdruck dann kleiner als $\rho/4$ ist.

Insgesamt folgt $\xi_l^t d_{k_n} < \rho/4$ und damit $\xi^t d_{k_n} < \rho/4$ für alle $\xi \in \partial f(z)$. Mit anderen Worten hat man mit dem für alle n gültigen δ

$$\forall k_n \, \forall z \in U(x_{k_n}, \delta/4) : f^\circ(z, d_{k_n}) < \rho/4. \tag{3.25}$$

Für die exakte Liniensuche bedeutet dies für alle $n \in \mathbb{N} : t_{k_n} > \delta/8$ bei einer Normierung von d_{k_n} auf 1 oder kleiner. Also erhalten wir

$$f(x_{k_n+1}) = f(x_{k_n} + t_{k_n} d_{k_n}) \leq f(x_{k_n} + \frac{\delta}{8} \cdot \frac{d_{k_n}}{M}).$$

Nach dem Mittelwertsatz 1.1.22 ist

$$f(x_{k_n} + \frac{\delta}{8M} d_{k_n}) - f(x_{k_n}) = \frac{\delta}{8M} h^t d_{k_n}$$

mit $h \in \partial f(u)$ und $u \in U(x_{k_n}, \delta/4)$, da u auf der Verbindungsstrecke zwischen den beiden Punkten liegt. Also gilt nach (3.25)

$$f(x_{k_n} + \frac{\delta}{8M} d_{k_n}) - f(x_{k_n}) < \frac{\delta}{8M} \cdot \rho/4.$$

Die Folge $(f(x_k))$ ist für alle k bei Nichtabbruch monoton abnehmend, so daß die gesamte Funktionswertfolge gegen $f(x^*)$ konvergiert.

Zusammen ergibt dies dann

$$\begin{aligned}
f(x^*) - f(x_0) &= \sum_{k=0}^{\infty} (f(x_{k+1}) - f(x_k)) \\
&\leq \sum_{n=0}^{\infty} (f(x_{k_n+1}) - f(x_{k_n})) \\
&\leq \sum_{n=0}^{\infty} (f(x_{k_n} + \frac{\delta}{8M} d_{k_n}) - f(x_{k_n})) \\
&\leq \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\delta}{8M} \cdot \rho/4,
\end{aligned}$$

also einen Widerspruch, da die rechte Seite den Wert $-\infty$ annimmt.
Die weitergehenden Behauptungen unter 1., 2. und 3. sind in den dort vorliegenden Fällen direkte Konsequenzen aus den Korollaren 3.1.19, 3.1.21 und 3.1.24 sowie den Sätzen 3.1.20 und 3.1.23 bei Betrachtung der konvergenten Teilfolge. □

Aus der Definition von $G_{ko}(x^*)$ folgt

Korollar 3.3.5 *Für $\#(I \cup J) < \infty$ ist*

$$0 \in \partial_a f(x^*) \text{ mit } a := \max_{j \in \mathcal{I}(x^*, \varepsilon)} \|\eta_j - x^*\|.$$

Bemerkung 3.3.6 *1. Interessant ist der Zusammenhang zwischen der Wahl des Arbeitsbereiches N und der Möglichkeit, eine gegebene Funktion in der gerade aufgezeigten Weise durch C^1-Einzelfunktionen im* *theoretischen Ansatz zu beschreiben. Eine Verkleinerung der kompakten Menge N kann eine solche Darstellung realisierbar machen. Das ist leicht einsehbar. Betrachtet man beispielsweise eine Funktion $f : N = [-1,1]^2 \to \mathbb{R}$, welche in $\Omega_f := \{x \in \mathbb{R}^2 : 0.25 \leq x^{(1)} \leq 0.75\}$ nicht differenzierbar ist, ansonsten jedoch die C^1-Eigenschaft besitzt, so wird diese Komponente durch den Abschluß der einzigen C^1-Komponente von $N \setminus \Omega_f$* geschluckt *und eine Übertragung des obigen Ansatzes ist nicht möglich. Verkleinert man N auf $[0.25, 0.75] \times [-1,1]$ und betrachtet diesen Bereich sowie $[-1, 0.25] \times [-1,1]$ und $[0.75, 1] \times [-1,1]$ gesondert durch das Verfahren, so geht Ω_f nicht verloren. Eine Bearbeitung der erstgenannten Menge führt auf zwei C^1-Komponenten von $N \setminus \Omega_f$ und damit auch auf zwei C^1-Einzelfunktionen.*

2. *Bei einer Analyse der Betrachtung des Arbeitsbereiches zu Beginn dieses Kapitels kann man feststellen, daß mit der geeigneten Wahl von N keinerlei Einschränkungen durch die Voraussetzung $(X_k^\varepsilon) \subseteq N$ entstehen. Ein Abstiegsverfahren für f arbeitet auf $\{x : f(x) \leq f(x_0)\}$. Die Bedingung wird implizit im Beweis benötigt, da alle Überlegungen in N erfolgen. Durch die Bedingung liegen die Iterierten im Inneren von N.*

3.3.2 Allgemeiner Fall

Zunächst sind erweiternde Konstruktionen nötig. Diese führen auf Intervallansätze, mit Hilfe derer Konvergenz erzielt werden kann. Dabei bleiben die Eigenschaften der bisherigen Abbildungen in der entsprechenden Erweiterung im Grundsatz erhalten. Die Idee der ε-Bündel-Verfahren, Subdifferentiale über einer Umgebung zu betrachten, wird mit Intervallauswertungen und der bisherigen Auswahl der Punkte geeignet verknüpft.

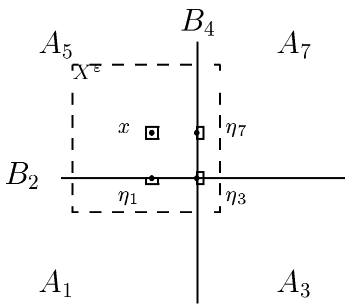
3.3.2.1 Boxerweiterungen der Konstruktionselemente

Wir gehen in Analogie zu Abschnitt 3.1.3 vor und definieren die mengenwertige Abbildung $\square g_l : N \to \wp(N)$ bei festem $0 < \delta < \varepsilon$ durch

$$\square g_l(x) := \{\eta_l + 0^\delta : \eta_l \in g_l(x)\} \cap C_l \text{ für } l \in \mathcal{I}(x, \varepsilon). \qquad (3.26)$$

$\square g_l(x)$ enthält alle Punkte η_l aus der bekannten Abbildung g_l an der Stelle x erweitert um die Boxen mit Kantenlänge 2δ und Mittelpunkten η_l im Durchschnitt mit der entsprechenden Komponente C_l, das heißt A_l für $l \in \mathcal{I}_\mathcal{A}(x, \varepsilon)$

bzw. B_l für $l \in \mathcal{I}_\mathcal{B}(x, \varepsilon)$. In Analogie zur Skizze im Anschluß an die Definition von $g_l(x)$ kann man sich das wie folgt vorstellen:



Die Boxen $\square g_2(x)$ und $\square g_4(x)$, die zu den Komponenten über Ω_f korrespondieren, sind entartet und liegen auf den Geraden B_2 und B_4. Sie sind aufgrund der Abschlußbildung der Komponenten in $\square g_1(x)$ bzw. $\square g_7(x)$ enthalten.

Bemerkung 3.3.7 *Nach Wahl von δ gilt analog zu Bemerkung 3.1.7 für eine Folge (x_k) mit $f(x_{k+1}) \leq f(x_k)$ für alle k $(X_k^{\varepsilon+\delta}) \subseteq N$.*

Lemma 3.3.8 *Sei $l \in \mathcal{I}(x, \varepsilon)$ beliebig.*

1. *$y \in \square g_l(x) \iff \exists z \in g_l(x) : \|z - y\|_\infty \leq \delta$ und $l \in \mathcal{I}(y, 0)$.*
2. *Die mengenwertige Abbildung $x \mapsto \square g_l(x)$ ist abgeschlossen in N.*

BEWEIS: Punkt 1 ist lediglich eine Umformulierung der Definition (3.26). Betrachten wir zum Nachweis von Behauptung 2 Folgen (x_k) und (y_k) mit $\lim_{k\to\infty} x_k = x, \lim_{k\to\infty} y_k = y$ und $y_k \in \square g_l(x_k)$ für alle k. Aus der letzten Eigenschaft folgt nach Punkt 1

$$\forall k\, \exists z_k \in g_l(x_k) : \|z_k - y_k\|_\infty \leq \delta \text{ und } l \in \mathcal{I}(y_k, 0).$$

Diese Folge der z_k liegt ebenfalls in N, weshalb eine konvergente Teilfolge (z_{k_ν}) existiert mit

$$\lim_{\nu\to\infty} z_{k_\nu} = z \in N.$$

Mit der Abgeschlossenheit der Abbildung g_l nach Lemma 3.1.11, Punkt 2, bedeutet dies $z \in g_l(x)$. Die Abschätzung $\|z_{k_\nu} - y_{k_\nu}\|_\infty \leq \delta$ bleibt beim

Grenzübergang erhalten, und $l \in \mathcal{I}(y,0)$ folgt aus der Abgeschlossenheit von C_l. Insgesamt erhalten wir

$$\exists z \in g_l(x) : \|z-y\|_\infty \leq \delta,\ \ l \in \mathcal{I}(y,0).$$

$\square$

Damit sei

$$\begin{aligned} \square G(x) := \quad & \{\xi \in \mathbb{R}^n : \exists (x_m^l) \subset M_0 \setminus \tilde{\Omega}_f \text{ mit } \lim_{m\to\infty} x_m^l = \eta_l \in \square g_l(x), \\ & \lim_{m\to\infty} \nabla f(x_m^l) = \xi, l \in \mathcal{I}(x,\varepsilon)\} \end{aligned} \tag{3.27}$$

und

$$\square G_{ko}(x) := \operatorname{conv}(\square G(x)) \tag{3.28}$$

Wir können die Ergebnisse aus Abschnitt 3.1.3 übertragen.

Satz 3.3.9 *Gilt $\#(I \cup J) < \infty$, so ist die mengenwertige Abbildung $x \mapsto \square G(x)$ abgeschlossen in N.*

Der Beweis läßt sich aufgrund der gerade in Lemma 3.3.8 gesehenen Eigenschaften von $\square g_l(x)$ Wort für Wort wie der zu Satz 3.1.15 führen, wobei lediglich $g_l(x)$ durch $\square g_l(x)$ und $G(x)$ durch $\square G(x)$ zu ersetzen sind.

Ebenso folgen die drei anschließenden Ergebnisse:

Lemma 3.3.10 *Ist $\#(I \cup J) < \infty$, so gilt: Für $(x_k) \subseteq N$ mit $\lim_{k\to\infty} x_k = x, (\xi_k) \subseteq \mathbb{R}^n$ mit $\lim_{k\to\infty} \xi_k = \xi$ und $\xi_k \in G(x_k)$ für alle k folgt $\xi \in \partial f(\eta_l)$ für ein $\eta_l \in \square g_l(x)$, $l \in \mathcal{I}(x,\varepsilon)$.*

Korollar 3.3.11 *Für $\#(I \cup J) < \infty$ und $x \in N$ ist die Menge $\square G(x)$ kompakt.*

Korollar 3.3.12 *Die mengenwertige Abbildung $x \mapsto \square G_{ko}(x)$ ist für den Fall $\#(I \cup J) < \infty$ abgeschlossen in N.*

Satz 3.3.13 *Ist $\#(I \cup J) \leq \infty$, so gilt: Für $(x_k) \subseteq N$ mit $\lim_{k\to\infty} x_k = x, (\xi_k) \subseteq \mathbb{R}^n$ mit $\lim_{k\to\infty} \xi_k = \xi$ und $\xi_k \in \square G(x_k)$ für alle k folgt, daß $\xi \in \partial f(y)$ für ein $y \in X^{\varepsilon+\delta}$ ist.*

BEWEIS: Wir übernehmen im Prinzip den Beweis von Satz 3.1.20. Der einzige Unterschied ergibt sich aus der Tatsache, daß das zu $\eta_{l_{k_\nu}}^{k_\nu}$ korrespondierende Element $z_{l_{k_\nu}} \in g_{l_{k_\nu}}(x_{k_\nu})$ für unendlich viele ν selbst bereits auf dem Rand der Box $X_{k_\nu}^{\varepsilon}$ liegen kann. Damit ist dann lediglich die Abschätzung

$$\|\eta_{l_{k_\nu}}^{k_\nu} - x_{k_\nu}\|_\infty \leq \delta + \varepsilon$$

oBdA für alle ν möglich, was dann auf die im Vergleich zu der in Satz 3.1.20 etwas schwächere Behauptung

$$\xi \in \partial f(y) \text{ für ein } y \in X^{\varepsilon+\delta}$$

führt. □

Hiermit ergibt sich automatisch

Korollar 3.3.14 *Unter den gleichen Vorausssetzungen wie im vorigen Satz mit* $\Box G_{ko}(x_k)$ *statt* $\Box G(x_k)$ *folgt* $\xi \in \partial_{\sqrt{n}(\varepsilon+\delta)} f(x)$.

Definiere an dieser Stelle

$$\Box G_k := \mathrm{cl}(\mathrm{conv}(\Box G(x_k))) = \mathrm{cl}(\Box G_{ko}(x_k)) \tag{3.29}$$

für beliebiges $x_k \in N$.

Wiederum ist für $\#(I \cup J) < \infty$ $G_{ko}(x) = \Box G_k$.

Satz 3.3.15 *Sei* $\#(I \cup J) = \infty$. *Dann gilt:*
Für $(x_k) \subseteq N$ *mit* $\lim_{k\to\infty} x_k = x, (\xi_k) \subseteq \mathbb{R}^n$ *mit* $\lim_{k\to\infty} \xi_k = \xi$ *und* $\xi_k \in \mathrm{cl}(\Box G(x_k)) \setminus \Box G(x_k)$ *für alle* k *folgt*

$$\forall \sigma > 0\, \exists y \in X^{\varepsilon+\delta}\, \exists g \in \partial f(y) : \|\xi - g\| < \sigma,$$

also

$$\xi \in \mathrm{cl}\left(\bigcup_{y \in X^{\varepsilon+\delta}} \partial f(y)\right).$$

BEWEIS: Wir übernehmen den Beweis von Satz 3.1.23 mit $g_k \in \Box G(x_k)$ für alle k. Nach Satz 3.3.13 ist $g \in \partial f(y)$ für ein $y \in X^{\varepsilon+\delta}$. □

Mit Korollar 3.3.14 folgt dementsprechend

Korollar 3.3.16 *Sei* $\#(I \cup J) = \infty$. *Dann gilt:*
Für $(x_k) \subseteq N$ *mit* $\lim_{k\to\infty} x_k = x, (\xi_k) \subseteq \mathbb{R}^n$ *mit* $\lim_{k\to\infty} \xi_k = \xi$ *und* $\xi_k \in \mathrm{cl}(\Box G_{ko}(x_k)) \setminus \Box G_{ko}(x_k)$ *für alle* k *folgt*

$$\forall \sigma > 0\, \exists g \in \partial_{\sqrt{n}(\varepsilon+\delta)} f(x) : \|\xi - g\| < \sigma.$$

3.3.2.2 Boxerweiterung des Unterproblems

(UP1) muß ebenfalls entsprechend erweitert werden. Dies geschieht in Analogie zu Abschnitt 3.1.4.

Wir passen die bisherige Forderung an F_k' an, so daß

$$F_k' \supseteq \partial f(X_k^{\varepsilon+\delta})$$

gelten möge. Dies ist im Prinzip nur eine Verschiebung der Konstanten. Es gilt damit $\square G_k \subseteq F_k'$ sowie $\square G_k \subseteq \partial_a f(x_k)$ mit

$$a := \sup_{l \in \mathcal{I}(x_k,\varepsilon)} \{\|\eta_l - x_k\| : \eta_l \in \square g_l(x_k)\}.$$

Für $a \leq \varepsilon$ verändert sich die Inklusionskette (3.14) zu

$$\square G_k \subseteq \partial_a f(x_k) \subseteq F_k'. \tag{3.30}$$

Die Voraussetzung $\#\mathcal{I}(x_k,\varepsilon) > 1$ bleibt weiterhin gültig.

Es ergibt sich die Problemstellung

$$\textbf{(UP2)} \quad \min_{d \in -F_k'} \max_{\xi \in \square G_k} \xi^t d.$$

Mit

$$\max_{\xi \in \square G_k} \xi^t d = \max_{\xi \in \mathrm{cl}(\square G(x_k))} \xi^t d$$

sowie

$$\min_{d \in -F_k'} f^\circ(x_k, d) \leq \min_{d \in -F_k'} \max_{\xi \in \mathrm{cl}(\square G(x_k))} \xi^t d$$

sei für eine Lösung d_k von (UP2) die **Abbruchbedingung** festgelegt als

$$\exists \xi \in \mathrm{cl}(\square G(x_k)) : \xi^t d_k \geq 0. \tag{3.31}$$

Der Satz zur Kennzeichnung der Abstiegseigenschaft der generierten Richtung bleibt erhalten. Sein Beweis ist direkt zu übertragen mit $\square G_k$ statt G_k. Gleiches gilt für das Korollar 3.1.27.

Satz 3.3.17 *Sei d_k Lösung von* (UP2) *zum Punkt x_k mit $\xi^t d_k < 0$ für alle $\xi \in \mathrm{cl}(\square G(x_k))$. Dann gilt mit $g_k := -\arg\min\{\|p\| : p \in \square G_k\}$*

$$\xi^t d_k \leq -\|g_k\|^2 \textit{ für alle } \xi \in \square G_k.$$

Bemerkung 3.3.18 *Falls die Abbruchbedingung nicht erfüllt ist, folgt wiederum insbesondere $\xi^t d_k < 0$ für alle $\xi \in \partial f(x_k)$.*

Korollar 3.3.19 $0 \in \square G_k \iff \exists \xi \in \mathrm{cl}(\square G(x_k)) : \xi^t d_k \geq 0.$

Es ergibt sich eine Art Mindestschrittweiteneigenschaft.

Lemma 3.3.20 *Gilt $0 \notin \square G_k$, so ist d_k als Lösung von* (UP2) *Abstiegsrichtung für alle $y \in U(x_k, \delta/2) \cap N$.*

BEWEIS: Betrachte ein beliebiges Element $y \in U(x_k, \delta/2) \cap N$. Hierzu korrespondiert ein Index $l \in (I \cup J)$ mit $l \in \mathcal{I}(y, 0)$, anhand dessen nun zwei Fälle unterschieden werden.

1. $l \in \mathcal{I}(x_k, 0)$:
   Demnach ist $g_l(x_k) = \{x_k\}$ und $y \in \square g_l(x_k) = (x_k + 0^\delta) \cap C_l$.

2. $l \notin \mathcal{I}(x_k, 0)$:
   Da $\delta < \varepsilon$ ist, existiert ein $\eta_l \in g_l(x_k)$ mit $\|\eta_l - x_k\| \leq \|y - x_k\|$. Es ist $\|y - \eta_l\| \leq 2\|y - x_k\| < \delta$, also $y \in \square g_l(x_k)$.

Insgesamt folgt

$$\partial f(y) \subset \square G_k,$$

das heißt

$$\xi^t d_k \leq -\|g_k\|^2 < 0 \text{ für alle } \xi \in \partial f(y)$$

mit g_k wie in Satz 3.3.17. $\square$

3.3.2.3 Konvergenz des erweiterten Verfahrens

Aufgrund der Konstruktionen und mit Lemma 3.3.20 bleibt hinsichtlich der Konvergenz kaum noch etwas zu zeigen. Der Beweis zu Satz 2.3.2 aus Kapitel 2, in dem ebenfalls eine Mindestschrittweite das Hauptargument bildete, kann übernommen werden, wenn man wie im Beweis zu Satz 3.3.4 ansetzt.

Satz 3.3.21 *Sei $(x_k) \subseteq N$ eine durch den nicht abbrechenden Algorithmus bestehend aus* (UP2) *und exakter Liniensuche generierte Folge. Dann ist die zugehörige Folge der (h_k) mit $h_k := \arg\min\{\|p\| : p \in \square G_k\}$ wie in Satz 3.3.17 konvergent mit*

$$\lim_{k\to\infty} h_k = 0. \tag{3.32}$$

Insbesondere gelten für einen Häufungspunkt x^* von (x_k)

1. *$\#(I \cup J) < \infty$: Es ist $0 \in \square G_{ko}(x^*)$.*
2. *$\#(I \cup J) \leq \infty$:*
   (a) *Für $\lim_{\nu\to\infty} h_{k_\nu} = 0$ mit $h_{k_\nu} \in \square G(x_{k_\nu})$ für alle ν folgt*
   $$0 \in \partial f(y) \text{ für ein } y \in (X^*)^{\varepsilon+\delta}.$$
   (b) *Für $\lim_{\nu\to\infty} h_{k_\nu} = 0$ mit $h_{k_\nu} \in \square G_{ko}(x_{k_\nu})$ für alle ν folgt*
   $$0 \in \partial_{\sqrt{n}(\varepsilon+\delta)} f(x^*).$$
3. *$\#(I \cup J) = \infty$:*
   (a) *Für $\lim_{\nu\to\infty} h_{k_\nu} = 0$ mit $h_{k_\nu} \in \mathrm{cl}(\square G(x_{k_\nu})) \setminus \square G(x_{k_\nu})$ für alle ν folgt*
   $$\forall \sigma > 0\, \exists y \in (X^*)^{\varepsilon+\delta}\, \exists g \in \partial f(y) : \|g\| < \sigma.$$
   (b) *Für $\lim_{\nu\to\infty} h_{k_\nu} = 0$ mit $h_{k_\nu} \in \mathrm{cl}(\square G_{ko}(x_{k_\nu})) \setminus \square G_{ko}(x_{k_\nu})$ für alle ν folgt*
   $$\forall \sigma > 0\, \exists g \in \partial_{\sqrt{n}(\varepsilon+\delta)} f(x^*) : \|g\| < \sigma.$$

Die differenzierten Aussagen dieses Satzes ergeben sich aus den Eigenschaften in Abschnitt 3.3.2.1.

3.4 Abschließende Bemerkungen

Das zuletzt aufgezeigte Verfahren, das mit den Boxerweiterungen der Konstruktionen arbeitet, kann durchaus auch nur als Restart-Ansatz eingesetzt werden. Das bedeutet, daß man regelmäßig – in jedem ν-ten Iterationsschritt – mit dieser Modifikation rechnet, ansonsten jedoch die einfachere Variante ohne Boxen anwendet. Der Rechenaufwand wird damit geringer gehalten, die Konvergenz jedoch gesichert. Viele Verfahren in der mathematischen Optimierung arbeiten in dieser Form.

Möglich wären weitere Untersuchungen bezüglich der Voraussetzungen an f, insbesondere verdeutlicht durch die Charakterisierung mit Hilfe der Einzelfunktionen. Denkbar ist die separate Behandlung konvexer oder stückweise konvexer Funktionen, die Betrachtung stückweiser C^m-Funktionen mit $m \geq 2$ und ähnliches. Das ist bisher noch nicht geschehen. In jedem Fall hilft diese Modellierung dabei, praktische Situationen auf den theoretischen Ansatz zu übertragen (vgl. bisherige Beispiele sowie Kapitel 6).

Hervorzuheben ist noch einmal die wesentlich konkretere Aussage des Abbruchkriteriums und damit auch des Konvergenzergebnisses im Vergleich zu dem Resultat, welches zu (UP0) korrespondiert. $0 \in G_{ko}(x^*)$, wie wir es im endlichen Fall für (UP1) gezeigt haben, bedeutet $0 \in \partial_{\sqrt{n}\varepsilon} f(x^*)$. Aus diesem Grund ist es immer sinnvoll, (UP1) im Anschluß an einen Abbruch des Algorithmus unter Verwendung von (UP0) zu lösen. Entweder findet man so einen neuen Iterationspunkt oder bestätigt den Abbruch mit obiger Aussage. Für die unexakte Liniensuche, die in der Anwendung benutzt wird, verweisen wir nochmals auf Kapitel 6.

Die in diesem Kapitel aufgezeigte Methode kann ebenso unabhängig von der mit (UP0) angewandt werden.

Vergleicht man den Ansatz mit der Idee der ε-Bündel-Verfahren, so ist folgendes festzustellen. Die Auswahl der Argumentpunkte für eine Subgradientenbestimmung erfolgt in der vorliegenden Arbeit gezielt und in jedem Iterationsschritt. Entscheidend ist dabei die Aufteilung in Wegkomponenten. Bündelverfahren erhalten zum einen neue Punkte und damit neue Subgradienten durch Nullschritte in der Liniensuche, wenn also kein hinreichend guter Abstieg erzielt wird, zum anderen wird dort eine gewisse Anzahl vorhergehender Iterationspunkte betrachtet. Durch die Einschränkung der Richtungssuche auf $-F_k'$ bewirken wir eine geeignete Vorauswahl.

Kapitel 4

Trust-Region-Ansatz

Trust-Region-Verfahren sind dadurch gekennzeichnet, daß sie die zu optimierende Funktion in einem Iterationspunkt x_k bzw. in $x_k + d$ mit der Suchrichtung d durch ein lokales Modell ersetzen und daß dieses Modell in jedem Schritt optimiert wird. Da das Modell nur lokal gut sein kann, wird die Norm von d beschränkt. Das bedeutet gerade, daß man sich innerhalb der Trust-Region bewegt. Typisches Merkmal des TR-Ansatzes ist es, daß mit der Optimierung des Modells gleichzeitig eine Schrittweite bestimmt ist und die Liniensuche als eindimensionales Unterproblem in der bisher bekannten Form als Anschlußschritt nach der Richtungssuche wegfällt.

Für eine Beschreibung der TR-Verfahren im Fall von C^1-Funktionen wird exemplarisch auf [5], [18] und [21] verwiesen, im nichtglatten Fall werden Grundideen in [65] beschrieben.

Es folgen eine kurze Einführung in diese Verfahrensklasse und die Feststellung, daß eine direkte Verknüpfung mit der entwickelten Methode auf der Basis des Unterproblems (UP1) nicht sinnvoll ist.

Unter Verwendung der Begriffe aus dem vorigen Kapitel wird dennoch ein Modell für die lokal Lipschitz stetige Zielfunktion bestimmt und mit Hilfe dessen ein weiteres Unterproblem zur Richtungssuche festgelegt, dem die Trust-Region-Idee zugrundeliegt. Auf diese Weise entsteht ein völlig neuer Ansatz. Die Überlegungen finden auf theoretischer Ebene statt und sollen eine erste Anregung für weitergehende Untersuchungen insbesondere in Bezug auf eine Realisierung sein.

4.1 Blick auf bestehende Verfahren

Die erste Kombination von ε-Bündel- und Trust-Region-Verfahren wurde 1989 von Helga Schramm [97] für konvexe Funktionen entwickelt. Sie ist auch in [98] nachzulesen. Seither sind viele Modifikationen und verwandte Verfahren entstanden, unter anderem auch für den nichtkonvexen Fall, bei dem die Zielfunktion lediglich lokal Lipschitz stetig ist, wie in [52].

Greifen wir auf [97] zurück. Betrachtet wird dort $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ konvex und das Modell der Funktion

$$f_{CP}(x) := \max_{1 \le i \le k} \{f(y_i) + g_i^t(x - y_i)\},$$

wobei $y_1, \dots, y_k$ gewisse Hilfspunkte aus bisherigen k Iterationen mit dazugehörigen $g_1, \dots, g_k \in \partial f(y_1), \dots, \partial f(y_k)$ sind. Dabei suggeriert bereits die Notation f_{CP}, daß dies ein *Cutting-Plane-Modell* ist. Es approximiert f stückweise linear von unten. Dies liest man aus der Charakterisierung des Subdifferentials durch die sogenannte *Subgradientenungleichung* im konvexen Fall ab (vergleiche [36]),

$$\partial f(x) = \{g \in \mathbb{R}^n : f(y) \ge f(x) + g^t(y - x) \text{ für alle } y \in \mathbb{R}^n\}.$$

Definiert man die Linearisierungsfehler α_i^k, die den Abstand der Linearisierung in y_i durch g_i zu f in x_k kennzeichnen, durch

$$\alpha_i^k := \alpha(x_k, y_i) := f(x_k) - f(y_i) - g_i^t(x_k - y_i),$$

so ist

$$f_{CP}(x) = \max_{1 \le i \le k} \{-\alpha_i^k + g_i^t(x - x_k)\} + f(x_k).$$

Es wird hiermit

$$\check{f}_k(d) := \max_{1 \le i \le k} \{-\alpha_i^k + g_i^t d\}$$

gesetzt. Damit ist $f_{CP}(x_k + d) = \check{f}_k(d) + f(x_k)$, also $\check{f}_k(d)$ eine stückweise lineare Approximation von $f(x_k + d) - f(x_k)$ von unten.

Aus diesem Ansatz leitet sich das TR-Modell ab. Schramm betrachtet das Unterproblem

$$\min_{d \in \mathbb{R}^n} \check{f}_k(d) + \frac{1}{2t_k} \|d\|^2$$

und integriert die TR-Idee, indem eine Variation von t_k stattfindet. Einzelheiten hierzu finden sich in der zitierten Originalarbeit.

Geht man bei dieser Vorgehensweise von konvexen auf lokal Lipschitz stetige Funktionen über, so ergeben sich Schwierigkeiten durch die Definition der Linearisierungsfehler. Deren Nichtnegativität muß nicht länger gültig sein; der Einfluß der Linearisierung, die über der Funktion liegt, ist aber unter Umständen bei der Lösung des Teilproblems sehr groß. Erschwerend kommt hinzu, daß die y_i ehemalige Iterationspunkte sein können, die einen recht großen Abstand zu x_k haben. Abhilfe hierfür schaffen sogenannte *Gewichte* β_i^k, die an die Stelle der α_i^k treten,

$$\beta_i^k := \beta(x_k, y_i) := \max_{1 \le i \le k} \{\alpha_i^k, c_0 = \|x_k - y_i\|^2\}$$

Der Index i läuft in der Praxis lediglich über einer geeigneten Teilmenge I_k von $\{1, \ldots, k\}$, da der Speicheraufwand schnell zu groß wird. In diesem Zusammenhang ist auch der Begriff der *Verwaltung des Bündels* bei ε-Bündel-Verfahren zu sehen.

Eine weitere Entwicklung dieses Ansatzes findet sich zum Beispiel in [52]. Dort betrachtet man mit Hilfspunkten y_i und Subgradienten g_i wie bisher das Modell

$$\check{f}_k(x) := \max_{i \in I_k} \{f(x_k) - |\alpha_i^k| + g_i^t(x - x_k)\}.$$

Die Linearisierungsfehler gehen hier also direkt absolut ein. Das Teilproblem, das gelöst werden muß, lautet dann

$$\min_{\|d\| \le \rho_k} \check{f}_k(x_k + d).$$

Die Trust-Region wird durch die Restriktion gekennzeichnet. Man kann zeigen, daß dieses Problem approximativ lösbar ist, indem d_k als

$$\arg\min_{d \in \mathbb{R}^n} \{\check{f}_k(x_k + d) + u_k \tfrac{\|d\|^2}{2}\} \tag{4.1}$$

bestimmt wird mit variierendem u_k bis $\|d_k\| \approx \rho_k$, vergleiche auch [50]. Es wird demnach durch die Variation von $u_k = u$ in (4.1) eine Levenberg-Marquardt Trajektorie induziert. Im wesentlichen bedeutet dies, daß die Erhöhung von u_k eine Abnahme von ρ_k bewirkt, siehe auch [98]. Für eine grundsätzliche Einführung in diese Begriffe empfehlen wir [15] und [18].

4.1.1 Trust-Region-Faktor

In [52] findet man genaue Überlegungen dazu, welche Bedingungen die Variation von ρ_k bzw. u_k zu erfüllen hat, um gute Ergebnisse zu erzielen. Da wir hier jedoch nicht die explizite Analyse des dortigen Verfahrens wiedergeben möchten, soll nur kurz die Heuristik verdeutlicht werden.

Das Steuerungsmittel für die Güte des lokalen Modells, welches im TR-Verfahren optimiert wird, ist der TR-Faktor, durch den $\|d\|$ beschränkt wird. Man vergleicht den Abstieg der Modellfunktion $\tilde{f}$ mit dem tatsächlichen und reagiert mit der Anpassung des Faktors. Liegt der Quotient

$$r := \frac{f(x_k) - f(x_k + d_k)}{\tilde{f}(x_k) - \tilde{f}(x_k + d_k)}$$

nahe bei 1, ist die Approximation durch das Modell sehr gut und der Faktor wird erhöht. Ansonsten wird er, wenn der Quotient positiv ist, beibehalten und für $r < 0$ verkleinert. Im letzten Fall ist offensichtlich auch noch kein neuer Iterationspunkt x_{k+1} gefunden.

Für TR-Methoden im nichtglatten Fall, wie in [51], [52], [97] beschrieben, gilt beispielsweise als Kriterium zur Reduzierung von ρ_k und Erhöhung von u_k eine Abfrage der Art

$$f(x_k + d_k) - f(x_k) > m v_k,$$

wobei $m \in (0, 1)$ gilt und $v_k = \check{f}_k(x_k + d_k) - f(x_k)$ ist, also den zu erwartenden Abstieg kennzeichnet, (vgl. [52]). Setzt man

$$q(t) = f(x_k + t d_k),$$

so kennt man $q(0), q(1)$, und die Unbekannte $q'(0)$ wird durch v_k approximiert. Im glatten Fall ist dies gerade $\nabla f(x_k)^t d_k$. Durch eine quadratische Interpolation

$$\Phi(t) = \Phi(0) + \Phi'(0) + \frac{1}{2}\Phi''(0)t^2$$

der Daten $\Phi(0) = q(0), \Phi(1) = q(1)$ und $\Phi'(0) = v_k$ gemäß Lemma 1.1.23 wird dann der neue Wert von ρ_k bestimmt. Man setzt für die globale Minimalstelle t_{opt} von Φ

$$\rho_{k+1} = t_{opt}\|d_k\| \text{ und } u_{k+1} = \Phi''(0)/\|d_k\|^2.$$

Dies entspricht der Anpassung des eindimensionalen Parameters in der Liniensuche, wie wir sie in Abschnitt 6.2 betrachten werden. Es gibt innerhalb der hier zitierten Literatur weitere Möglichkeiten, die wir nicht alle aufzählen möchten. Die Formeln können natürlich ebenso bei einem gutem Abstieg der Zielfunktion in umgekehrter Anwendung zur Erhöhung von ρ_k und Abnahme von u_k herangezogen werden.

Es gibt zwei weitere Techniken, die bei dem beschriebenen Ansatz eine Rolle spielen können. Die sogenannte Subgradientenzusammensetzung (*subgradient aggregation*) dient der Einsparung von Speicherplatz, siehe [49] oder [52]. Eine andere Möglichkeit, die an die Stelle des Weglassens *alter* Subgradienten tritt, besteht darin, die Subgradienten mit lokalen Gewichten zu versehen, um ihre Nähe zu $\partial f(x_k)$ zu kennzeichnen, siehe ebenfalls [49], [52].

In [52] wird die Durchführung einer Liniensuche in das dortige Verfahren eingebunden und als Alternative zur Anwendung der Levenberg-Marquardt-Trajektorie beibehalten, wenn der erzielte Abstieg noch nicht gut genug ist, x_k+d_k aber in der Trust-Region liegt. Einzelheiten kann man aus den dortigen Kriterien ablesen. Es ist durchaus möglich, daß der aus den Bündel-Verfahren bekannte Nullschritt auch in TR-Verfahren auftritt, wenn keine hinreichend guten Informationen vorhanden sind.

Bemerkung 4.1.1 *Beim Unterproblem* (UP1) *ist die TR-Idee nicht anwendbar. Dies folgt daraus, daß wir in* (UP1) *eine positiv homogene Funktion*

$$m(d) := \max_{\xi \in G_k} \xi^t d$$

über der kompakten Box $-F_k'$ minimieren. Der einzige naheliegende Ansatz wäre es, die Norm der Richtung zu beschränken, also $\|d\| \leq \rho_k$ zu verlangen. Dies kann zum Beispiel durch die Restriktion

$$d \in -\frac{\rho_k}{a_k} F_k'$$

mit $a_k := \max_{g \in F_k'} \|g\|$ realisiert werden. Das bedeutet in anderer Formulierung aber, daß wir das Unterproblem

$$\min_{d \in -F_k'} m(\frac{\rho_k}{a_k} d)$$

betrachten, was wegen der erwähnten positiven Homogenität von $m(\cdot)$ auf dieselbe Lösung führt, wie wir sie auch ohne die Trust-Region-Überlegung *durch die ursprüngliche Form von* (UP1) *erhalten. Eine Variation von* $\frac{\rho_k}{a_k}$ *entspricht einer Variation der Schrittweite innnerhalb der Liniensuche. Der Aufwand ändert sich nicht.*

Aufgrund dieser Beobachtung ist es notwendig, zunächst über ein geeignetes Modell für die Zielfunktion nachzudenken, das die Begriffe und Konstruktionen aus Kapitel 3 nutzt.

4.2 Modell der Zielfunktion

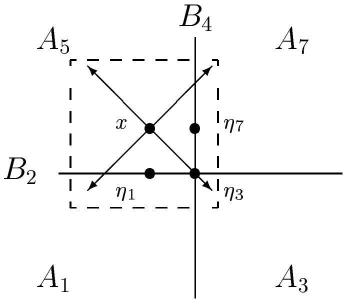
Die Überlegungen des vorigen Abschnitts legen nahe, sowohl G_k als auch $-F_k'$ zu verwenden, um ein Modell für f zu konstruieren. Insbesondere wird die Intervallidee dabei genutzt. Definiere eine Abbildung $P : N \times \mathbb{R}^n \times \mathbb{R} \to \wp(N)$ zur Auswahl der Argumentpunkte durch

$$\begin{aligned} P(x,d,\varepsilon) := \quad & \{\eta_l : \eta_l \in g_l(x), l \in \mathcal{I}(x,\varepsilon) \setminus \mathcal{I}(x,0), \\ & (\eta_l - x)^{(i)} d^{(i)} \geq 0, \|d\| \geq \|\eta_l - x\|\} \cup \{x\}. \end{aligned} \tag{4.2}$$

Damit sei $f_M : N \times \mathbb{R}^n \times \mathbb{R} \to \mathbb{I}(\mathbb{R})$ definiert durch

$$\begin{aligned} & f_M(x,d,\varepsilon) := \text{Box}\,\{A(x,d,\varepsilon)\} \text{ mit} \\ & A(x,d,\varepsilon) := \{f(\eta_l) + \xi_l^t(x + d - \eta_l) : \eta_l \in P(x,d,\varepsilon), \xi_l \in \partial f(\eta_l)\}. \end{aligned} \tag{4.3}$$

Box$\{A\}$ mit $A \subseteq \mathbb{R}$ steht für das kleinste kompakte Intervall, das A enthält. $P(x,d,\varepsilon)$ soll gewährleisten, daß tatsächlich nur solche Argumentpunkte bei der Modellbildung berücksichtigt werden, die in Richtung von d liegen; insbesondere also nicht die, die sich in Richtung des vorhergehenden Iterationspunktes befinden (vgl. voriger Abschnitt). Für Nullkomponenten ist die Auswahl nicht ganz so eingeschränkt. Die Bedingung $(\eta_l - x)^{(i)} d^{(i)} \geq 0$ setzt diese Ideen um, denn sie bedeutet nichts anderes, als daß die Vorzeichen der Komponenten von $\eta_l - x$ und d für den Fall $(\eta_l - x)^{(i)} \neq 0$ und $d^{(i)} \neq 0$ gleich sind. Wir realisieren auf diese Weise etwas, was der im vorigen Abschnitt erwähnten Idee der lokalen Gewichtung der Subgradienten ähnlich ist. Wir betrachten noch einmal eine bekannte Skizze und übertragen die Idee hierauf.



Man erkennt $P(x,(1,1)^t,\varepsilon)=\{x,\eta_7\}$, $P(x,(-1,-1)^t,\varepsilon)=\{x,\eta_1\}$, $P(x,(-1,1)^t,\varepsilon)=\{x\}$ und $P(x,(1,-1)^t,\varepsilon)=\{x,\eta_1,\eta_3,\eta_7\}$.

Wir gehen im weiteren von der **Annahme** aus:

$$\inf_{\substack{l\in\mathcal{I}(x,\varepsilon)\setminus\mathcal{I}(x,0)\\ \eta_l\in g_l(x)}} \|\eta_l - x\| > 0. \tag{4.4}$$

Bemerkung 4.2.1 *Das Modell ist eine intervallwertige Inklusionsfunktion für die Linearisierungen in den Punkten $\eta_l \in g_l(x)$ durch die entsprechende Subdifferentiale $\partial f(\eta_l)$. Die Beschränktheit von $G(N)$ rechtfertigt die Definition, wobei wir an dieser Stelle keine Aussage über Konstruktionsmöglichkeiten machen.*

Wir stellen offensichtliche Eigenschaften der soeben definierten Funktionen zusammen.

Lemma 4.2.2 *Seien $x \in N$, $d \in \mathbb{R}^n$ und $\varepsilon > 0$.*

1. $P(x,0,\varepsilon) = P(x,d,0) = \{x\}$
2. $P(x,\lambda d,\varepsilon) \subseteq P(x,d,\varepsilon)$ *für alle* $0 < \lambda \le 1$
3. $f_M(x,0,\varepsilon) = \{f(x)\}$
4. $f_M(x,d,0) \subseteq f_M(x,d,\varepsilon)$
5. $\mathrm{ub} f_M(x,d,0) \le \mathrm{ub} f_M(x,d,\varepsilon)$

Satz 4.2.3 *Gilt $\#(I\cup J) < \infty$, so sind $P(\cdot,\cdot,\varepsilon)$ und $f_M(\cdot,\cdot,\varepsilon)$ abgeschlossen als Abbildungen in x bzw. d.*

Bemerkung 4.2.4 *Dieser Satz ist auch als lokale Version unter der Voraussetzung $\#\mathcal{I}(y,\varepsilon) < \infty$ für alle y aus einer Umgebung von x beweisbar (vgl. Korollar 3.1.16 und die anschließende Bemerkung in Kapitel 3).*

BEWEIS des Satzes:

1. $P(x,d,\varepsilon)$ ist abgeschlossen in d:
   Sei zunächst $d \neq 0$. Seien x, ε fest und $d_m \to d$, $z_m \to z$ mit $z_m \in P(x,d_m,\varepsilon)$ für alle m gegeben. Es gilt für jedes Folgenglied entweder $z_m = \eta^m_{l_m}$ mit

   $$l_m \in \mathcal{I}(x,\varepsilon) \setminus \mathcal{I}(x,0),\ \|d_m\| \geq \|\eta^m_{l_m} - x\| \text{ und } (\eta^m_{l_m} - x)^{(i)} d_m^{(i)} \geq 0$$

   für alle $1 \leq i \leq n$ oder $z_m = x$. Gilt der zweite Fall für eine unendliche Teilfolge, so ist nichts weiter zu zeigen, da dann auch $z = x$ ist. Im ersten Fall ziehen wir die Endlichkeitsvoraussetzung heran, um auf eine Teilfolge $\{z_{m_\nu}\}$ einzuschränken mit $l_{m_\nu} = l$ für alle ν, also $z_{m_\nu} = \eta_l^{m_\nu} \neq x$ für alle ν. Mit Lemma 3.1.11 gilt $z \in g_l(x)$.
   Die Ungleichung $(\eta_l^{m_\nu} - x)^{(i)} d_{m_\nu}^{(i)} \geq 0$ bleibt für $\nu \to \infty$ ebenso gültig wie die Normbedingung. Es folgt $z \in P(x,d,\varepsilon)$.

   Ist $d = 0$, wird ab einem gewissen Index m_0 die Normbedingung verletzt, so daß man im Fall $z_m = x$ für alle $m \geq m_0$ landet.

2. $P(x,d,\varepsilon)$ ist abgeschlossen in x:
   Der Beweis hierzu verläuft analog. Das Argument der Abgeschlossenheit von $\mathcal{I}(x,\varepsilon)$ kommt hinzu.

3. $f_M(x,d,\varepsilon)$ abgeschlossen in d:
   Da $f_M(x,d,\varepsilon)$ als kleinstes einschließendes Intervall in $\mathbb{R}$ die konvexe Hülle von $A(x,d,\varepsilon)$ ist, müssen wir lediglich die Abgeschlossenheit der Abbildung $A(x,\cdot,\varepsilon)$ nachweisen. Betrachten wir also Folgen $d_m \to d$, $a_m \to a$ mit $a_m \in A(x,d_m,\varepsilon)$ für alle m. Jedes a_m hat die Form

   $$f(\eta^m_{l_m}) + \xi^{m^t}_{l_m}(x + d_m - \eta^m_{l_m}).$$

   Mit der Endlichkeitsvoraussetzung existieren entsprechende Teilfolgen mit $l_{m_\nu} = l$ für alle ν. OBdA mögen für $\nu \to \infty$ auch direkt die Konvergenzen

   $$\eta_l^{m_\nu} \to \eta_l \qquad \text{und} \qquad \xi_l^{m_\nu} \to \xi_l$$

gelten. Damit erhalten wir die Identifikation

$$a = f(\eta_l) + \xi_l^t(x + d - \eta_l).$$

Mit den Abgeschlossenheiten von $x \mapsto \partial f(x)$ und $d \mapsto P(x, d, \varepsilon)$ gilt

$$\xi_l \in \partial f(\eta_l) \quad \text{und} \quad \eta_l \in P(x, d, \varepsilon)$$

und somit $a \in A(x, d, \varepsilon)$.

4. $f_M(x, d, \varepsilon)$ abgeschlossen in x:
Der analoge Beweis benutzt das Ergebnis aus Punkt 2 und zusätzlich wie dort die Abgeschlossenheit der Indexabbildung.

□

Lemma 4.2.5 *Ist $\#(I \cup J) \leq \infty$, so gilt für Folgen $d_m \to d$ und $x_m \to x$*

$$\bigcap_{m \in \mathbb{N}} P(x, d_m, \varepsilon) \subseteq P(x, d, \varepsilon) \text{ und } \bigcap_{m \in \mathbb{N}} P(x_m, d, \varepsilon) \subseteq P(x, d, \varepsilon).$$

BEWEIS: Der Beweis erfordert keine besonderen Argumente. Man sieht für den ersten Teil direkt, daß die geforderten Bedingungen im Grenzübergang gelten. Für den zweiten Teil wird die Abgeschlossenheit von $x \mapsto g_l(x)$ benötigt. □

Im allgemeinen muß jedoch keine Gleichheit gelten.

Beispiel 4.2.6

1. Sei $x := (0, 0), d_m := (1/m, 1)^t \to (0, 1)^t =: d, \varepsilon := 1$ und $C_1 := \{\eta_1\} = \{(-1/2, 1/2)\}$. η_1 ist also ein isolierter Punkt aus Ω_f und damit $g_1(x) = \{\eta_1\}$. Dann ist

$$\eta_1^{(1)} d^{(1)} = 0, \quad \eta_1^{(2)} d^{(2)} = 1/2,$$

und

$$\|d\| = 1 > \|\eta_1 - x\| = 1/\sqrt{2},$$

also $\eta_1 \in P(x, d, \varepsilon)$. Andererseits liegt aber η_1 nicht in $P(x, d_m, \varepsilon)$, da

$$\eta_1^{(1)} d^{(1)} = -1/(2m)$$

ist für alle m.

2. Analog rechnet man nach, daß mit $x_m := (1/m, 1/m) \to (0, 0) =: x$, $\varepsilon := 1, d := (1, 0)$ und $C_1 := \{\eta_1\} = \{(0, 1)\}$ ein Gegenbeispiel für den zweiten Fall gegeben ist.

4.3 Richtungssuche

Das aufgestellte Modell soll nun mit den zur Verfügung stehenden Informationen zur Berechnung einer geeigneten Suchrichtung verwendet werden. Wir betrachten zunächst

$$\textbf{(UP3)}\ \min_{d\in -F'_k} \mathrm{ub} f_M(x_k, d, \varepsilon).$$

Mit Lemma 4.2.2 gilt:

Korollar 4.3.1 *Für eine Lösung d_k von* (UP3) *ist* $\mathrm{ub} f_M(x_k, d_k, 0) \le \mathrm{ub} f_M(x_k, d_k, \varepsilon)$*. Für $0 \in F'_k$ gilt zudem* $\mathrm{ub} f_M(x_k, d_k, \varepsilon) \le \mathrm{ub} f_M(x_k, 0, \varepsilon) = f(x_k)$*.*

Als **Abbruchbedingung** für den Algorithmus mit (UP3) und exakter Liniensuche legen wir fest

$$\mathrm{ub} f_M(x_k, d_k, \varepsilon) \ge f(x_k). \tag{4.5}$$

Für $0 \in F'_k$ folgt in diesem Fall, daß 0 eine Lösung von (UP3) ist.

Lemma 4.3.2 *Ist d_k eine Lösung von* (UP3)*, die nicht zum Abbruch führt, so ist diese Richtung Abstiegsrichtung für f in x_k.*

BEWEIS: Ist die Abbruchbedingung nicht erfüllt, gilt mit vorigem Korollar

$$\mathrm{ub} f_M(x_k, d_k, 0) \le \mathrm{ub} f_M(x_k, d_k, \varepsilon) < f(x_k).$$

Dies bedeutet mit $P(x_k, d_k, 0) = \{x_k\}$ gerade

$$\mathrm{ub}\,\mathrm{Box}\{f(x_k) + \xi^t d_k : \xi \in \partial f(x_k)\} < f(x_k),$$

also $\xi^t d_k < 0$ für alle $\xi \in \partial f(x_k)$. $\square$.

Satz 4.3.3 *Es gelte $0 \notin G_k$. Dann existiert ein $\tau_k > 0$, so daß in $-\tau_k F'_k$ eine Richtung d liegt mit* $\mathrm{ub} f_M(x_k, d, \varepsilon) < f(x_k)$*.*

BEWEIS: Setze $g_k := -\arg\min\{\|p\| : p \in G_k\}$. Mit der Normbedingung in der Definition der Auswahlabbildung P und der Annahme (4.4) gilt

$$\exists 0 < \tau_k \leq 1 : \; P(x_k, \tau_k g_k, \varepsilon) = \{x_k\}.$$

$d := \tau_k g_k$ liegt in $-\tau_k F_k'$, da $G_k \subseteq F_k'$. Wir schätzen mit Lemma 1.1.19 ab

$$\begin{aligned} \mathrm{ub} f_M(x_k, d, \varepsilon) &= \mathrm{ub} f_M(x_k, \tau_k g_k, \varepsilon) \\ &= \mathrm{ub}\,\mathrm{Box}\{f(\eta_l) + \xi_l^t(x_k - \eta_l) + \xi_l^t \tau_k g_k : \\ &\qquad \eta_l \in P(x_k, \tau_k g_k, \varepsilon), \xi_l \in \partial f(\eta_l)\} \\ &= \mathrm{ub}\,\mathrm{Box}\{f(x_k) + \tau_k \xi^t g_k : \xi \in \partial f(x_k)\} \qquad (4.6) \\ &\leq \mathrm{ub}\,\mathrm{Box}\{f(x_k) - \tau_k \|g_k\|^2\} \\ &= f(x_k) - \tau_k \|g_k\|^2 \\ &< f(x_k). \end{aligned}$$

□

Die Existenz einer geeigneten Richtung kann demnach unter diesen Voraussetzungen gezeigt werden.

Bemerkung 4.3.4 *Für* $0 \in -F_k'$ *gilt* $-\tau g_k \in -F_k'$ *für alle* $\tau > 0$, *und wir erhalten die modifizierte Aussage, daß eine Richtung in* $-F_k'$ *existiert, mit der das Verfahren fortgesetzt werden kann. Lösen wir* (UP3) *im Anschluß an einen Abbruch des Algorithmus unter Verwendung von* (UP0), *liegt diese Situation vor.*

Korollar 4.3.5 *Ist* f *konvex, gilt direkt* $\mathrm{ub} f_M(x_k, g_k, \varepsilon) \leq f(x_k) - \|g_k\|^2$.

BEWEIS: Wie im ersten Abschnitt dieses Kapitels erwähnt, wird im konvexen Fall ein Element aus dem Subdifferential durch die Subgradientenungleichung gekennzeichnet,

$$\xi \in \partial f(y) \iff f(x) \geq f(y) + \xi^t(x - y) \text{ für alle } x \in \mathbb{R}^n.$$

Dies liefert hier

$$\forall \eta_l \in P(x_k, g_k, \varepsilon) : f(\eta_l) + \xi_l^t(x_k - \eta_l) + \xi_l^t g_k \leq f(x_k) - \|g_k\|^2.$$

□

Bemerkung 4.3.6 *Satz 4.3.3 kann auch mit der Voraussetzung* $0 \notin \partial f(x_k)$ *bewiesen werden, wenn man* $g_k := -\arg\min\{\|p\| : p \in \partial f(x_k)\}$ *festlegt.*

Mittels der bisherigen Argumentationen kann man den folgenden Satz zur wichtigen Charakterisierung der Abbruchbedingung anfügen.

Satz 4.3.7 *Zu einem beliebigen Punkt x_k gibt es ein $\tau_k > 0$ derart, daß die Abbruchbedingung* (4.5) *bezüglich einer Lösung d_k von*

$$\min_{d \in -\tau_k F'_k} \mathrm{ub} f_M(x_k, d, \varepsilon)$$

gleichwertig damit ist, daß $0 \in \partial f(x_k)$ ist.

BEWEIS: Gilt $0 \in \partial f(x_k)$, so ist $f(x_k) \in f_M(x_k, d, \varepsilon)$ für alle $d \in \mathbb{R}^n$ und damit die eine Richtung klar. Die andere Implikation wird mit dem gleichen indirekten Beweis wie dem zu Satz 4.3.3 gezeigt unter der Annahme $0 \notin \partial f(x_k)$, mit der entsprechenden Wahl von $g_k := -\arg\min\{\|p\| : p \in \partial f(x_k)\}$ und dem dazugehörigen τ_k. $\square$

Aufgrund der Beobachtungen und mit dem Ziel der Einbindung eines Trust-Region-Ansatzes modifizieren wir nun (UP3) mit $\tau_k > 0$ zu

$$\textbf{(UP TR)} \quad \min_{d \in -\tau_k F'_k} \mathrm{ub} f_M(x_k, d, \varepsilon).$$

Eine äquivalente Formulierung dieses Problems ist durch

$$\min_{d \in -F'_k} \mathrm{ub} f_M(x_k, \tau_k d, \varepsilon)$$

gegeben.

Satz 4.3.8 *Sei $g_k := -\arg\min\{\|p\| : p \in \partial f(x_k)\} \neq 0$ und $\tau_k > 0$ so gewählt, daß $P(x_k, \tau_k g_k, \varepsilon) = \{x_k\}$ gilt. Ist $\tau_k d_k$ eine diesbezügliche Lösung von* (UP TR) *mit $d_k \in -F'_k$, so gilt für alle $\xi \in \partial f(x_k) : \xi^t d_k \leq -\|g_k\|^2$.*

BEWEIS: Wir beweisen die Aussage durch Widerspruch. Es gelte die Annahme

$$\exists \bar{\xi} \in \partial f(x_k) : \bar{\xi}^t d_k > -\|g_k\|^2.$$

Mit (4.6) und Bemerkung 4.3.6 gilt

$$\mathrm{ub} f_M(x_k, \tau_k d_k, \varepsilon) \leq \mathrm{ub} f_M(x_k, \tau_k g_k, \varepsilon) \leq f(x_k) - \tau_k \|g_k\|^2.$$

Andererseits ist mit $x_k \in P(x_k, \tau_k d_k, \varepsilon)$

$$\begin{aligned} \mathrm{ub} f_M(x_k, \tau_k d_k, \varepsilon) &\geq \mathrm{ub}\,\mathrm{Box}\{f(x_k) + \tau_k \xi^t d_k : \xi \in \partial f(x_k)\} \\ &\geq f(x_k) + \tau_k \bar{\xi}^t d_k > f(x_k) - \tau_k \|g_k\|^2. \end{aligned}$$

□

Bemerkung 4.3.9 *Man kann aus dem Beweis mit der dortigen Wahl von* τ_k *und* g_k *die einfache Abschätzung*

$$\mathrm{ub} f_M(x_k, \tau_k d_k, \varepsilon) \leq f(x_k) - \tau_k \|g_k\|^2$$

ablesen.

4.4 Resumé

Wir haben also ein sinnvolles Modell für die Zielfunktion und ein dazugehöriges Unterproblem mit geeigneter Abbruchbedingung aufgestellt. Interessant ist die Art des Modells schon allein deshalb, weil sich in Abhängigkeit von der betrachteten Richtung d die Auswahl $P(x_k, d, \varepsilon)$ ändert und damit auch die gesamte Bildung des Intervalls $f_M(x_k, d, \varepsilon)$. Für $0 \in -F_k'$ kann eine Randbetrachtung dieser Box ausreichen, bei der dann τ_k eine geeignete Beschränkung von $\|d\|$ bewirkt.

Ist $\|d_k\|$ hinreichend klein, so daß $x_k + d_k$ in der Iterationsbox liegt und wird zudem auch $\eta_l \in g_l(x_k)$ mit $x_k + d_k \in C_l$ bei der Bildung von $f_M(x_k, d_k, \varepsilon)$ berücksichtigt, kann eine gewisse Güte des Modells angenommen werden. Dies gilt insbesondere für den Fall geeigneter stückweiser C^1-Eigenschaften (wie wir sie bereits früher betrachtet haben).

Ein Konvergenzresultat der Form, wie wir es für die Verwendung von (UP1) bzw. (UP2) gezeigt haben, konnten wir hier wegen der Hinzunahme der Funktionsauswertungen $f(\eta_l)$ nicht beweisen. Wir schlagen einen Restart mittels dieser gerade zitierten Unterprobleme vor. Sicherlich sind andere theoretische Resultate erzielbar. Die bisherigen Ergebnisse bilden einen ersten Anfang.

Die Schwierigkeiten des Ansatzes stecken in einer etwaigen Realisierung. Wir werden in Kapitel 6 kurz darauf zurückkommen. Weiterhin wäre über Trust-Region-typische Merkmale wie die Levenberg-Marquardt-Trajektorie nachzudenken.

An dieser Stelle sei noch einmal betont, daß die in diesem Kapitel entwickelte Vorgehensweise zu einem weiteren neuen Ansatz führt, der zu den bisherigen nur über die Konstruktionselemente in Beziehung steht.

Kapitel 5

Konstruktion der Subgradientenbox F_k'

Wir beschäftigen uns in diesem Kapitel mit der Frage nach Möglichkeiten, die Subgradientenbox F_k' mittels intervallarithmetischer Auswertungen zu konstruieren, so daß die grundlegende **Forderung** (2.2)

$$F_k' \supseteq \bigcup_{u \in X_k^\varepsilon} \partial f(u) \tag{5.1}$$

erfüllt ist. Hiermit verknüpft ist der Wunsch, diese Einschließung möglichst gut zu wählen, das heißt die Überschätzung der Vereinigung der Subdifferentiale durch F_k' gering zu halten. Durch die Boxeigenschaft von F_k' approximiert man von vornherein die konvexe Hülle der genannten Menge.

Wir gehen von nun an davon aus, daß sogenannte *programmierbare* Funktionen vorliegen. Die Funktionsvorschrift einer programmierbaren Funktion ist im wesentlichen algorithmisch durch endlich viele Operationen aus einer Klasse von Basisfunktionen (i. a. die arithmetischen Operationen und die in nicht rekursiven Programmiersprachen gebräuchlichen Standardfunktionen) beschreibbar. Diese Vereinbarung des Begriffes einer programmierbaren Funktion stimmt mit Ausnahme der Spezifikation der Programmiersprache mit dem der faktorisierbaren Funktion nach McCormick [71] überein.

Wir wenden uns dem Ansatz zu, der unserer Implementierung des Verfahrens zugrundeliegt. Im zitierten gemeinsamen Artikel mit H. Ratschek [22] wird das Vorgehen anhand von Beispielen beschrieben.

5.1 Vorgehensweise bei Einzelfunktionen

Die naheliegendste Umsetzung der Idee basiert auf den C^1-Einzelfunktionen, wie sie in Abschnitt 3.3.1 vorgestellt wurden. Da die praktische Umsetzung direkt mit dem theoretischen Ansatz verbunden ist, seien die Indexmengen I und J endlich. Wir gehen auf der Grundlage der bisherigen Formulierung nach folgender Methode vor:

Seien $A_i \subseteq N \subseteq \mathbb{R}^n$ abgeschlossen und die f_i mit $f|_{A_i} \equiv f_i$ zur Darstellung von f in N C^1-Einzelfunktionen in A_i^ι mit ι gemäß Abschnitt 3.3.1. Aufgrund der Endlichkeit der Indexmengen finden wir ein gemeinsames $\varepsilon > 0$, so daß jede Einzelfunktion f_i auch in

$$A_i^\varepsilon := \{y : y \in Z^\varepsilon, z \in A_i\}$$

stetig differenzierbar und Lipschitz stetig ist.

$F_i : \mathbb{I}(A_i^\varepsilon) \to \mathbb{I}(\mathbb{R})$ und $\nabla F_i : \mathbb{I}(A_i^\varepsilon) \to \mathbb{I}(\mathbb{R}^n)$ seien Inklusionsfunktionen für die f_i und deren Gradienten ∇f_i. Sei zu $x \in N$ fest $j \in I$ der Index mit $f_j(x) = f(x)$. Dann berechnet man die Box

$$F'(X^\varepsilon) \supseteq \bigcup_{u \in X^\varepsilon} \partial f(u)$$

der Gradienten bezüglich X^ε mit der Initialisierung $F'(X^\varepsilon) := \nabla F_j(X^\varepsilon)$ durch folgende Schleife:

Für alle $i \in I$ mit $i \neq j$ bilde $A_i \cap X^\varepsilon$.
Falls $A_i \cap X^\varepsilon \neq \emptyset$,
setze $F'(X^\varepsilon) = F'(X^\varepsilon) \vee \nabla F_i(X^\varepsilon)$.

Für jede Einzelfunktion prüft man, ob sie in X^ε aktiv ist, das heißt ob es Punkte in X^ε gibt, in denen diese Einzelfunktion den Wert von f bestimmt. Getestet wird also, ob die Indexmenge $\mathcal{I}_\mathcal{A}(x, \varepsilon) \neq \emptyset$ ist. Ist dies der Fall, fügt man die Auswertung ihres Gradienten in X^ε zur Gesamtsubgradientenbox hinzu. Durch die Berechnung der Gradienten für die ganze Box X^ε, die nach Festlegung von A_i^ε möglich ist, nimmt man offensichtlich zu viel hinzu. Aufgrund der C^1-Eigenschaft und mit hinreichend kleinem ε führt dies jedoch zu keinem gravierenden Fehler. Man stellt in jedem Fall die Erfüllung der Forderung (5.1) sicher. Verbesserungen können zum Beispiel durch eine geeignete Aufteilung von $A_i \cap X^\varepsilon$ erreicht werden. Auf detailliertere Betrachtungen hierzu verzichten wir.

Bemerkung 5.1.1 *Auf welche Art die benötigten Inklusionsfunktionen für die f_i und ∇f_i generiert wurden, lassen wir offen. Oftmals kann die im ersten Kapitel definierte natürliche Intervallerweiterung genommen werden. Je nach Beschaffenheit der Funktionen und in Abhängigkeit von verfügbarer Ableitungsinformation sind aber auch gezielte Verfahren zur Verbesserung der Einschließungen anwendbar (sogenannte zentrierte Formen, Mittelwert- oder Taylorformen), deren Beschreibung beispielsweise in* [86] *zu finden ist. Die Einzelheiten hierzu sind nicht das Thema unserer Ausführungen.*

Wir demonstrieren die Vorgehensweise an den beiden Beispielen 1.2.3, wobei wir auf eine Festlegung von N verzichten.

Beispiele 5.1.2

1. $f_1(x) = x \sin x, f_2(x) = x \cos x$ und

$$f(x) = \begin{cases} f_1(x), & \text{falls } x \geq 0 \\ f_2(x), & \text{falls } x \leq 0 \end{cases} .$$

Es ist

$$f'(x) = \begin{cases} f'_1(x), & \text{falls } x > 0 \\ f'_2(x), & \text{falls } x < 0 \end{cases}$$

und $\partial f(0) = [0,1] = f'_1(0) \vee f'_2(0)$. Damit erhalten wir

$$F'(X) = \begin{cases} \sin X + X \cos X, & \text{falls } X > 0 \\ \cos X - X \sin X, & \text{falls } X < 0 \\ (\sin X_1 + X_1 \cos X_1) \vee (\cos X_2 - X_2 \sin X_2), & \text{falls } 0 \in X \end{cases}$$

mit $X = X_1 \cup X_2$ für $X_1 \geq 0, X_2 \leq 0$.

2. $f_1(x) = x - y, f_2(x) = (x-y)^2$ und

$$f(x) = \begin{cases} f_1(x), & \text{falls } x + y \geq 1 \\ f_2(x), & \text{falls } x + y < 1 \end{cases} .$$

Nach Betrachtung der (Sub-)Gradienten hierzu liest man ab

$$F'(X) = \begin{cases} (1,-1)^t, & \text{falls } X + Y > 1 \\ 2(X - Y, -X + Y)^t, & \text{falls } X + Y < 1 \\ (1,-1)^t \vee 2(X - Y, -X + Y)^t, & \text{falls } 1 \in X + Y \end{cases} .$$

Die Bedingung, durch die die Wahl der f_i gesteuert wird, ist an diesen beiden Funktionen leicht ablesbar, und damit ist auch obige Schleife zur Konstruktion von $F'(X^\varepsilon)$ gut berechenbar. Oftmals ist dies jedoch nicht der Fall, wie zum Beispiel bei Funktionen der schon angesprochenen Form

$$f(x) = \max\{f_i(x) : i \in I\}.$$

Hier und auch in vielen anderen Situationen wird die Bedingung

$$A_i \cap X^\varepsilon \neq \emptyset,$$

die das Hinzunehmen der entsprechenden (Sub-)Gradienten steuert, durch die Abfrage

$$F_i(X^\varepsilon) \cap F_j(X^\varepsilon) \neq \emptyset$$

ersetzt. Die Stetigkeit der Zielfunktionen rechtfertigt diesen Ansatz.

5.2 Slope Arithmetik

In der Literatur zu Optimierungsverfahren mittels intervallarithmetischer Methoden stößt man im Zusammenhang mit nichtglatten Problemen häufig auf den Begriff der sogenannten *Slopes* bzw. *Intervallslopes* und deren Verwendung zur Konstruktion geeigneter Inklusionsfunktionen für die Anwendung globaler Verfahren. Slopes treten an die Stelle der Ableitung bzw. deren Inklusion und sind unabhängig von Differenzierbarkeitsvoraussetzungen konstruierbar. Diese Technik soll kurz vorgestellt und eine erste Verbindung zu unseren Ansätzen geknüpft werden. Motiviert ist dieses Vorgehen durch den Wunsch, eine Alternative für die Bildung von F_k' zu erhalten. Wir stützen uns hierbei im wesentlichen auf [48], [92] und [93]. Bei Herrn Ratz bedanken wir uns dafür, daß uns die Preprints zur Verfügung gestellt wurden. Wir haben uns an seine Bezeichnungen gehalten. Der Begriff der Slopes wurde schon früher durch Krawczyk und Neumaier in [60] und [81] eingeführt.

Definition 5.2.1 *Eine Funktion $s_f : D \times D \to \mathbb{R}^n$ mit der Eigenschaft*

$$f(x) = f(c) + s_f(c, x) \cdot (x - c)$$

heißt slope *von $f : D \subseteq \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ (zwischen c und x). Die Menge*

$$s_f(c, X) := \{s_f(c, x) : x \in X, x \neq c\}$$

heißt Intervallslope *von f über dem Intervall X.*

Bemerkung 5.2.2 *Diese Definition erfordert keinerlei Differenzierbarkeit von* f*. Im eindimensionalen Fall,* $D \subseteq \mathbb{R}$*, setzt man mit* $\tilde{s} \in \mathbb{R}$ *beliebig*

$$s_f(c,x) = \begin{cases} \frac{f(x)-f(c)}{x-c}, & \text{falls } x \neq c \\ \tilde{s}, & \text{falls } x = c \end{cases}$$

Ist f *differenzierbar und* s_f *stetig, kann man* $\tilde{s} := f'(c)$ *definieren. Obige Definition beinhaltet, daß mit der Bezeichnung* $s_f(c,X)$ *stets die kleinste Menge gemeint ist, die der definierenden Eigenschaft genügt.*

In [60] wurde gezeigt, daß für einen Intervallvektor S mit

$$f(x) = f(c) + s \cdot (x - c) \text{ für ein } s \in S$$

durch $F(X) := f(c) + S \cdot (X - c)$ eine Inklusionsfunktion für f über X mit $\diamond f(X) \subseteq F(X)$ definiert ist. Offensichtlich genügt $s_f(c,X)$ dieser Bedingung. Die Verwendung von Slopes in diesem Sinne führt in vielen Fällen zu besseren Einschließungen als die Hinzunahme von Ableitungsinformation, falls diese vorhanden ist. Das Resultat

$$\lim_{w(X)\to 0} \frac{w(\diamond f'(X))}{w(s_f(c,x))} = 2$$

aus [48] für $f : D \subseteq \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ und $c \in X \subseteq D$ soll dies belegen. Wir merken an, daß im dortigen Beweis die zweimalige Differenzierbarkeit der Funktion benutzt wird, ohne in den Voraussetzungen gefordert zu sein.

Garantierte Einschließungen für die Slopes sind durch die sogenannte *Slope Arithmetik*, wie wir sie in [48] oder [93] finden, automatisch berechenbar. Der Prozeß dieser Kalkulationen ist dem der automatischen Differentiation sehr ähnlich, vergleiche beispielsweise [27]. Um eine grobe Vorstellung dessen zu haben, was hinter dieser Idee steckt, stellen wir die Grundlagen kurz vor. Slope Arithmetik arbeitet mit geordneten Tripeln der folgenden Form.

Definition 5.2.3 *Das Tripel* $\mathcal{U} = (U_x, U_c, U_s)$ *mit* $U_x, U_c \in \mathbb{I}(\mathbb{R})$ *und* $U_s \in \mathbb{I}(\mathbb{R}^n)$ *heißt* Slope Tripel *für eine Funktion* $f : D \subseteq \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$*, einen Intervallvektor* $X \in \mathbb{I}(\mathbb{R}^n), (X \subseteq D)$*, und ein festes* $c \in X$*, wenn* $f(x) \in U_x$*,* $f(c) \in U_c$ *und* $f(x) - f(c) \in U_s \cdot (x - c)$ *für alle* $x \in X$ *gilt.*

Bemerkung 5.2.4 U_x *enthält alle Funktionswerte* $f(x)$ *für* $x \in X$ *und* U_c *den Wert* $f(c)$*.* U_s *ist eine Obermenge des Intervallslopes gemäß Definition 5.2.1. Die Forderung* $c \in X$ *wurde zur Vereinfachung der Formulierungen hinzugenommen; ein Aufbau der Arithmetik ist auch unabhängig hiervon möglich.*

Es ist leicht einsehbar, daß durch $(\lambda, \lambda, 0)$ ein Slope Tripel für $f(x) \equiv \lambda \in \mathbb{R}$ und durch $(X^{(i)}, c_i, e^{(i)})$ mit $c_i \in X^{(i)}$ eines für die Funktion $f(x) = x^{(i)}$ mit $i \in \{1, \ldots, n\}$ gegeben ist. Die Operationen $+, -, \cdot, /$ für Slope Tripel $\mathcal{U}, \mathcal{V}, \mathcal{W}$ werden durch folgende Regeln definiert.

$$
\begin{array}{lcl}
\mathcal{W} = \mathcal{U} \pm \mathcal{V} & \Rightarrow & \left\{ \begin{array}{lcl} W_x & = & U_x \pm V_x, \\ W_c & = & U_c \pm V_c, \\ W_s & = & U_s \pm V_s, \end{array} \right. \\
\mathcal{W} = \mathcal{U} \cdot \mathcal{V} & \Rightarrow & \left\{ \begin{array}{lcl} W_x & = & U_x \cdot V_x, \\ W_c & = & U_c \cdot V_c, \\ W_s & = & U_x \cdot V_s + V_c \cdot U_s, \end{array} \right. \\
\mathcal{W} = \mathcal{U} / \mathcal{V} & \Rightarrow & \left\{ \begin{array}{lcl} W_x & = & U_x / V_x, \\ W_c & = & U_c / V_c, \\ W_s & = & (U_s - W_c \cdot V_s) / V_x, \end{array} \right.
\end{array}
$$

mit $0 \notin V_x$ im Divisionsfall.

Weiterhin existieren Regeln für gewisse elementare Funktionen wie $(\cdot)^2, \sqrt{\cdot}$, $\ldots$, usw. und für $\varphi(x) = |x|$, $\varphi(x, y) = \max\{x, y\}$ und $\varphi(x, y) = \mathrm{ite}(z, x, y)$. Dabei ist die letzte Funktion so festgelegt, daß sie der Beschreibung von Fallunterscheidungen in Funktionsdefinitionen dient.

$$
\mathrm{ite}(z, x, y) := \left\{ \begin{array}{ll} x, & \text{falls } z < 0 \\ y, & \text{sonst} \end{array} \right.
$$

Entsprechende Sätze und Beweise zur Korrektheit dieser und weiterer Regeln sowie Arithmetikvorschriften und Beispiele können in [93] nachgelesen werden. Für die zitierten Regeln gilt hiernach

Satz 5.2.5 *Sind $\mathcal{U}$ und $\mathcal{V}$ Slope Tripel für die Funktionen $u : D \to \mathbb{R}$ und $v : D \to \mathbb{R}$ mit $D \subseteq \mathbb{R}^n$, so ist $\mathcal{W} = \mathcal{U} \circ \mathcal{V}$ ein Slope Tripel für $w = u \circ v : D \to \mathbb{R}$ mit $\circ \in \{+, -, \cdot, /\}$.*

5.2.1 Verbindung der Slopes mit der Box F'_k und dem Unterproblem (UP0)

Während im differenzierbaren Fall die Inklusion $s_f(c, X) \subseteq F'(X)$ für die Intervallslopes gilt, ist im nichtdifferenzierbaren Fall keine Aussage möglich. $f'(x) \in s_f(c, X)$ für alle $c, x \in X$ gilt ohnehin im allgemeinen nicht. Es kann also kein direkter Zusammenhang zwischen der Subgradientenbox F'_k, die der Forderung (5.1) genügen soll, und einer Einschließung für $s_f(c, X)$ – etwa mit $X = X_k^\varepsilon$ – festgestellt werden.

Wir möchten trotzdem über ein Ersetzen von F'_k in (UP0) durch $s_f(x_k, X_k^\varepsilon)$ bzw. die entsprechende Inklusion $S \supseteq s_f(x_k, X_k^\varepsilon)$ nachdenken. Es mögen die üblichen Bezeichnungen gelten. OBdA sei $s_f(x_k, X_k^\varepsilon)$ eine Box. (Ist dies nicht der Fall, verwendet man stattdessen die kleinste einschließende Box.)

Satz 5.2.6 *Sei* $0 \notin s_f(x_k, X_k^\varepsilon)$ *und*

$$\bar{d} = \arg\min\{\|p\| : p \in s_f(x_k, X_k^\varepsilon)\}.$$

Dann ist $-\bar{d}$ *Abstiegsrichtung für* f *in* x_k*.*

BEWEIS: Die Vorgehensweise ist dieselbe, wie wir sie bereits häufiger gesehen haben. Mit Lemma 1.1.19 gilt aufgrund der Boxeigenschaft von $s_f(x_k, X_k^\varepsilon)$

$$h^t(-\bar{d}) \leq -\|\bar{d}\|^2 \text{ für alle } h \in s_f(x_k, X_k^\varepsilon).$$

Die Slope-Definition ergibt

$$f(x_k + d) - f(x_k) \in s_f(x_k, X_k^\varepsilon) \cdot d \text{ für alle } x_k + d \in X_k^\varepsilon.$$

Insgesamt erhalten wir für alle $t \in (0, \varepsilon]$

$$f(x_k - t\bar{d}/\|\bar{d}\|) - f(x_k) \leq -t\|\bar{d}\| < 0.$$

$\square$

Eine Umformulierung von (UP0) zu

$$\min_{g \in s_f(x_k, X_k^\varepsilon)} \|g\|$$

ist demnach möglich. Legt man analog die Abbruchbedingung durch

$$0 \in s_f(x_k, X_k^\varepsilon)$$

fest, so bleibt die Konvergenzeigenschaft gemäß Satz 2.3.2 erhalten, denn der gerade ausgeführte Beweis hat die Mindestschrittweite ε auch in diesem Fall bestätigt.

Das Einfangen der Null kann jedoch auch bei der Verwendung der Slopes auftreten. Einfaches Nachrechnen mit Hilfe der Slope Arithmetik demonstriert dies an dem bekannten Beispiel Maxl (2.5). $s_f(x_k, X_k^\varepsilon)$ mit $x_k = (1,1)^t$ und $\varepsilon > 0$ beliebig liefert das gleiche Resultat wie F'_k im besten Fall, nämlich $([0,1],[0,1])^t \ni (0,0)^t$. Damit wird auch hier ein Abbruch an falscher Stelle erfolgen.

Die Probleme, die wir bei (UP0) festgestellt haben, werden also durch Verwendung der Slopes nicht gelöst. In welchem Umfang andere numerische Ergebnisse die Folge des hier beschriebenen Ansatzes sind, können wir nicht sagen, da entsprechende praktische Tests im Rahmen dieser Arbeit nicht durchgeführt wurden. Um das Verfahren mit (UP1) weiterzuführen, sind Überlegungen nötig, die sich im wesentlichen mit der Forderung (5.1) beschäftigen. Da diese nicht länger Bestand hat, müßte untersucht werden, inwieweit die Eigenschaften von (UP1) bzw. dessen Lösung übertragbar sind, wenn die Konstruktionen zur Subgradientenauswahl erhalten bleiben. Wir möchten zumindest einen offensichtlichen Zusammenhang erwähnen. $s_f(x_k, X_k^\varepsilon)$ sei wiederum Box.

Lemma 5.2.7 *Betrachte* (UP1) *mit den üblichen Bezeichnungen und* $-s_f(x_k, X_k^\varepsilon)$ *statt* $-F'_k$. *Gilt* $g_k := -\arg\min\{\|p\| : p \in G_k\} \in -s_f(x_k, X_k^\varepsilon)$, *so bleibt die Abstiegseigenschaft einer Lösung* $\tilde{d}_k$ *dieses Problems,*

$$\xi^t \tilde{d}_k \le -\|g_k\|^2 \text{ für alle } \xi \in G_k,$$

wie sie in Satz 3.1.25 bewiesen wurde, erhalten.

Kapitel 6

Implementierung

Wir möchten in diesem Kapitel unsere Implementierung vorstellen, mit der die numerischen Tests im folgenden Kapitel durchgeführt wurden. (UP0) und (UP1) haben wir konkret umgesetzt, zu (UP TR) erste Überlegungen angestellt. Auf (UP0) gehen wir jedoch nicht näher ein, da eine direkte Programmierung möglich ist.

Wir beschäftigen uns desweiteren mit der Lösung des eindimensionalen Unterproblems, der Liniensuche

$$\min_{t>0} f(x_k + td_k),$$

bei generierter Suchrichtung d_k.

Die programmierte Version stützt sich im wesentlichen auf den Fall der stetig differenzierbaren Einzelfunktionen, wie wir ihn in Abschnitt 3.3.1 betrachtet haben. Darüberhinaus werden endliche Indexmengen I und J angenommen. Zu jeder Einzelfunktion korrespondiere eine Lipschitzkonstante L_i, die für die Umsetzung jedoch nicht explizit bekannt sein muß. Die Situation stellt sich also wie folgt dar:

$$\begin{aligned}
&I := \{1, \ldots, r\},\ J := \{1, \ldots, s\},\\
&f_i : \operatorname{int}(A_i^\iota) \to \mathbb{R},\ i \in I, C^1\text{-Funktionen}, \iota > 0\\
&f|_{A_i} \equiv f_i,\\
&L := \max_{i \in I} L_i \text{ mit } L_i \text{ gültig in } A_i^\iota,\\
&N = \operatorname{cl}\left(\bigcup_{i=1}^r \tilde{A}_i\right) = \bigcup_{i=1}^r A_i,
\end{aligned}$$

und mit den Bezeichnungen wie in Abschnitt 3.3.1 seien

$$M := \max_{i\in I}(M_i, 1) \text{ und } \delta(\mu) := \min_{i\in I} \delta_i(\mu).$$

6.1 Umsetzung des Unterproblems (UP1)

Ein offensichtliches Problem besteht bei der Realisierung der Unterprobleme (UP1) und (UP TR) in der Bestimmung der Argumentpunkte $\eta_i \in g_i(x_k)$ für einen Iterationspunkt x_k. Dies umgehen wir im Fall von (UP1), indem wir wiederum auf A_i^ε zurückgreifen, wie wir es zu Beginn des vorigen Kapitels eingeführt haben. Es sei wie bisher

$$\mathcal{I}_f(x) = \{i \in \{1, \ldots, r\} : x \in A_i\} = \{i \in \{1, \ldots, r\} : f_i(x) = f(x)\}.$$

Mit der Endlichkeit der Indexmengen gilt $\mathcal{I}_f(x) \neq \emptyset$ für alle $x \in N$. Die Erfassung der in X^ε relevanten Indizes soll dagegen durch eine neue Indexmenge simuliert werden, die definiert ist durch

$$\mathcal{I}_{\mathcal{A}}^{prog}(x, \kappa) := \{i \in \{1, \ldots, r\} : |f_i(x) - f(x)| \leq \kappa \;\text{ und }\; x \in A_i^\varepsilon\} \tag{6.1}$$

mit einem festen, hinreichend kleinen Parameter $\kappa > 0$. Die Definition dieser Menge nutzt die Stetigkeit der Funktion aus, um ein geeignetes Kriterium dafür zu erhalten, daß ein Übergang in eine andere C^1-Komponente bzw. deren Abschluß in der Umgebung von x erfolgt. Hinter der Überprüfung des Durchschnitts der einzelnen Inklusionsfunktionen zur Bildung von F_k', wie wir sie in Abschnitt 5.1 vorgestellt haben, stand der gleiche Gedanke.

Die Menge $G(x_k)$ im k-ten Schritt des Verfahrens wird bezüglich der neu definierten Indexmenge $\mathcal{I}_{\mathcal{A}}^{prog}(x_k, \kappa)$ gebildet. Wir verzichten dabei auf die Bestimmung der einzelnen $g_i(x_k)$ für $i \in \mathcal{I}_{\mathcal{A}}^{prog}(x_k, \kappa)$, sondern setzen direkt

$$G(x_k) := \{\nabla f_i(x_k) : i \in \mathcal{I}_{\mathcal{A}}^{prog}(x_k, \kappa)\}.$$

Die Auswertung der Gradienten findet also im aktuellen Iterationspunkt statt. Die C^1-Eigenschaft der Einzelfunktionen wird dabei ausgenutzt.
$G_{ko}(x_k)$ sei wiederum die konvexe Hülle von $G(x_k)$. Wir listen die Eigenschaften der veränderten Konstruktionen auf, die zwar denen des theoretischen Ansatzes entsprechen, jedoch zum Teil neu betrachtet werden müssen. Wir erinnern hierzu noch einmal an Bemerkung 3.1.7.

Satz 6.1.1 *Sei* $x \in \mathbb{R}^n$.

1. *$\mathcal{I}_f(x) = \mathcal{I}_{\mathcal{A}}(x,0) = \mathcal{I}_{\mathcal{A}}^{prog}(x,0) \subseteq \mathcal{I}_{\mathcal{A}}^{prog}(x,\kappa)$.*

2. *Für $\kappa \geq 2L\sqrt{n}\varepsilon$ gilt $\mathcal{I}_{\mathcal{A}}(x,\varepsilon) \subseteq \mathcal{I}_{\mathcal{A}}^{prog}(x,\kappa)$.*

3. *$\mathcal{I}_{\mathcal{A}}^{prog}(x,\kappa)$ ist abgeschlossen als Abbildung in x und κ.*

4. *Die mengenwertigen Abbildungen $x \mapsto G(x)$ bzw. $x \mapsto G_{ko}(x)$ sind abgeschlossen.*

5. *$\partial f(x) \subseteq G_{ko}(x)$.*

BEWEIS: Punkt 1 ist offensichtlich.

Hiermit schauen wir uns in Punkt 2 einen Index $i \in \mathcal{I}_{\mathcal{A}}(x,\varepsilon) \setminus \mathcal{I}_{\mathcal{A}}(x,0)$ an. Dieser ist unter den geltenden Voraussetzungen dadurch charakterisiert, daß es einen Punkt $y \in X^{\varepsilon}$ gibt mit der Eigenschaft

$$f(y) = f_i(y) \text{ und } f_i(x) \neq f(x).$$

Die Behauptung ergibt sich leicht aus der Lipschitzbedingung an f und f_i.

$$\begin{array}{rcl} |f(x) - f_i(x)| & \leq & |f(x) - f(y)| + |f_i(y) - f_i(x)| \\ & \leq & L\|x-y\| + L\|x-y\| \\ & = & 2L\|x-y\| \\ & \leq & 2L\sqrt{n}\varepsilon \leq \kappa. \end{array}$$

Punkt 3 folgt mit der Endlichkeitsvoraussetzung, der Stetigkeit der Funktionen und der Kompaktheit von A_i^{ε}.

In Punkt 4 zeigt man den ersten Teil der Aussage in bekannter Form unter Verwendung des vorigen Punktes. Dieser liefert für eine Teilfolge mit $i_{k_\nu} = i$ für alle ν die Eigenschaft $i \in \mathcal{I}_{\mathcal{A}}^{prog}(x,\kappa)$. Die Eindeutigkeit des Grenzwertes und die C^1-Eigenschaft von f_i auf A_i^{ε} besagen, daß damit $g = \lim_{\nu\to\infty} \nabla f_i(x_{k_\nu}) = \nabla f_i(x) \in G(x)$ ist. Der zweite Teil dieser Behauptung wird wie Korollar 3.1.19 bewiesen.

Punkt 5 gilt mit Lemma 3.3.1 und Punkt 1. □

$G(x_k)$ ist also kompakt, und es ist $G_{ko}(x_k) = G_k$.

(UP1) lautet

$$\min_{d\in -F_k'} \max_{\xi\in G_k} \xi^t d,$$

was sich hier mit Lemma 1.1.20 als

$$\min_{d \in -F'_k} \max_{\xi \in G(x_k)} \xi^t d$$

schreiben läßt.

Bemerkung 6.1.2 *Unter Verwendung des in Abschnitt 5.1 beschriebenen Verfahrens zur Konstruktion von F'_k gilt $G_k \subseteq F'_k$.*

Satz 6.1.3

1. *Eine Lösung d_k von* (UP1) *in der hier beschriebenen Form mit $\xi^t d_k < 0$ für alle $\xi \in G(x_k)$ ist Abstiegsrichtung für f in x_k, und es gilt die Aussage des Satzes 3.1.25, $\xi^t d_k \leq -\|g_k\|^2$ für alle $\xi \in G_k$ mit $g_k := -\arg\min\{\|p\| : p \in G_k\}$.*
2. *Die Folge dieser (g_k) konvergiert im Falle eines nicht terminierenden Algorithmus mit exakter Liniensuche gegen* 0.
3. *Ist x^* ein Häufungspunkt der Iterationsfolge (x_k), so gilt $0 \in G_{ko}(x^*)$.*

BEWEIS: Der Beweis des in Punkt 1 zitierten Satzes bleibt hier mit vorhergehender Bemerkung gültig. Gleiches gilt für Korollar 3.1.27. Da man Punkt 2 wegen der veränderten Indexmenge $\mathcal{I}_{\mathcal{A}}^{prog}(x_k, \kappa)$ nicht ohne weiteres aus Satz 3.3.4 ableiten kann, führen wir den Beweis in den neuen Teilen kurz aus. Die Methodik bleibt gleich.
Mit einer Widerspruchsannahme existiert ein $\sigma > 0$ und eine Teilfolge (g_{k_m}) mit $\|g_{k_m}\| \geq \sqrt{\sigma}$ für alle m und damit auch

$$\forall \xi \in G_{k_m} : \xi^t d_{k_m} \leq -\|g_{k_m}\|^2 \leq -\sigma.$$

Sei $\delta := \min\{\varepsilon, \kappa/(2L), \delta(\sigma/(2M))\}$ und $z \in U(x_{k_m}, \delta)$ beliebig. Betrachte einen Index $i \in \mathcal{I}_f(z)$. Da $\delta \leq \varepsilon$ ist, liegt $x_{k_m} \in A_i^\varepsilon$. Wir zeigen $\nabla f_i(x_{k_m}) \in G(x_{k_m})$. Unterscheide zwei Fälle:

1. $i \in \mathcal{I}_f(x_{k_m}) \subseteq \mathcal{I}_{\mathcal{A}}^{prog}(x_{k_m}, \kappa)$ nach Satz 6.1.1.
2. $i \notin \mathcal{I}_f(x_{k_m})$: Es gilt die Abschätzung

$$\begin{aligned} |f_i(x_{k_m}) - f(x_{k_m})| &\leq |f_i(x_{k_m}) - f_i(z)| + |f(z) - f(x_{k_m})| \\ &\leq 2L\|x_{k_m} - z\| < 2L\delta \leq 2L \cdot \kappa/(2L) = \kappa. \end{aligned}$$

   Also folgt auch hier $i \in \mathcal{I}_{\mathcal{A}}^{prog}(x_{k_m}, \kappa)$.

In bekannter Weise setzen wir zusammen

$$\begin{aligned}\nabla f_i(z)^t d_{k_m} &= (\nabla f_i(z)^t d_{k_m} - \nabla f_i(x_{k_m})^t d_{k_m}) + \nabla f_i(x_{k_m})^t d_{k_m} \\ &\leq \|\nabla f_i(z) - \nabla f_i(x_{k_m})\| \|d_{k_m}\| - \sigma \\ &< \sigma/(2M) \cdot M - \sigma = -\sigma/2 < 0.\end{aligned}$$

Dies bedeutet unter Berücksichtigung aller $i \in \mathcal{I}_f(z)$, mit der Endlichkeit der Indexmengen und den Ergebnissen aus Abschnitt 3.3.1

$$f^\circ(z, d_{k_m}) < 0.$$

Der Widerspruch ist hiermit analog zu dem im Beweis von Satz 3.3.4 herleitbar.

Mit Punkt 4 des vorhergehenden Satzes gilt die letzte Teilbehauptung. □

Bemerkung 6.1.4 *Da $\mathcal{I}_{\mathcal{A}}^{prog}(x, \kappa)$ auch in κ abgeschlossen ist, könnte man mit κ gegen 0 gehen, um eine schärfere Konvergenzaussage und in der Praxis ein genaueres Ergebnis zu erhalten. Für $\kappa = 0$ ist $G_{ko}(x) = \partial f(x)$.*

Wir haben alle Begriffe auf eine Programmierung abgestimmt. Sinnvoll ist diese für Parameter $\kappa \in (0, 1)$, um möglichst nahe an der Idee zu arbeiten, daß alle in der Iterationsbox relevanten Funktionen betrachtet werden sollen.

Die Umsetzung von (UP1) in der beschriebenen Form ist theoretisch gerechtfertigt und kann in der Praxis als ein lineares Optimierungsproblem leicht realisiert werden. Das möchten wir kurz veranschaulichen.

Sei

$$-F_k' = \begin{pmatrix} [a_1, b_1] \\ \vdots \\ [a_n, b_n] \end{pmatrix}$$

und oBdA $\mathcal{I}_{\mathcal{A}}^{prog}(x_k, \kappa) = \{1, \ldots, h\}$. Dann kann das Problem

$$\min_{d \in -F_k'} \max_{\xi \in G(x_k)} \xi^t d$$

unter den gegebenen Voraussetzungen geschrieben werden als

$$\min_{\substack{a_j \leq d^{(j)} \leq b_j \\ 1 \leq j \leq n}} \max_{1 \leq i \leq h} \nabla f_i(x_k)^t d. \tag{6.2}$$

Der nächste Schritt auf dem Weg zum Programm liegt in der Umformung von (6.2) zu

$$\min_{\substack{z \geq \nabla f_i(x_k)^t d \\ a_j \leq d^t e^{(j)} \leq b_j}} z \text{ für } 1 \leq i \leq h, 1 \leq j \leq n. \tag{6.3}$$

In der Implementierung wird eine Realisierung des Simplexalgorithmus nach Will Naylor benutzt. Es handelt sich um das Paket *wnsplx*, welches sich auf die Quellen [10], [19] und [35] beruft. Man kann es auf dem ftp-Server

ftp.rahul.net

im Verzeichnis

/pub/spiketech/softlib/wnlib

erhalten. In demselben Verzeichnis befindet sich auch eine erläuternde Textdatei, INSTALL.txt. Zur Anwendung dieser Software ist eine Anpassung des obigen linearen Problems mittels Schlupfvariablen und weiteren Restriktionen an die Standardformulierung

$$\max_{\substack{Ay=v \\ y \geq 0}} c^t y$$

nötig, durch die wir folgende Dimensionen erhalten:

$$A = (a_{\nu l}) \in \mathbb{R}^{(2n+h)\times(4n+h+1)}, c \in \mathbb{R}^{4n+h+1}, v \in \mathbb{R}^{2n+h} \text{ und } y \in \mathbb{R}^{4n+h+1}.$$

Die Zusammensetzung der Elemente, die leicht nachgerechnet werden kann, sieht dann folgendermaßen aus:

$$y := (-z, y_+^{(1)}, \dots, y_+^{(n)}, y_-^{(1)}, \dots, y_-^{(n)}, y^{(2n+2)}, \dots, y^{(4n+h+1)})^t \text{ mit}$$

$$y^{(2n+1+\nu)} = v^{(\nu)} - \sum_{l=1}^{2n+1} a_{\nu l} y^{(l)} \geq 0 \text{ für } 1 \leq \nu \leq 2n+h,$$

$$c := (1, 0_{4n+h})^t, v := (0_h, b_1, \dots, b_n, -a_1, \dots, -a_n)^t$$

und $A := [\tilde{A}, E_{2n+h}]$ mit

$$\tilde{A} := \begin{pmatrix} 1 & \nabla f_1(x_k)^t & -\nabla f_1(x_k)^t \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & \nabla f_h(x_k)^t & -\nabla f_h(x_k)^t \\ 0_n & E_n & -E_n \\ 0_n & -E_n & E_n \end{pmatrix}.$$

Ist die Lösung y^* dieses Problems generiert, erhalten wir die gesuchte Richtung als

$$d_k := y^*_+ - y^*_-.$$

6.1.1 Abbruchkriterium

Das Analogon zum Abbruchkriterium (3.17) legen wir durch

$$\textbf{(AB1)}\ \exists 1 \leq i \leq h : \nabla f_i(x_k)^t d_k \geq -\delta$$

mit hinreichend kleinem $\delta > 0$ fest. Dies ist offensichtlich äquivalent dazu, daß für den Optimalwert z_k des Problems (6.3)

$$z_k \geq -\delta$$

gilt. Aufgrunddessen ist (AB1) ohne zusätzlichen Aufwand überprüfbar. Ist (AB1) nicht erfüllt, wird die Liniensuche gestartet, mit der wir uns im nächsten Abschnitt kurz beschäftigen werden. Die Rechtfertigung der Abbruchbedingung gründen wir auf zwei Ergebnisse.

Lemma 6.1.5 *Mit den Bezeichnungen dieses Kapitels gilt:*

1. *Aus* (AB1) *folgt* $\min\{\|p\| : p \in G_k\} \leq \sqrt{\delta}$.

2. *Sei* $x \in N$ *beliebig und* $m \in (0,1)$. *Es gibt zu jedem* $\mu > 0$ *ein* $\delta > 0$, *so daß für alle* $y \in U(x,\delta) \cap N$ *gilt:*

   $$\tilde{G}(x) := \{\nabla f_i(x) : x \in A_i^{m\varepsilon} \text{ und } |f_i(x) - f(x)| < \kappa\} \subseteq G(y) + B(0,\mu).$$

BEWEIS: Die erste Behauptung folgt durch Widerspruchsannahme aus Teil 1 des Satzes 6.1.3. Den zweiten Teil beweisen wir ebenfalls durch Widerspruch. Sei also $\mu > 0$ derart, daß es eine Folge $(x_k) \subseteq A_i^\varepsilon$ gibt mit $\lim_{k\to\infty} x_k = x$ und ein Element $\nabla f_i(x) \in \tilde{G}(x)$, so daß für alle $\nabla f_j(x_k) \in G(x_k)$, $j \in \mathcal{I}_\mathcal{A}^{prog}(x_k, \kappa)$,

$$\|\nabla f_j(x_k) - \nabla f_i(x)\| > \mu$$

ist. Für $|f_i(x) - f(x)| = \kappa - \bar{\kappa}$ mit $0 < \bar{\kappa} < \kappa$ schätzt man ab

$$|f_i(x_k) - f(x_k)| \leq 2L\|x_k - x\| + \kappa - \bar{\kappa},$$

so daß für alle x_k mit $\|x_k - x\| < \frac{\bar{\kappa}}{4L}$ gerade $i \in \mathcal{I}_\mathcal{A}^{prog}(x_k, \kappa)$ gilt. Nach Widerspruchsannahme bedeutet dies

$$\|\nabla f_i(x_k) - \nabla f_i(x)\| > \mu$$

ab einem gewissen Index k_0, was jedoch aufgrund der C^1-Eigenschaft von f_i in A_i^ε nicht möglich ist. □

Teil 2 dieses Lemmas kombiniert mit der Abgeschlossenheit von $x \mapsto G(x)$ kann als eine Art Stetigkeitseigenschaft verstanden werden. Die Unterhalbstetigkeit folgt leider nicht. Dies liegt an der Möglichkeit, daß x auf dem Rand eines A_i^ε liegen kann, und so für eine Folge (x_k) eine entsprechende Auswertung $f_i(x_k)$ gar nicht möglich sein muß.

Gehen wir von Problemstellungen aus, die nicht zu schlecht konditioniert sind, macht (AB1) Sinn. Auch bei Verfahren für C^1-Funktionen kann man durch gezielte Faktoren erreichen, daß Abbrüche an falscher Stelle erfolgen. Denken wir an das Verfahren des steilsten Abstiegs mit dem Kriterium $\|\nabla f(x_k)\| < \delta$, welches bei einem Koeffizient nahe 0 im Gradienten eventuell viel zu früh einen Abbruch bewirkt.

Da wir bei der Berechnung von (UP1) punktuelle Ableitungsinformation verwenden, können wir im Falle eines Abbruchs keine garantierte Fehlerabschätzung für den Abstand zum Lösungspunkt angeben. Methoden der Intervallarithmetik zeichnen sich in der Regel dadurch aus, daß sie garantierte Einschließungen der Lösungspunkte generieren. Aus diesem Grund könnte man eines der in Kapitel 2 angesprochenen globalen intervallarithmetischen Verfahren anschließen, um die Existenz einer lokalen Minimalstelle in der Box X_k^ε nach Abbruch des Verfahrens zu überprüfen. Die Programmpakete, die wir zur Implementierung verwendet haben, bieten eine solche Möglichkeit an; vergleiche [57] und das kommende Kapitel. Die numerischen Ergebnisse werden zeigen, daß wir in den meisten Fällen schon mit noch recht großem δ nahe der Lösung abbrechen.

Auch bei den Bündel-Verfahren kann in der Regel keine garantierte Fehlerabschätzung bezüglich der Argumente gegeben werden. Theoretische Aussagen beziehen sich auf die Funktionswerte.

6.2 Liniensuche

Sowohl bei dem Verfahren mit (UP0) als auch bei dem mit (UP1) als Richtungssuche benötigen wir nach Bestimmung von d_k eine Lösung des eindimensionalen Unterproblems

$$\min_{t>0} f(x_k + td_k).$$

Im Gegensatz zum theoretischen Ansatz wird in der Praxis mit unexakter Liniensuche gearbeitet. Die Gründe hierfür sind numerischer Art, da eine exakte Lösung in der Regel nicht einfach zu berechnen ist und der Aufwand zu groß wäre.

In der Optimierungstheorie gibt es zahlreiche Untersuchungen, die Kriterien für eine erfolgreiche unexakte Liniensuche enthalten. Im differenzierbaren Fall ist das Zusammenspiel der sogenannten α- und β-Bedingung interessant, siehe [18] oder [87].

$$\alpha\text{-Bedingung: } f(x_{k+1}) - f(x_k) \leq \alpha(x_{k+1} - x_k)^t \nabla f(x_k) \tag{6.4}$$

mit $\alpha \in (0,1)$, wobei bevorzugt $\alpha \leq 0.1$ gesetzt wird.

$$\beta\text{-Bedingung: } (x_{k+1} - x_k)^t \nabla f(x_{k+1}) \geq \beta(x_{k+1} - x_k)^t \nabla f(x_k) \tag{6.5}$$

mit $\beta \in (0,1)$, meist $\beta \geq 0.5$.

Die α-Bedingung bewirkt eine relative Abstiegsforcierung, die β-Bedingung eine relative Mindestschrittweite.
Beides soll Konvergenz gegen einen Nichtlösungspunkt, das sogenannte *Jamming* vermeiden. (6.4) erreicht zudem, daß die Schrittweite nicht zu groß wird, denn für großes t_k, das in den Ausdruck $(x_{k+1} - x_k)$ eingeht, wird die Bedingung meist verletzt sein (außer für den Fall, daß f nach unten unbeschränkt ist).

An (6.5) fällt auf, daß auch eine Auswertung des Gradienten in x_{k+1} benötigt wird. Liegt eine Situation vor, in der dies zu aufwendig ist, gibt es weitere Möglichkeiten, trotzdem eine Art Mindestschrittweite zu fordern. Zwei Beispiele sind die *Armijo Regel*, die neben (6.4)

$$f(x_k + M_k t_k d_k) - f(x_k) > \alpha M_k t_k \nabla f(x_k)^t d_k$$

mit $M_k \in (1, M]$ für festes M fordert oder die *Goldsteinregel*, die (6.4) mit

$$f(x_{k+1}) - f(x_k) \geq m_l t_k \nabla f(x_k)^t d_k$$

für $m_l \in (\alpha, 1)$ kombiniert. Diese Versionen sind [61] entnommen. In ähnlicher Form findet man solche Bedingungen auch beispielsweise in [5], [18] und [71].

Ein Satz von Wolfe, siehe [87], sichert die Existenz von Schrittweiten t, mit denen sowohl die α- als auch die β-Bedingung unter gewissen Voraussetzungen für C^1-Funktionen erfüllt sind.

Lemaréchal beschäftigt sich in [61] mit der Übertragung der beiden Bedingungen auf nichtdifferenzierbare Probleme. Wir führen nur kurz die resultierenden Kriterien an. Für die daran anschließenden Aussagen über Konvergenz und Endlichkeit verweisen wir auf den Artikel.

Das Problem besteht offensichtlich darin, daß man nun mit der verallgemeinerten Richtungsableitung arbeiten muß und auch diese nicht immer kennt. Die Herleitung in [61] beinhaltet sowohl ein Kriterium für den sogenannten Nullschritt, den wir in Kapitel 2 bereits erwähnt haben und der in ε-Bündel- und verwandten Verfahren eine Verbesserung der Approximation des Subdifferentials oder ε-Subdifferentials bzw. die Hinzunahme weiterer Subgradienten nötig macht, als auch ein Kriterium für den Abstiegsschritt. Da wir in unserer Realisierung nur auf den zweiten Fall stoßen, wird der Übersichtlichkeit halber nur dieser erwähnt. Es soll für die Schrittweite t_k mit $g_{k+1} \in \partial f(x_{k+1})$ gelten

$$g_{k+1}^t d_k \geq m' v_k \tag{6.6}$$

und

$$f(x_{k+1}) - f(x_k) \leq m t_k v_k, \tag{6.7}$$

wobei $v_k < 0$ und im günstigsten Fall

$$f^\circ(x_k, d_k) \leq v_k < 0$$

ist. Es seien $m \in (0,1)$ und $m' \in (m,1)$.

Die Existenz von v_k und t_k, welche die zweite dieser Forderungen erfüllen, ist gemäß der theoretischen Grundlagen aus Kapitel 2 und 3 gewährleistet.

Lemma 6.2.1 *Betrachte* (UP0) *mit* $g_k^0 := \arg\min\{\|p\| : p \in F_k'\}$ *und* (UP1) *mit* $g_k^1 := \arg\min\{\|p\| : p \in G_k\}$. *Sei* $v_k := -\|g_k^j\|^2$ *und* $g_k^j \neq 0$, $j = 0,1$. *Dann existiert ein* $t_k > 0$ *mit*

$$f(x_k + t_k d_k) - f(x_k) \leq t_k m v_k$$

für die jeweilige Lösung d_k *des Unterproblems und* $m \in (0,1)$.

BEWEIS: Im Fall von (UP0) werde d_k nicht normiert. Dann lauten die nötigen Ergebnisse der zitierten Kapitel im k-ten Iterationsschritt

$$f^\circ(x_k, d_k) \leq -\|g_k^j\|^2,\ j = 0,1,$$

woraus mit

$$\limsup_{t \downarrow 0} \frac{f(x_k + td_k) - f(x_k)}{t} \leq \limsup_{\substack{y \to x_k \\ t \downarrow 0}} \frac{f(y + td_k) - f(y)}{t} = f^\circ(x_k, d_k)$$

die Existenz eines $\mu > 0$ folgt, so daß für alle $t \in (0, \mu)$

$$f(x_k + td_k) - f(x_k) \leq -tm\|g_k^j\|^2,\ j = 0,1$$

mit $m \in (0,1)$ gilt. □

6.2.1 Einzelheiten der Realisierung

Das vorhergehende Lemma wurde in der Programmierung der Liniensuche zu (UP0) benutzt. Bei der Realisierung der Liniensuche zu (UP1) ist dies nicht direkt möglich, da v_k dort nicht einfach abgelesen werden kann. In diesem Fall haben wir mit $\mathcal{I}_{\mathcal{A}}^{prog}(x_k, \kappa) = \{1, \ldots, h\}$ die Konvexkombination

$$y_k = \sum_{\nu=1}^{h} \frac{1}{h} \nabla f_\nu(x_k)$$

gebildet und

$$v_k := -\|y_k\|^2$$

gesetzt.

Wir arbeiten mit t und zwei Parametern t_l und t_r, die untere bzw. obere Schranke für die Schrittweite sind. Da wir entgegen Schritt 3 in Algorithmus 2.2.1 d_k nach Lösung von (UP0) nicht normieren, starten wir in diesem Fall mit $t_l = \varepsilon/\|d_k\|$ (garantierte Mindestschrittweite) und nach Bestimmung von d_k durch (UP1) immer mit $t_l = 0$. Die Größe t liegt im Falle von (UP0) zu Beginn der Liniensuche immer bei 1. Aufgrund der Konvergenzergebnisse für C^1-Einzelfunktionen bei Verwendung des neuen Verfahrens und der Hintereinanderschaltung der beiden Unterprobleme setzen wir in der Regel zu Beginn der Liniensuche im k-ten Schritt $t = t_{k-1}$, falls auch schon d_{k-1} mittels (UP1) generiert wurde. Auf diese Weise werden übermäßig viele Durchläufe im eindimensionalen Unterproblem vermieden, wie die numerischen Tests zeigen.

Wir nutzen die Möglichkeiten der Intervallarithmetik, um zu Beginn der Liniensuche eine positive Verschiebung des für t_k in Frage kommenden Bereiches abzufragen. Dazu berechnen wir das Intervall

$$X := x_k + [t_l, t] \cdot d_k,$$

die Subgradientenbox $F'(X)$ hiervon und testen, ob

$$\mathrm{ub}(F'(X) \cdot d_k) < 0$$

ist. Ist dies der Fall, erhöhen wir t_l auf t und t auf $1.5t_l$. Wir wiederholen den Schritt, bis der Test eine negative Antwort ergibt.

Im Anschluß hieran gehen wir nach dem Verfahren in [61], Seite 75, vor, wobei wir die Bedingung (6.6) für das aktuelle t wiederum mittels einer Boxauswertung von F' in $X := x_k + [t - 0.01, t + 0.01]d_k$ durch

$$\mathrm{ub}(F'(X) \cdot d_k) > m'v_k$$

testen.
In der Extrapolation wird t um die Hälfte vergrößert. Die Interpolation führen wir quadratisch gemäß Lemma 1.1.23 durch, wobei wir wie im Liniensuchalgorithmus in [67], Seite 128, mittels einer Konstanten ζ setzen

$$t := \max\left\{\zeta \cdot t, \frac{0.5t^2 v_k}{tv_k + f(x_k) - f(x_k + td_k)}\right\}.$$

ζ sorgt dafür, daß t nicht zu klein wird. Lemma 1.1.23 haben wir bereits im Zusammenhang mit dem TR-Faktor zitiert. Die Größe v_k wird für jedes k festgehalten.

6.2.2 Alternativen

Alternativen zur Liniensuche in der Standardform können darin bestehen, effiziente Methoden zur globalen Optimierung eindimensionaler Probleme zu verwenden. Dies heißt dann aber, daß man sehr viel Aufwand – auch programmiertechnischer Art – in das eindimensionale Unterproblem steckt, welches bei der vorliegenden Verfahrensklasse eine untergeordnete Rolle spielt und nicht das Thema dieser Arbeit ist. Jedoch wäre es denkbar, die in Abschnitt 5.2 vorgestellten Slopes zu nutzen und zum Beispiel das Verfahren von Ratz [92] anzuwenden. Eine andere Möglichkeit bietet ein Ansatz von Huyer und Neumaier [41], bei dem mittels $\binom{n+2}{2}$ Funktionsauswertungen ein quadratisches Modell aufgebaut und durch Koordinatensuche minimiert wird.

Die Richtungssuche bildet aber den Kernpunkt unseres Verfahrens. Bei der Liniensuche dürfen durchaus ein wenig mehr Auswertungen in Kauf genommen werden. Diese Einschätzung deckt sich damit, daß unexakte Liniensuchen in dieser Art von Subgradienten- und Bündelverfahren bevorzugt werden. Die Einbindung einer komplexen globalen Methode käme eher einer exakten Liniensuche gleich.

6.3 Verbindung von (UP0) und (UP1) im numerischen Test

In der Realisierung, deren Ergebnisse man in Kapitel 7 findet, wurde der folgende Algorithmus verwendet.

Algorithmus 6.3.1 *Gegeben seien der Startvektor x_0 und die Parameter $\varepsilon, \delta_0, \delta, \kappa > 0$. Für $k = 0, 1, 2, \ldots$ führe folgende Schritte durch:*

1. *Berechne X_k^ε.*

2. *Berechne F_k'.*

3. *Liegt $0 \in F_k'$, gehe zu 9.*

4. *Bestimme d_k als Lösung von (UP0).*

5. *Gilt $\|d_k\| \leq \delta_0$, beende das Verfahren.*

6. *Bestimme die Schrittweite t_k durch die Liniensuche.*

7. *Setze* $x_{k+1} := x_k + t_k d_k$ *und* $k := k + 1$.

8. *Gehe zu 1.*

9. *Bestimme* d_k *als Lösung von* (UP1).

10. *Gilt* (AB1) *bezüglich* δ*, beende das Verfahren.*

11. *Gehe zu 6.*

Es wurden keine Tests durchgeführt, die von vornherein nur auf einer Richtungssuche mittels (UP1) aufbauen. Wir untersuchen im folgenden Kapitel aber durchaus Beispiele, die in jeder Iteration zu Schritt 9 springen.

6.4 Überlegung zur Umsetzung von (UP TR)

Wie kann eine sinnvolle Realisierung von (UP TR) aussehen? Es möge die Situation vorliegen, wie wir sie zu Beginn dieses Kapitels beschrieben haben. Eine Analogie zur Umsetzung von (UP1) schlägt deshalb fehl, weil wir nicht mehr mit der dortigen Konstruktion von $G(x)$ über der Indexmenge $\mathcal{I}_{\mathcal{A}}^{prog}(x,\kappa)$ arbeiten können. Identifiziert man hier die η_i mit x, so gelangt man wieder zu (UP1). Es ist also eine andere Möglichkeit gesucht, die das Modell $f_M(x,d,\varepsilon)$ überhaupt entstehen läßt. Dazu müssen Punkte η_i bestimmt werden. Da dies exakt nicht möglich ist, wird als erste Idee folgendes vorgeschlagen:

Man benutzt den in Kapitel 1 vorgestellten Monotonietest der Intervallarithmetik, um geeignete Ecken der Iterationsbox X^ε mit den η_i zu identifizieren. Ohne den genaueren Verlauf der Zielfunktion zu kennen, untersucht man die (Sub-)gradientenboxen der Einzelfunktionen f_i für $i \in \mathcal{I}_{\mathcal{A}}(x,\varepsilon) = \mathcal{I}(x,\varepsilon)$, die wir mit $\nabla F_i(X^\varepsilon) \subseteq \mathbb{I}(\mathbb{R}^n)$ bezeichnen. Man setzt für $j = 1, \ldots, n$

$$\eta_i^{(j)} = \begin{cases} x^{(j)} + \varepsilon, & \text{falls } \nabla F_i(X^\varepsilon)^{(j)} < 0 \\ x^{(j)}, & \text{falls } 0 \in \nabla F_i(X^\varepsilon)^{(j)} \\ x^{(j)} - \varepsilon, & \text{falls } \nabla F_i(X^\varepsilon)^{(j)} > 0 \end{cases} .$$

Das bedeutet, daß für jede in der Iterationsbox X^ε aktive Funktion der Eckpunkt mit dem annähernd niedrigsten Funktionswert zur Bildung des Modells herangezogen wird. Dies wird durch die angestrebte Minimierung motiviert.

Betrachtet man eine Funktion der Form $f(x) = \max\{f_i(x) : i = 1, \dots, m\}$, so erscheint es dagegen sinnvoller, die Ecken genau umgekehrt, also mit dem jeweils annähernd größten Wert zuzuordnen, da die entsprechende Einzelfunktion in diesem Fall eher den Funktionswert von f in diesem Eckpunkt bestimmt.

Dieser Ansatz ist noch sehr vage, wäre aber unter den gegebenen Voraussetzungen implementierbar.

6.5 Ausblick

Liegt eine Zielfunktion vor, die dem Modell der C^1-Einzelfunktionen nicht genügt, so wird man mit dem in diesem Kapitel beschriebenen Vorgehen zur Implementierung nicht zum Ziel kommen. Trotzdem kann das neue Verfahren durchgeführt werden. Man zieht sich auf die in Kapitel 2 bereits erwähnte Annahme zurück, daß zu jedem $x \in \mathbb{R}^n$ ein Subgradient $\xi \in \partial f(x)$ bestimmt werden kann und baut hiermit sämtliche Konstruktionen auf. Die Eigenschaften müssen neu untersucht werden.

Günstiger erscheint es, die Vorzüge des Intervallansatzes auszunutzen, die in den Boxerweiterungen sämtlicher Konstruktionen in Kapitel 3 betont worden sind. Es würde durchaus genügen, jeweils geeignete Einschließungen für die einzelnen Subdifferentiale zu bestimmen, um hiermit das Verfahren aufzubauen. Auf diese Weise blieben Konvergenzeigenschaften erhalten, die andernfalls verloren gingen. Denkbar ist aber auch eine geeignete Verwendung der Slopes, die ohne Differenzierbarkeitsvoraussetzungen gebildet werden können.

Entsprechende Untersuchungen sind noch nicht bekannt.

Kapitel 7

Numerische Tests

7.1 Testbeispiele

Algorithmus 6.3.1 wurde auf folgende Funktionen und Startpunkte x_0 angewandt.

1. Crescent (Dimension 2):
   $f(x) = \max\{{x^{(1)}}^2 + (x^{(2)} - 1)^2 + x^{(2)} - 1, -{x^{(1)}}^2 - (x^{(2)} - 1)^2 + x^{(2)} + 1\}$,
   $x^* = (0, 0)^t$ und $f(x^*) = 0$,
   $x_0 = (-1.5, 2)^t$.

2. CB 2 (Dimension 2):
   $f(x) = \max\{{x^{(1)}}^2 + {x^{(2)}}^4, (2 - x^{(1)})^2 + (2 - x^{(2)})^2, 2e^{-x^{(1)} + x^{(2)}}\}$,
   $x^* = (1.139\ldots, 0.899\ldots)^t$ und $f(x^*) = 1.95222\ldots$,
   $x_0 = (1, -0.1)^t$.

3. CB 3 (Dimension 2):
   $f(x) = \max\{{x^{(1)}}^4 + {x^{(2)}}^2, (2 - x^{(1)})^2 + (2 - x^{(2)})^2, 2e^{-x^{(1)} + x^{(2)}}\}$,
   $x^* = (1, 1)^t$ und $f(x^*) = 2$,
   $x_0 = (2, 2)^t$.

4. DEM (Dimension 2):
   $f(x) = \max\{5x^{(1)} + x^{(2)}, -5x^{(1)} + x^{(2)}, {x^{(1)}}^2 + {x^{(2)}}^2 + 4x^{(2)}\}$,
   $x^* = (0, -3)^t$ und $f(x^*) = -3$,
   $x_0 = (1, 1)^t$.

5. QL (Dimension 2):
$f(x) = \max\{{x^{(1)}}^2 + {x^{(2)}}^2, {x^{(1)}}^2 + {x^{(2)}}^2 + 10(-4x^{(1)} - x^{(2)} + 4), {x^{(1)}}^2 + {x^{(2)}}^2 + 10(-x^{(1)} - 2x^{(2)} + 6)\}$,
$x^* = (1.2, 2.4)^t$ und $f(x^*) = 7.2$,
$x_0 = (-1, 5)^t$.

6. LQ (Dimension 2):
$f(x) = \max\{-x^{(1)} - x^{(2)}, -x^{(1)} - x^{(2)} + {x^{(1)}}^2 + {x^{(2)}}^2 - 1\}$,
$x^* = (1/\sqrt{2}, 1/\sqrt{2})^t$ und $f(x^*) = -\sqrt{2}$,
$x_0 = (-0.5, -0.5)^t$.

7. Mifflin 1 (Dimension 2):
$f(x) = -x^{(1)} + 20 \max\{{x^{(1)}}^2 + {x^{(2)}}^2 - 1, 0\}$,
$x^* = (1, 0)^t$ und $f(x^*) = -1$,
$x_0 = (0.8, 0.6)^t$.

8. Mifflin 2 (Dimension 2):
$f(x) = -x^{(1)} + 2({x^{(1)}}^2 + {x^{(2)}}^2 - 1) + 1.75|{x^{(1)}}^2 + {x^{(2)}}^2 - 1|$,
$x^* = (1, 0)^t$ und $f(x^*) = -1$,
$x_0 = (-1, -1)^t$.

9. Rosen (Dimension 4):
$f(x) = \max\{f_1(x), f_1(x) + 10f_2(x), f_1(x) + 10f_3(x), f_1(x) + 10f_4(x)\}$ mit
$f_1(x) = {x^{(1)}}^2 + {x^{(2)}}^2 + 2{x^{(3)}}^2 + {x^{(4)}}^2 - 5x^{(1)} - 5x^{(2)} - 21x^{(3)} + 7x^{(4)}$,
$f_2(x) = {x^{(1)}}^2 + {x^{(2)}}^2 + {x^{(3)}}^2 + {x^{(4)}}^2 + x^{(1)} - x^{(2)} + x^{(3)} - x^{(4)} - 8$,
$f_3(x) = {x^{(1)}}^2 + 2{x^{(2)}}^2 + {x^{(3)}}^2 + 2{x^{(4)}}^2 - x^{(1)} - x^{(4)} - 10$ und
$f_4(x) = {x^{(1)}}^2 + {x^{(2)}}^2 + {x^{(3)}}^2 + 2x^{(1)} - x^{(2)} - x^{(4)} - 5$,
$x^* = (0, 1, 2, -1)^t$ und $f(x^*) = -44$,
$x_0 = (0, 0, 0, 0)^t$.

10. Maxq (Dimension 20):
$f(x) = \max_{1 \le i \le 20} {x^{(i)}}^2$,
$x^* = (0, \dots, 0)^t$ und $f(x^*) = 0$,
$x_0^{(i)} = i$ für $i = 1, \dots, 10$ und $x_0^{(i)} = -i$ für $i = 11, \dots, 20$.

11. Maxl (Dimension 20):
$f(x) = \max_{1 \le i \le 20} |x^{(i)}|$,
$x^* = (0, \dots, 0)^t$ und $f(x^*) = 0$,
$x_0^{(i)} = i$ für $i = 1, \dots, 10$ und $x_0^{(i)} = -i$ für $i = 11, \dots, 20$.

12. Shor (Dimension 5):
$f(x) = \max_{1\leq i\leq 10}\{b_i \sum_{j=1}^{5}(x^{(j)} - a_{ij})^2\}$ mit
$(b_1, \ldots, b_{10}) = (1, 5, 10, 2, 4, 3, 1.7, 2.5, 6, 3.5)$ und

$$a_{ij} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 1 & 1 & 3 \\ 1 & 2 & 1 & 1 & 2 \\ 1 & 4 & 1 & 2 & 2 \\ 3 & 2 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 2 & 1 \\ 0 & 0 & 2 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 2 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

für $1 \leq i \leq 10, 1 \leq j \leq 5$,
$x^* = (1.12434, 0.97945, 1.47770, 0.92023, 1.12425)^t$, $f(x^*) = 22.60016$,
$x_0 = (0, 0, 0, 0, 1)^t$.

13. Wolfe 1 (Dimension 2):
$$f(x) = \begin{cases} 5(9{x^{(1)}}^2 + 16{x^{(2)}}^2)^{1/2}, & \text{falls } x^{(1)} \geq |x^{(2)}| \\ 9x^{(1)} + 16|x^{(2)}|, & \text{falls } 0 < x^{(1)} < |x^{(2)}| \\ 9x^{(1)} + 16|x^{(2)}| - {x^{(1)}}^9, & \text{falls } x^{(1)} \leq 0 \end{cases},$$
$x^* = (-1, 0)^t$ und $f(x^*) = -8$,
$x_0 = (1, 0.5)$.

14. Wolfe 2 (Dimension 2): wie Wolfe 1 mit $x_0 = (0, 0)^t$.

15. Goffin (Dimension 50):
$f(x) = 50 \max_{1\leq i\leq 50} x^{(i)} - \sum_{i=1}^{50} x^{(i)}$,
$x^* = (a, \ldots, a)^t$ mit $a \in \mathbb{R}$ beliebig und $f(x^*) = 0$,
$x_0^{(i)} = i - 25.5$ für $i = 1, \ldots, 50$.

CB 2 und CB 3 findet man einschließlich Skizzen in [7], DEM in [11], Mifflin 2 in [26] und Shor in [100]. Bei CB2 gibt es jedoch in sämtlichen uns bekannten Literaturquellen unterschiedliche Aussagen über die Lösung x^*. Somit können wir keine genaue Angabe machen, sondern nur vergleichen. Die übrigen Funktionen sind [67] bzw. [97] entnommen. Dort finden sich auch Verweise auf Originalquellen. Die Gleichartigkeit der Gestalt als max-Funktionen soll hier nicht weiter stören. In [7] und [109] werden Verfahren entwickelt, die sich speziell mit dieser Art von Funktionen beschäftigen. Die numerischen Ergebnisse dort sind aber nicht besser als unsere. Der Ansatz, den wir verfolgen, bezieht sich aufgrund der dahinter stehenden Theorie keineswegs nur auf solche Beispiele, jedoch gelten die vorliegenden als Standardtestbeispiele in der Literatur für Bündel- und ähnliche Verfahren. Aus diesem Grund haben auch wir unsere Tests daran ausgeführt.

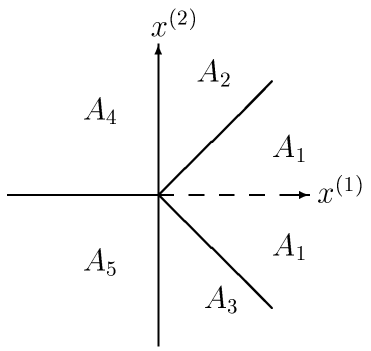
7.2 Übertragung der Theorie auf die Testbeispiele

Wir gehen auf diesen Punkt kurz anhand eines Beispiels ein, um ein Gefühl für mögliche Situationen zu bekommen.

Es kann durchaus sinnvoll sein, auf die aus der Definition der C^1- Komponenten 3.1.3 resultierende Maximalität zu verzichten und mehr Einzelfunktionen anzusetzen, wenn es die Darstellung der Funktion anbietet. Betrachtet man die Wolfe-Funktion, so ergibt sich im Hinblick auf eine Programmierung die feinere Fallunterscheidung

$$f(x) = \begin{cases} 5(9{x^{(1)}}^2 + 16{x^{(2)}}^2)^{1/2}, & \text{falls } x^{(1)} \geq |x^{(2)}| \\ 9x^{(1)} + 16x^{(2)}, & \text{falls } 0 < x^{(1)} < x^{(2)} \\ 9x^{(1)} - 16x^{(2)}, & \text{falls } 0 < x^{(1)} < -x^{(2)} \\ 9x^{(1)} + 16x^{(2)} - {x^{(1)}}^9, & \text{falls } x^{(1)} \leq 0 \leq x^{(2)} \\ 9x^{(1)} - 16x^{(2)} - {x^{(1)}}^9, & \text{falls } x^{(1)} \leq 0 \leq -x^{(2)} \end{cases}$$

und damit das folgende Bild



Am Ende von Abschnitt 3.1.2 hatten wir aber festgestellt, daß für diese Funktion tatsächlich nur eine Komponente von $N \setminus \Omega_f$ und eine von Ω_f notwendig sind. Eine Behandlung mittels fünf Komponenten von $N \setminus \Omega_f$ bzw. deren Abschluß ist aber gut geeignet, die interessanten Stellen zu erfassen. Ist die Funktion an Randpunkten der abgeschlossenen Komponenten (stetig) differenzierbar, so folgt dies zwangsläufig aus der Gleichheit der Einzelgradienten. Bei Wolfe ist dies beispielsweise für die Stelle $x = (1, 1)$ zu sehen, an der der Gradient der zweiten Einzelfunktion, der konstant $(9, 16)^t$ ist, mit dem der ersten Einzelfunktion übereinstimmt.

Die Realisierung der Zielfunktionen bedarf im allgemeinen einiger Vorarbeit, um die Bestandteile geeignet implementieren zu können. Die kompakte Menge N kennt man nicht von vornherein; auf ihre Einbindung wird verzichtet. Die Komponenten A_i müssen nicht explizit angegeben werden, wie die Beispiele der Form $f(x) = \max\{f_i(x) : i = 1, \ldots, m\}$ zeigen.

Die Darstellung einer programmierbaren, lokal Lipschiz stetigen Funktion im allgemeinen Fall in der Weise, daß sie durch Einzelfunktionen mit den Wegkomponenten als Gültigkeitsbereichen beschrieben wird, ergibt sich durch einen Induktionsbeweis. Man geht von den Standardfunktionen im Induktionsanfang aus und führt den Induktionsschritt durch, indem man lediglich erneut eine Standardfunktion oder eine arithmetische, logische oder Vergleichsoperation anwendet. Die letzten beiden Möglichkeiten treffen beispielsweise auf die Betragsfunktion zu. Die Wegkomponenten sind im Resultat nicht unbedingt explizit ablesbar.

7.3 Ergebnisse

Wir haben in den Rechnungen gemäß Algorithmus 6.3.1 mit $\varepsilon = 10^{-5}, \delta_0 = 10^{-15}$ und $\delta = 10^{-4}$ gearbeitet. Die Ergebnisse werden in zwei Tabellen dargestellt. In der ersten Tabelle kennzeichnet

$\#k$	die Anzahl der Iterationen,
$\#$(UP0)	die Anzahl der Aufrufe von (UP0),
$\#$(UP1)	die Anzahl der Aufrufe von (UP1),
κ	den Parameter zur Bildung von $\mathcal{I}_{\mathcal{A}}^{prog}(x_k, \kappa)$,
$\#f$ (UP0)	die Anzahl der Funktionsauswertungen bezüglich des Verfahrens mit (UP0),
$\#f$ (UP1)	die Anzahl der Funktionsauswertungen bezüglich des Verfahrens mit (UP1),

$\#F_k'$ (UP0)	die Anzahl der Auswertungen von F_k' bezüglich des Verfahrens mit (UP0) und
$\#F_k'$ (UP1)	die Anzahl der Auswertungen von F_k' bezüglich des Verfahrens mit (UP1).

					(UP0)		(UP1)	
Funktion	κ	$\#k$	# (UP0)	# (UP1)	$\#f$	$\#F_k'$	$\#f$	$\#F_k'$
Crescent	10^{-3}	5	5	0	18	16	0	0
CB 2	10^{-3}	14	7	7	51	22	21	14
CB 3	10^{-3}	15	9	6	52	28	16	12
DEM	10^{-3}	3	3	0	6	10	0	0
QL	10^{-2}	17	10	7	51	33	19	14
LQ	10^{-3}	8	8	0	38	26	0	0
Mifflin 1	10^{-3}	63	11	52	102	35	78	105
Mifflin 2	10^{-3}	20	20	0	87	77	0	0
Rosen	0.1	73	25	48	201	76	84	96
Maxq	10^{-2}	21	21	0	48	63	0	0
Maxl	10^{-2}	20	1	19	2	4	19	38
Shor	10^{-2}	43	22	21	174	67	177	40
Wolfe 1	10^{-2}	12	12	0	79	38	0	0
Wolfe 2	10^{-2}	3	3	0	18	12	0	0
Goffin	10^{-4}	120	120	0	369	385	0	0

In der zweiten Tabelle finden wir mit

x	den Iterationspunkt bei Abbruch und
$f(x)$	den Funktionswert in x bei Abbruch.

Zudem ist jeweils angemerkt, ob sich bei Abbruch x^* und $f(x^*)$ in X und $F(X)$ mit einer Inklusionsfunktion F für f befinden. Zum Teil befinden sich nur einzelne Komponenten der Lösung in der Box X.

Funktion	x	$f(x)$	$x^* \in X$	$f(x^*) \in F(X)$
Crescent	$\binom{6.667556 \cdot 10^{-8}}{-9.284920 \cdot 10^{-4}}$	$9.285782 \cdot 10^{-4}$	ja	ja
CB 2	$\binom{1.139211}{0.899342}$	1.952405		
CB 3	$\binom{1.000038}{0.999913}$	2.000099	ja	ja
DEM	$\binom{-8.848436 \cdot 10^{-4}}{-3.000009}$	-2.999567	ja	ja
QL	$\binom{1.20077}{2.399992}$	7.200624	2. Komp.	ja
LQ	$\binom{0.707177}{0.707177}$	-1.414155	ja	ja
Mifflin 1	$\binom{0.999991}{0.004913}$	-0.999882	1. Komp.	ja

Funktion	x	$f(x)$	$x^* \in X$	$f(x^*) \in F(X)$
Mifflin 2	$\begin{pmatrix} 0.999799 \\ -9.716579 \cdot 10^{-5} \end{pmatrix}$	-0.999900	2. Komp.	ja
Rosen	$\begin{pmatrix} 0.000891 \\ 1.000179 \\ 2.000120 \\ -0.998139 \end{pmatrix}$	-43.991432	nein	ja
Maxq	$\bar{x}$	$1.444593 \cdot 10^{-4}$	nein	nein
Maxl	0_{20}	0	ja	ja
Shor	$\begin{pmatrix} 1.124469 \\ 0.979402 \\ 1.477712 \\ 0.920093 \\ 1.124104 \end{pmatrix}$	22.602782	2.,3. Komp.	ja
Wolfe 1	$\begin{pmatrix} -1.000012 \\ -8.383360 \cdot 10^{-4} \end{pmatrix}$	-7.998659	ja	ja
Wolfe 2	$\begin{pmatrix} -1.000017 \\ 0 \end{pmatrix}$	-8	ja	ja
Goffin	$\begin{pmatrix} 35.922 \\ \vdots \\ 35.922 \end{pmatrix}$	0.004553	ja	ja

mit $\bar{x} = (-0.000100, -0.000300, \ldots, -0.001900, 0.002100, 0.002300, 0.002500, 0.002701, 0.002901, \ldots, 0.003701, 0.003801)^t$.

Wie bereits erwähnt, ist uns für CB2 keine exakte Lösung bekannt. Wir führen zum Vergleich die in [67] und [97] zitierten bzw. hergeleiteten Ergebnisse des ε-Bündel-Verfahrens nach Claude Lemaréchal [62] (M1FC1) und des Bundle-Trust-Verfahrens nach Helga Schramm [97] (BT) an. Dabei soll laut der angegebenen Quellen nf die Zahl der Funktions- und Subgradientenaufrufe enthalten. Genauere Angaben über die entsprechenden Zähler gibt es jedoch nicht. Leider ist auch für keine der Methoden der letzte Iterationspunkt, sondern lediglich der Funktionswert bei Abbruch des Verfahrens vermerkt.

	M1FC1			BT		
Funktion	$\#k$	nf	$f(x)$	$\#k$	nf	$f(x)$
Crescent	31	93	$2.2 \cdot 10^{-6}$	24	27	$9.4 \cdot 10^{-7}$
CB 2	11	31	1.952253	13	16	1.952225
CB 3	12	44	2.001415	13	21	2.000000
DEM	10	33	-3.000000	9	13	-3.000000
QL	12	30	7.200018	12	17	7.200009
LQ	16	52	-1.141420	10	11	-1.414214
Mifflin 1	143	281	-0.999967	49	74	-1.000000
Mifflin 2	30	71	-0.999993	6	13	-1.000000

	M1FC1			BT		
Funktion	$\#k$	nf	$f(x)$	$\#k$	nf	$f(x)$
Rosen	22	61	-43.99998	22	32	-43.99998
Maxq	144	207	0.000000	125	128	0.000000
Maxl	138	213	0.000000	74	84	0.000000
Shor	21	69	22.60018	29	30	22.60016
Goffin	72	194	46.2	50	53	0.000000

Das Beispiel von Wolfe wird dort nicht betrachtet. Andererseits finden wir in der Aufstellung der numerischen Ergebnisse in [67] auch die Rosenbrockfunktion sowie zwei weitere höherdimensionale Beispiele in Maxquad und TR48. Rosenbrock haben wir nicht betrachtet, da es ein schlecht konditioniertes aber glattes Beispiel ist, für das insbesondere (UP1) ungeeignet ist. Die anderen Beispiele waren in der Literatur nur unvollständig zu finden. Die Resultate des *Proximal Bundle* Verfahrens nach Mäkelä selbst zitieren wir nicht. Sie können in [67] nachgelesen werden. Wir möchten auf die ursprünglichen Methoden zurückgreifen, da auch unser Ansatz bisher noch sehr grundlegend ist und diese als motivierenden Ausgangspunkt besaß.

Die Funktion von Wolfe, für die in [113] ausgesagt wird, daß das Verfahren des steilsten Abstiegs für Startpunkte in $\{x : x^{(1)} > |x^{(2)}| > (9/16)^2|x^{(1)}|\}$ gegen $(0,0)^t$ konvergiert, wird mit einem Verfahren von Zhang und Sun in [111] für $x_0 = (1,1)^t$ getestet. Der dortige Algorithmus arbeitet mit innerer Approximation des ε-Subdifferentials. Zhang und Sun benötigen 25 Iterationen, 97 Funktions- und 202 Subgradientenauswertungen, um auf $f(x) = -8$ zu kommen. Wir haben daraufhin noch einen Test mit diesem Startpunkt ausgeführt und kamen auf annähernd dasselbe Ergebnis wie für $x_0 = (1, 0.5)^t$ in 13 Iterationsschritten unter Verwendung von (UP0) bei 89 Funktions- und 40 F'_k-Auswertungen.

Anzumerken ist weiterhin, daß bei den Funktionen Maxq und Goffin in der Liniensuche bezüglich (UP0) $v_k = -\|g_k^0\|$ mit g_k^0 gemäß Lemma 6.2.1 gesetzt wurde. Das Quadrat zu nehmen, ergäbe bei diesen Beispielen einen betragsmäßig zu hohen Parameter.

Shor bildet die einzige Ausnahme bezüglich der Initialisierung von t im Liniensuchalgorithmus, wie wir ihn im vorigen Kapitel beschrieben haben. Bei dieser Funktion haben wir die eindimensionale Suche auch unter Verwendung von (UP1) immer mit $t = 1$ gestartet, da vorhergehende Tests gezeigt haben, daß man ansonsten zuviel mögliche Schrittweite verschenkt.

7.3.1 Illustration eines Durchlaufs anhand von CB3

Wir möchten exemplarisch einen Programmdurchlauf genauer dokumentieren und daran das Problem von (UP0) und dessen Beseitigung durch (UP1) aufzeigen. Wir betrachten CB3,

$$f(x) = \max\{{x^{(1)}}^4 + {x^{(2)}}^2, (2 - x^{(1)})^2 + (2 - x^{(2)})^2, 2e^{-x^{(1)}+x^{(2)}}\}.$$

Hinter den Angaben obiger Tabellen verbirgt sich der folgende Verlauf, den wir in drei Abschnitte aufgeteilt haben:

			(UP0)		(UP1)			
$\#k$	# (UP0)	# (UP1)	$\#f$	$\#F_k'$	$\#f$	$\#F_k'$	x	$f(x)$
7	7	0	34	22	0	0	$\binom{1.037801}{0.941213}$	2.046856
3	2	1	18	6	4	2	$\binom{1.006343}{0.990387}$	2.006672
5	0	5	0	0	12	10	$\binom{1.000038}{0.999913}$	2.000099

Nach den ersten sieben Iterationen befindet man sich in der Nähe eines nichtdifferenzierbaren Punktes. Die Gradienten der Einzelfunktionen, die dort berücksichtigt werden, sind gegeben durch

$$\begin{pmatrix} 4{x^{(1)}}^3 \\ 2x^{(2)} \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \begin{pmatrix} -4 + x^{(1)} \\ -4 + x^{(2)} \end{pmatrix}.$$

Man erkennt direkt, daß $0 \in -F_k'$ ist, da der erste Gradient in beiden Komponenten positiv, der zweite dagegen in beiden Komponenten negativ ist. Das Verfahren unter Verwendung von (UP0) bricht also ab, ohne die lokale Minimalstelle $x^* = (1,1)^t$ hinreichend gut berechnet zu haben. Die Lösung von (UP1) ermöglicht einen Sprung über die problematische Stelle hinweg, und (UP0) wird noch zweimal aufgerufen. Im dritten Block des Verlaufs wird ausschließlich mit (UP1) gearbeitet. Dann nämlich befindet man sich bereits in der Nähe der Lösung, die selbst eine nichtdifferenzierbare Stelle von f ist und durch eine Verringerung des Abbruchparameters δ noch besser approximiert werden könnte.

7.3.2 Diskussion der Ergebnisse

Führt der Algorithmus 6.3.1 eine Iteration mit (UP1) durch, so ist die minimale Anzahl der Funktionsauswertungen gleich eins, da zu Beginn bereits Werte vorliegen und am Ende des Durchlaufs der neue Wert berechnet wird. Die minimale Anzahl der Auswertungen von F_k' ist gleich zwei, da diese Box zur Richtungssuche und zur Prüfung der Bedingung (6.6) benötigt wird. Im Fall von (UP0) kommt hier zusätzlich eine Auswertung zu Beginn der Liniensuche gemäß der Beschreibung im vorhergehenden Kapitel hinzu. Zudem wird vor Abbruch der Routine nochmals das Element minimaler Norm in F'_k generiert, auch wenn damit keine Richtung mehr bestimmt ist. Diese Minimalzahlen sollte man bei einer Betrachtung der Tabellen im Gedächtnis behalten.

Die Anzahl der Berechnungen von (UP1) müßte für jede Funktion um 1 erhöht werden, da am Ende stets eine Überprüfung des Abbruchkriteriums (AB1) erfolgt ist. Dies wurde jedoch nicht mehr als Iteration gezählt.

Die Anzahl der Auswertungen von F'_k ist nach obigen Überlegungen bezüglich (UP0) in allen Beispielen außer Goffin und Mifflin 2 höchstens um eins höher als die Minimalzahl. Für (UP1) ist sie nur bei Mifflin 1 um eins erhöht und beträgt ansonsten die Minimalzahl zwei.

Bei einer Analyse des Verfahrensverlaufs, wie sie aus den obigen Tabellen nicht ersichtlich ist, erkennt man sofort, daß bei ausschließlicher Anwendung von (UP1) durch die andere Initialisierung der Schrittweite im Liniensuchalgorithmus im k-ten Schritt durch t_{k-1} die Zahl der Funktionsauswertungen gering gehalten wird. In Verbindung mit dem ersten Ansatz, also (UP0), ist die Zahl generell höher. Das liegt daran, daß die Norm der Richtung häufig recht groß ist und eine vielfache Verkleinerung von t erfolgt, bis man den gewünschten Abstieg erreicht. Man könnte nun vermuten, daß eine Normierung der Suchrichtung auf 1 Abhilfe schafft, doch ist dies im allgemeinen nicht der Fall. Die Tests haben gezeigt, daß dadurch gerade zu Beginn des Verfahrens eher eine Verlangsamung der Konvergenz eintritt.

Es ist zu erwarten, daß ein Trust-Region-Zugang – zum Beispiel in der Form, wie wir ihn in Kapitel 4 vorgestellt haben – durchaus die Zahl der Funktionsauswertungen reduziert, unter Umständen unter Einbeziehung weiterer numerischer Varianten wie zum Beispiel Gewichtungen der einzelnen Subgradienten. Problematisch bleibt jedoch die praktische Umsetzung des Modells an sich, wie bereits festgestellt wurde. Eine direkte Einbindung der Trust-Region-Idee in den vorliegenden Algorithmus bringt keine Änderung (vgl. Bemerkung 4.1.1).

Bei der Betrachtung der Werte x und $f(x)$ nach Abbruch des Verfahrens fällt auf, daß sie zunächst nicht so gut wie die der anderen zitierten Algorithmen erscheinen. Das charakteristische Merkmal unseres Ansatzes ist jedoch das der Boxen und somit muß man sich darauf konzentrieren, ob die lokale Minimalstelle bei Abbruch des Verfahrens in der ε-Umgebung des Iterationspunktes bezüglich der Maximumsnorm liegt. Das ist bei den meisten Beipielen der Fall. Dort, wo dies nicht zutrifft, kann eine Verkleinerung der Konstanten δ, die den Abbruch des Verfahrens unter Verwendung von (UP1) steuert, zu einem besseren Ergebnis führen.

Die Iterationszahl schneidet im Vergleich mit BT und M1FC1 sehr gut ab. Dies gilt sowohl für (UP0) als auch für (UP1). Zum Teil liegt sie sogar stark unter den Zahlen, die die anderen Verfahren liefern. Das dürfte daran liegen, daß wir durch den Intervallansatz die Box X_k^ε betrachten und bei der Richtungsbestimmung tatsächlich alle *interessanten* Subgradienten erfassen. Im Falle von BT und M1FC1 wird mit der sogenannten *black box* gearbeitet, die besagt, daß zu jedem $x \in \mathbb{R}^n$ ein $g \in \partial f(x)$ berechnet werden kann. Hier ist es möglich, daß nicht der am besten geeignete Subgradient zur Betrachtung hinzugenommen wird. Interessant ist auch in diesem Zusammenhang der sehr gute Verfahrensverlauf bei der Funktion Maxl. Hier wird (UP0) nur im ersten Schritt gelöst; die übrigen 19 Iterationen werden mit (UP1) durchgeführt. Der Funktionswert sinkt in jedem Iterationsschritt um 1, die Folge (d_k) ist gegeben durch

$$d_k^t = (0_{n-k}^t, 1_k^t)$$

und t_k ist gleich 1 für $k = 0, \ldots, 19$.

Der globale Anschluß, der in [22] angeregt wird, soll noch einmal erwähnt werden. Die Idee, die in [95] wohl erstmalig zu finden ist und die besagt, durch ein globales Anschlußverfahren an eine lokale Methode sichere Fehlerabschätzungen zu erhalten, macht an dieser Stelle durchaus Sinn. Im allgemeinen ist x^* nicht im voraus bekannt, so daß eine entsprechende Untersuchung am Ende des Algorithmus wünschenswert ist. Kennt man hingegen $f(x^*)$ oder eine geeignete Abschätzung des Optimalwertes, mag dies vielleicht weniger sinnvoll sein, da durch diese Vorgabe bereits Einschätzungen über die Güte des Iterationspunktes bei Abbruch des Verfahrens gemacht werden können.

Die Größe des Parameters κ zur Bestimmung der Indexmenge $\mathcal{I}_{\mathcal{A}}^{prog}(x_k, \kappa)$ ist recht hoch gewählt. Dies führt aber nicht zu Ungenauigkeiten, sondern zu einem besseren Konvergenzverhalten, da ziemlich *früh* auch die anderen Gradienten berücksichtigt werden.

Der vorgestellte Ansatz ist gut praktikabel und umsetzbar. Verbesserungen sind im Bereich des eindimensionalen Unterproblems empfehlenswert.

7.4 Programmmodule

Die Programmierung wurde in C++ durchgeführt. Installiert wurden dazu die Pakete und Bibliotheken von O. Knüppel, die in [43], [53] - [57] beschrieben und auf dem ftp-Server der TU Hamburg-Harburg

ti3sun.ti3.tu-harburg.de

im Verzeichnis

/pub/profil

in gepackter Form verfügbar sind. Die entsprechenden Dokumentationen erhält man auf demselben Server im Verzeichnis

/pub/reports.

Die Realisierung besteht aus sieben C++-Modulen:

1. **boxopt.C** - Hauptsteuerungsmodul zur Regelung der Ein- und Ausgabe, Steuerung des Algorithmus und Durchführung der Liniensuche
2. **tools.C** - beinhaltet eine Funktion zur Steuerung der diversen Berechnungen wie $f(x)$, $\nabla f_i(x)$ etc. in Abhängigkeit von dem jeweiligen Testbeispiel sowie weitere (Hilfs-)Funktionen für die Erzeugung von X^ε, F'_k und $F(X)$ bezüglich der max-Funktionen und für die Bestimmung von $g_k = \arg\min\{\|p\| : p \in F'_k\}$
3. **fct.C** - $f(x)$ für sämtliche Testfunktionen und die gleichzeitige Bestimmung der jeweiligen Indexmengen $\mathcal{I}_{\mathcal{A}}^{prog}(x, \kappa)$
4. **fct_int.C** - $F(X)$ für alle Testfunktionen
5. **prime.C** - F'_k für alle Testfunktionen unter Verwendung der Hilfsroutinen aus tools.C
6. **subgr.C** - die (Sub-)gradienten der Einzelfunktionen in Abhängigkeit von $\mathcal{I}_{\mathcal{A}}^{prog}(x, \kappa)$
7. **simplex.C** - die Routine zur Lösung von (UP1) mit Hilfe des bereits erwähnten Simplexverfahrens nach W. Naylor einschließlich Überprüfung von (AB1)

Möchte man andere Funktionen betrachten, so sind die entsprechenden Realisierungen in die Module fct.C, fct_int.C, prime.C und subgr.C einzufügen, und die Auswahlfunktion in tools.C ist entsprechend zu ergänzen. Anschließend ist das Programm unter Einbindung der erwähnten Libraries neu zu compilieren.

Die obigen Quelldateien und lauffähige Versionen der Programme *boxopt* und *simplex* zum Test der implementierten Funktionen sowie eine kurze dazugehörige Anleitung findet man auf beiliegender Diskette bzw. nach Abschluß des Promotionsverfahrens auf dem Preprint-Server des Mathematischen Instituts der Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf, der von der Homepage aus erreichbar ist. Diese hat die Adresse

www.mathematik.uni-duesseldorf.de .

Kapitel 8

Verwandte Themen und Begriffe – Literatur und Ausblick

Wir geben in diesem abschließenden Kapitel einen kurzen Überblick über verwandte Bereiche, Themen und Begriffe der (nichtglatten) Optimierung. Wir erheben keinerlei Vollständigkeitsanspruch, sondern möchten vielmehr Ideen und Hinweise geben, die durch ausgewählte Literaturangaben ergänzt werden und den möglichen Einstieg in die jeweiligen Spezialgebiete erleichtern sollen. In Bezug auf restringierte Probleme geben wir einen ersten Ausblick, der zu unserem neuen Ansatz korrespondiert.

Nichtglatte Verfahren können in der Realisierung von **Strafkostenverfahren**, siehe [5], [18], [71], [87], [101], eine Rolle spielen, denn die Strafkostenfunktionen $\Phi(x,r) = f(x) + rp(x)$ zur Zielfunktion f enthalten häufig nichtglatte Strafterme $p(x)$. Der Strafterm kontrolliert die Zulässigkeit eines Punktes $x \in \mathbb{R}^n$ bezüglich der Menge M dadurch, daß $p(x) = 0$ für $x \in M$ und $p(x) > 0$ für $x \notin M$ gilt. Das Verfahren basiert dann auf der Idee, eine Folge von unrestringierten Problemen

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \Phi(x, r_k) \tag{8.1}$$

anstatt der gegebenen restringierten Aufgabe

$$\min_{x \in M} f(x)$$

für $M = \{x \in \mathbb{R}^n : h_i(x) \leq 0, g_j(x) = 0\}$ mit $i = 1, \dots, l$ und $j = 1, \dots, s$ zu lösen. Die Iterationsfolge (x_k) ist Folge der Lösungen von (8.1). Ein typischer nichtglatter Strafterm ist zum Beispiel die Funktion

$$p(x) = \sum_{i=1}^{l} \max\{0, h_i(x)\} + \sum_{j=1}^{s} |g_j(x)|.$$

Betrachtet man **restringierte Optimierungsprobleme** der Form

$$\min_{x \in M} f(x)$$

für $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ lokal Lipschitz stetig und

$$M := \{x \in \mathbb{R}^n : h_i(x) \leq 0, Ax \leq b\} \text{ für } i = 1, \dots, l,$$

$h_i : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ lokal Lipschitz stetig und $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $b \in \mathbb{R}^m$, so stellt sich die Frage, ob der in der vorliegenden Arbeit entwickelte Ansatz hierauf übertragbar ist.

Wir schlagen folgendes vor. Die Unterteilung von N durch die C^1-Komponenten wird ohne Berücksichtigung der *zulässigen Menge* M beibehalten. Diese Menge M geht erst in die Bestimmmung einer geeigneten Abstiegsrichtung ein. Zu der Menge $G(x_k)$ können unter der Voraussetzung der lokalen Lipschitzstetigkeit der $h_i, i = 1, \dots, l$, die Subdifferentiale $\partial h_i(x_k)$ für $h_i(x_k) = 0$ hinzugenommen werden. Die nach Bildung der konvexen Hülle und des Abschlusses entstehende Menge sei G_k^r. Die Restriktionen mit $h_i(x_k) < 0$ dürfen dabei vernachlässigt werden, da es für sie zu jedem $d \in \mathbb{R}^n$ ein $\lambda > 0$ gibt mit $h_i(x_k + \tau d) \leq 0$ für alle $\tau \in (0, \lambda)$. Die linearen Nebenbedingungen $A(x_k + d) \leq b$ sind problemlos als Restriktionen zu ergänzen. Man erhält

$$(\mathrm{UP1_r}) \quad \min_{\substack{d \in -F_k' \\ Ad \leq b - Ax_k}} \; \max_{\xi \in G_k^r} \xi^t d.$$

Eine Abstiegssicherung und Abschätzung wie in Kapitel 3 erhält man problemlos, wenn die Forderung

$$\partial h_i(x_k) \subseteq F_k' \text{ für } h_i(x_k) = 0$$

eingebunden wird.

Dieser Gedankengang erfordert lediglich eine Erweiterung der Idee, die hinter (UP1) steckt, und keine neue Theorie. Es sind sicherlich andere Lösungen zur

Behandlung restringierter Probleme obiger Form in der hergeleiteten Terminologie möglich.

Konzepte zur restringierten nichtglatten Optimierung liefern Mäkelä und Neittaanmäki in [67] oder auch Schramm in [97]. Mäkelä führt beispielsweise eine Gesamtrestriktion $H : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ ein, die definiert ist durch

$$h(x) := \max\{h_i(x) : i = 1, \dots, l\}$$

und für $x \in \mathbb{R}^n$ legt er eine Funktion $H(\cdot, x) : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ durch

$$H(y, x) := \max\{f(y) - f(x), h(y)\} \text{ für alle } y \in \mathbb{R}^n$$

fest. Diese Funktion H wird *Verbesserungsfunktion* in x genannt. Sie zeichnet sich dadurch aus, daß Zusammenhänge zwischen einer lokalen Minimalstelle von f und einer lokalen Minimalstelle von $H(\cdot, x)$ bestehen, die zum Ansatz eines Verfahrens genutzt werden können. Unter gewissen *Regularitätsbedingungen* besteht nicht nur eine notwendige sondern sogar hinreichende Beziehung zwischen diesen beiden Problemen. Man konstruiert eine konvexe Approximation von H, um diese im Algorithmus zu verwenden. Einzelheiten findet man in [67].

Nur selten liegen Problemstellungen mit Voraussetzungen in dieser allgemeinen Form vor. Oftmals werden Forderungen wie die stetige Differenzierbarkeit oder Konvexität an die Restriktionen gestellt. Schramm [97] behandelt konvexes f und konvexe h_i. In [101] findet man für eben diese Situation eine Formulierung der notwendigen Bedingungen erster Ordnung, die unter dem Begriff der **(Karush-)Kuhn-Tucker-Bedingungen** bereits aus der glatten Optimierung bekannt sind, siehe [5], [18], [66].
Dabei wird die *Lagrangefunktion* $L : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^l \to \mathbb{R}$,

$$L(x, u) = f(x) + \sum_{i=1}^{l} u_i h_i(x)$$

mit $u_i \geq 0, 1 \leq i \leq l$, benutzt. Die Koeffizienten u_i sind die sogenannten *Lagrange-Multiplikatoren*.
Diese Begriffe, die auf die *Dualitätstheorie* hinführen, gibt es also auch im nichtglatten Bereich. Kuhn-Tucker-Sätze gibt es in vielen Varianten unter verschiedenen Voraussetzungen an die Problemstellung. Für den konvexen Fall gehen auch Hiriart-Urruty und Lemaréchal in [36] darauf ein. Mäkelä und Neittaanmäki [67] erarbeiten Verallgemeinerungen für die Situation einer lokalen Minimalstelle x von f lokal Lipschitz stetig über einer Menge G, die

bestimmt ist durch

$$G = \{y \in \mathbb{R}^n : F(y) \leq 0\}$$

mit $F(y) = \max\{F_i(y) : i = 1, \ldots, m\}$ für $F_i : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ lokal Lipschitz stetig unter der Voraussetzung entweder $F(x) < 0$ oder $0 \notin \partial F(x)$.

Die Kuhn-Tucker-Bedingungen finden wir auch bei Ye [110]. Ye betrachtet zunächst das Problem der Minimierung einer lokal Lipschitz stetigen Funktion unter nichtlinearen lokal Lipschitz stetigen Ungleichheitsrestriktionen. Sein Algorithmus bezieht sich dann aber auf stetig differenzierbare Nebenbedingungen. Er versteht seine Methode projizierter Subgradienten als eine Verallgemeinerung und Verbesserung eines Verfahrens von Sreedharan [103] und [104], das wir erwähnen, da es mit einer Indexmenge arbeitet, die unserer Menge $\mathcal{I}_{\mathcal{A}}^{prog}(x, \kappa)$ entspricht. Die dortige Problemstellung lautet

$$\min_{\substack{g_i(x) \leq 0 \\ 1 \leq i \leq m}} f(x) + v(x),$$

wobei

$$v(x) = \max\{v_j(x) : 1 \leq j \leq r\}$$

ist und f, v_j, g_i konvex und differenzierbar sind. Zahlreiche weitere und oft auf spezielle Voraussetzungen abgestimmte Verfahren zur Bestimmung lokaler Lösungen nichtglatter Probleme sind in der Literatur zu finden und werden ständig weiterentwickelt.

Da der in [17] und [109] vorkommende Begriff der *composite functions* ein wenig an unsere Vorgehensweise erinnert, möchten wir betonen, daß keine Analogie besteht. Fletcher legt in [17] eine Funktion $\Phi : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ zugrunde mit

$$\Phi(x) = f(x) + h(c(x))$$

für eine konvexe Funktion f und C^1-Funktionen h und c.

Ein anderer großer Bereich der nichtglatten Optimierung beschäftigt sich mit globalen Verfahren. Das betrifft vor allem die bekannten Methoden der Intervallarithmetik, die auf **Branch and Bound**-Ideen basieren, also den zu betrachtenden Bereich sukzessive aufteilen und die Funktionswerte über den Teilbereichen geeignet abschätzen. Diese Methoden, die wir nicht näher betrachten werden, sind oft unter recht geringen Voraussetzungen an die

Zielfunktion anwendbar. Diesbezügliche Literaturhinweise wurden in Kapitel 2 zu der Frage einer möglichen globalen Fortsetzung des dort vorgestellten Algorithmus gegeben. Eine neue Idee finden wir in [112].

Im Zusammenhang mit notwendigen Optimalitätsbedingungen für restringierte Probleme stellt sich die Frage, ob anhand derer lokale Verfahren entwickelt werden können. Im glatten Fall besteht die Berechnung eines Karush-Kuhn-Tucker-Punktes in der Lösung eines Gleichungssystems mit den Komponenten der lokalen Minimalstelle und den Lagrange-Multiplikatoren als Unbekannten. Bei nichtglatten Problemen kann lediglich eine Inklusion der Form

$$0 \in \partial f(x) + \sum_{i=1}^{l} u_i \partial h_i(x)$$

in Verbindung mit weiteren Bedingungen angestrebt werden. Das ist beispielsweise gut durch **Intervall-Newton-Verfahren** möglich, deren Ziel die Bestimmung aller Nullstellen einer Funktion $G : X \to \mathbb{R}^m, X \in \mathbb{I}(\mathbb{R}^m)$ ist. Wichtig ist dabei der Begriff der Lösungsmenge X von $Ax = B$ bzw. $AX = B$ mit $A \in \mathbb{I}(\mathbb{R}^{m\times m}), B \in \mathbb{I}(\mathbb{R}^m)$. Sie ist festgelegt durch

$$X = \{x \in \mathbb{R}^m : ax = b \text{ für ein } a \in A, b \in B\}.$$

Im allgemeinen ist dies keine Box, weshalb das Hauptziel der Verfahren darin besteht, zumindest eine Box zu berechnen, die diese Lösungsmenge enthält. Die Entwicklung der Intervall-Newton-Methoden wird durch [2], [28], [29], [58], [59], [77], [80] und [82] charakterisiert. Einen Überblick gewinnt man bei [30], [48], [81] und [86]. Eine Rolle spielen oft die bekannten Slopes und verwandte Konstruktionen, um die Ableitungsinformation zu ersetzen, die das ursprüngliche Newtonverfahren benötigt. Damit ist die Klasse der Funktionen groß, auf die das Verfahren angwendet werden kann.

Eine weitere Möglichkeit, die die Intervallarithmetik bietet und die in unserer Terminologie interessant sein könnte, ist die Betrachtung **unbeschränkter Intervalle** und die damit verbundene **erweiterte Intervallarithmetik**. Genaue Ausführungen finden wir in [86] und [89]. Erste Ansätze hierzu stammen von Alefeld [1]. Globale Optimierungsverfahren in [86] arbeiten erfolgreich mit dieser Übertragung, die beispielsweise für eine Funktion wie

$$f(x) = \sqrt{(1 - x^2)}$$

wichtig ist, denn hier gilt $f'(x) \to \mp\infty$ für $x \to \pm 1$.
Die erweiterte Arithmetik wird für nichtkompaktifizierte unbeschränkte Intervalle der Form $[a, \infty) \subseteq \mathbb{R}$ entwickelt. Sowohl diese als auch solche der

kompaktifizierten Form $[a,\infty] \subseteq \mathbb{R}$ werden vom Rechner im Falle einer Implementierung durch **Maschinenintervalle** $[a, L]$ realisiert, wobei L die Zahlen von L bis ∞ repräsentiert. Man kann also untersuchen, inwieweit diese erweiterte Arithmetik die Behandlung einer größeren Klasse von Funktionen durch unseren Ansatz ermöglicht.

In Verbindung mit Konvergenzbetrachtungen für Verfahren der nichtglatten Optimierung möchten wir ein Hilfsmittel von Polak und Mayne [69] nicht unerwähnt lassen, das auch im Zusammenhang mit ihrem allgemeinen Ansatz in [70] zu sehen ist und von dem bereits zitierten Ye für den Konvergenznachweis seines Algorithmus verwendet wird. Mit der Beobachtung, daß das Verfahren des steilsten Abstiegs an der fehlenden Unterhalbstetigkeit der Abbildung $x \mapsto \partial f(x)$ scheitert, definieren Polak und Mayne sogenannte *Familien konvergenter Abbildungen zur Richtungssuche* $\{G_\varepsilon f(\cdot)\}_{\varepsilon>0}$, $G_\varepsilon f(\cdot) : \mathbb{R}^n \to \wp(\mathbb{R}^n)$ für eine lokal Lipschitz stetige Funktion f. Diese sichern Konvergenzeigenschaften zugehöriger Verfahren in Kombination mit geeigneter unexakter Liniensuche. Die Idee hinter dieser Definition ist das Erreichen einer *fast Stetigkeit* und die Betrachtung einer größeren Menge, als $\partial f(x)$ es ist. Das Konzept dieser Familien konvergenter Abbildungen zur Richtungssuche kann auf unseren Ansatz nicht übertragen werden, da die entsprechende Abbildung $x_k \mapsto G_k$ die definierenden Eigenschaften nicht erfüllt. Lediglich im Fall der C^1-Einzelfunktionen müßte eine Übertragung möglich sein, so daß wir einen alternativen Konvergenzbeweis erhielten. Anwendbar ist die Methodik für den Ansatz der ε-Bündel-Verfahren, wenn von einer vollständigen Berechnung der ε-Subdifferentiale ausgegangen wird.

Im Rahmen eines Studiums der ε-Bündel-Verfahren stößt man auf die Begriffe **primaler und dualer Bündel-Verfahren**, vor allem bei Lemaréchal in [37] und [65]. Hiermit ist eine Unterscheidung des theoretischen Zugangs gemeint. Unter dem dualen Vorgehen versteht man die Bestimmung eines Subgradienten als Suchrichtung, während man mit dem primalen Ansatz das Ersetzen der Zielfunktion durch eine geeignete Approximation meint. Wir haben bisher stets den dualen Zugang mit dem Begriff der Bündel-Verfahren verbunden. Die primale Sichtweise basiert nach [37] auf Schnittebenenverfahren, und man kommt auf die Trust-Region Idee. In [65] wird eine Dualität der primalen und dualen Techniken gezeigt, indem verschiedene Sichtweisen zur Stabilisierung des Schnittebenenansatzes vorgestellt und zueinander in Beziehung gesetzt werden – Trust-Region-Ansatz, Strafkostenansatz und Niveauansatz sind die entsprechenden Schlagworte hieraus.

Wir haben unsere Arbeit auf den Differenzierbarkeitsbegriff und die Definition des Subdifferentials nach Clarke [8] gestützt, was auch für die ε-Bündel-Verfahren gilt. Andere Möglichkeiten bieten beispielsweise *quasi differenzierbare* oder *codifferenzierbare* Funktionen nach Demyanov und Rubinov [12] und [14] – Verfahren dazu findet man unter anderem in [13] – oder die *fast differenzierbaren* Funktionen nach Shor [99], um nur drei Varianten zu erwähnen. Sie werden auch in [101] erläutert. Ergänzende Ergebnisse findet man in [9]. In [14] werden diverse notwendige und teilweise hinreichende Kriterien für Extremalstellen auf der Grundlage der verschiedenen Differenzierbarkeitsbegriffe gegeben.

Auf einen weiteren Begriff gehen wir kurz ein. Mifflin definiert in [72] eine Funktion $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ als *halbglatt* in x, wenn folgendes gilt:

> f ist lokal Lipschitz stetig in x, und
> für jedes $d \in \mathbb{R}^n$ und für beliebige Folgen $(t_k) \subseteq \mathbb{R}^{>0}, (\theta_k) \subseteq \mathbb{R}^n$ und $(g_k) \subseteq \mathbb{R}^n$ mit $t_k \downarrow 0$, $\theta_k/t_k \to 0_n$ und $g_k \in \partial F(x + t_k d + \theta_k)$ besitzt die Folge $(g_k^t d)$ genau einen Häufungspunkt.

Diese Definition hat zur Folge, daß die Richtungsableitung $f'(x, d)$ für jedes $d \in \mathbb{R}^n$ existiert und gleich $\lim g_k^t d$ für jede Folge (g_k) mit den obigen Eigenschaften ist. Eine Funktion, die dieser Definition nicht genügt, jedoch lokal Lipschitz stetig auf $\mathbb{R}$ ist, ist gegeben durch

$$f(x) = \begin{cases} x^2 \sin(1/x), & \text{falls } x \neq 0 \\ 0, & \text{falls } x = 0 \end{cases} .$$

Hierfür gilt $f'(0,1) = 1, \partial f(0) = [-1,1]$, und $[-1,1]$ ist auch die Menge möglicher Häufungspunkte von $f'(x,1)$ für $x \to 0$. Mit den Kenntnissen über das Subdifferential kann aber durchaus die einschließende Subgradientenbox mit den beschriebenen Mitteln konstruiert werden. Es besteht demnach kein Grund, unseren Ansatz nicht auf das Beispiel übertragen zu können. Dies betrifft dann auch die Ergebnisse in Bezug auf die Liniensuche. Wir betonen diese Tatsache deshalb, weil in [61] von Lemaréchal die Halbglattheit gefordert ist, um eine Endlichkeit des Liniensuchalgorithmus zu erzielen.

Zusammenfassung

Wir haben einen Ansatz zur Bestimmung einer lokalen Lösung des Optimierungsproblems $\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x)$ für eine lokal Lipschitz stetige Funktion $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ entwickelt. Grundlagen waren zum einen die Konstruktion einer einschließenden Subgradientenbox

$$F'_k \supseteq \bigcup_{u \in X_k^\varepsilon} \partial f(u)$$

mit Techniken der Intervallarithmetik und zum anderen die Aufspaltung der zu betrachtenden kompakten Menge N unter Berücksichtigung der Nullmenge Ω_f in N, über der die Zielfunktion f nicht differenzierbar ist. Mit Hilfe der Unterteilung in C^1-Komponenten von $N \setminus \Omega_f$ und Ω_f werden geeignete Subdifferentiale zu einer Menge $G(x_k)$ zusammengefaßt und mit deren konvexem Abschluß G_k wird das Unterproblem

$$\min_{d \in -F'_k} \max_{\xi \in G_k} \xi^t d$$

zur Bestimmung einer Suchrichtung definiert. Wir haben Konvergenzeigenschaften des Algorithmus untersucht, der mit diesem Unterproblem und einer exakten Liniensuche arbeitet, und ihn für den Fall der C^1-Einzelfunktionen implementiert. Die numerischen Ergebnisse sind vielversprechend und durch gute Iterationszahlen geprägt. Dahinter steckt die Berechnung von F'_k auf der Basis intervallarithmetischer Techniken. Die Verknüpfung dieser Methodik mit einem lokalen Verfahren der ε-Bündelform ist neu.

Eine Weiterentwicklung der Ideen ist im Bereich der restringierten Probleme, der Konstruktion der einschließenden Subgradientenbox – auch im Hinblick auf die erwähnte erweiterte Intervallarithmetik und Slopetechnik – und bei der Betrachtung unterschiedlicher Funktionenklassen auf der Basis des Einzelfunktionenmodells sinnvoll. Ein anderer Schwerpunkt kann bei der Untersuchung des vorgeschlagenen Trust-Region-Modells gesetzt werden.

Literaturverzeichnis

[1] G. Alefeld, Intervallrechnung über den komplexen Zahlen und einige Anwendungen, Thesis, Universität Karlsruhe, 1968.

[2] G. Alefeld und J. Herzberger, *Introduction to Interval Computations*, Academic Press, New York, 1983.

[3] I.P. Androulakis, C.D. Maranas, und C.A. Floudas, αBB: A global optimization method for general constrained nonconvex problems, J. Global Optimiz. 7, 337-363, 1995.

[4] A. Auslender et al. (eds.), *Lecture Notes in Control and Information Sciences, Vol. 30*, Springer-Verlag, Berlin, 1981.

[5] M.S. Bazaraa, H.D. Sherali und C.M. Shetty, *Nonlinear Programming Theory and Algorithms*, Sec. Ed., John Wiley, New York, 1993.

[6] S. Berner, *Ein paralleles Verfahren zur verifizierten globalen Optimierung*, Ph. D. thesis, Wuppertal 1995.

[7] C. Charalambous und A.R. Conn, An efficient method to solve the minimax problem directly, SIAM J. Num. Anal. Vol.15, No.1, 162-187, 1978.

[8] F.H. Clarke, *Optimization and Nonsmooth Analysis*, SIAM, New York, 1983.

[9] F.H. Clarke et al., *Nonsmooth Analysis and Control Theory*, Springer, New York, 1998.

[10] G.B. Dantzig, A. Orden und P. Wolfe, Generalized Simplex Method for Minimizing a Linear Form under Linear Inequality Restraints, Pacific J. Math. Vol. 5, 183-195, 1955.

[11] V.F. Demyanov und V.N. Malozemov, *Introduction to Minimax*, John Wiley, New York-Toronto, 1974.

[12] V.F. Demyanov und A.M. Rubinov, On quasidifferentiable functionals, Soviet Mathematics Doklady 21, 14-17, 1980.

[13] V.F. Demyanov und L.V. Vasiliev, *Nondifferentiable Optimization*, Optimization Software Inc./Springer, New York, 1985.

[14] V.F. Demyanov und A.M. Rubinov, *Constructive Nonsmooth Analysis*, Verlag Peter Lang, Frankfurt am Main, 1995.

[15] J.E. Dennis und R.E. Schnabel, *Numerical Methods for Unconstrained Optimization and Nonlinear Equations*, Prentice Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, 1983.

[16] Y.G. Evtushenko und M.A. Potapov, Deterministic Global Optimization, In [102], 481-500.

[17] R. Fletcher, A Model Algorithm for Composite Nondifferentiable Optimization Problems, Math. Program. Study 17, 67-69, 1982.

[18] R. Fletcher, *Practical Methods of Optimization*, Wiley, New York, 1987.

[19] J. Franklin, *Methods of Mathematical Economics*, Springer-Verlag, 1980.

[20] F. Giannessi (ed.), *Nonsmooth Optimization: Methods and Applications*, Gordon and Breach, Philadelphia, 1992.

[21] Ph.E. Gill, W. Murray und M.H. Wright, *Practical Optimization*, Academic Press, London, 1981.

[22] Ch. Görges und H. Ratschek, Global Interval Methods for Local Nonsmooth Optimization, J. Global Optimiz., erscheint demnächst.

[23] Ch. Görges und H. Ratschek, ε-Intervals in Nonsmooth Optimization, In [25], 75-89.

[24] A.A. Goldstein, Optimization of Lipschitz continuous functions, Math. Program. 13, 14-22, 1977.

[25] P. Gritzmann et al. (eds.), *Recent advances in optimization: proceedings of the 8th French German Conference on Optimization, Trier 1996*, Springer-Verlag, Berlin, 1996.

[26] N. Gupta, A higher than First Order Algorithm for Nonsmooth Constrained Optimization, Diss., Washington State University, 1985.

[27] R. Hammer, M. Hocks, U. Kulisch und D. Ratz, *Numerical Toolbox for Verified Computing I*, Springer-Verlag, Berlin, 1993.

[28] E. Hansen und S. Sengupta, Bounding solutions of systems of equations using interval analysis, BIT 21, 203-211, 1981.

[29] E.R. Hansen und R.I. Greenberg, An interval Newton method, Appl. Math. & Comput. 12, 89-98, 1983.

[30] E. Hansen, *Global Optimization Using Interval Analysis*, Dekker, New York, 1992.

[31] P. Hansen, B. Jaumard und Ski-Hin Lu, An analytical approach to global optimization, Math. Program. 52, 227-254, 1991.

[32] P. Hansen, B. Jaumard und J. Xiong, Decomposition and interval arithmetic applied to the global minimization of polynomial and rational functions, J. Global Optimiz. 3, 421-437, 1993.

[33] P. Hansen, B. Jaumard, Lipschitz Optimization. In [38], 407-493.

[34] H. Herzberger (ed.), *Topics in Validated Computations*, Elsevier, Amsterdam, 1994.

[35] F. Hillier und G. Lieberman, *Introduction to Operations Research*, Holden-Day Inc., 1986.

[36] J.-B. Hiriart-Urruty und C. Lemaréchal, *Convex Analysis and Minimization Algorithms I*, Springer-Verlag, Berlin, 1993.

[37] J.-B. Hiriart-Urruty und C. Lemaréchal, *Convex Analysis and Minimization Algorithms II*, Springer-Verlag, Berlin, 1993.

[38] R. Horst und P.M. Pardalos (eds.), *Handbook of Global Optimization*, Kluwer, Dordrecht, 1995.

[39] R. Horst, P.M. Pardalos und N.V. Thoai, *Introduction to Global Optimization*, Kluwer, Dordrecht, 1995.

[40] R. Horst und H. Tuy, *Global Optimization: Deterministic Approaches*, Springer-Verlag, Berlin, 1990.

[41] W. Huyer und A. Neumaier, Global Optimization by Multilevel Coordinate Search, J. Global Optimiz., erscheint demnächst.

[42] C. Jansson, On self-validating methods for optimization problems. In [34], 381-438.

[43] C. Jansson und O. Knüppel, Numerical Results for a Self-Validating Global Optimization Method, Berichte des Forschungsschwerpunktes Informations- und Kommunikationstechnik Technische Universität Hamburg-Harburg, Bericht 94.1, Februar 1994.

[44] C. Jansson und O. Knüppel, A branch and bound algorithm for bound constrained optimization problems without derivatives, J. Global Optimiz. 7, 297-331, 1995.

[45] R.B. Kearfott, A review of techniques in the verified solution of constrained global optimization problems. In [47], 23-59.

[46] R.B. Kearfott, Interval extensions of non-smooth functions for global optimization and nonlinear systems solvers, Computing 57, 149-162, 1996.

[47] R.B. Kearfott und V. Kreinovich (eds.), Applications of Interval Computations, Kluwer, Dordrecht, 1996.

[48] R.B. Kearfott, *Rigorous Global Search: Continuous Problems*, Kluwer, Dordrecht, 1996.

[49] K.C. Kiwiel, *Methods of Descent in Nonsmooth Optimization*, Springer-Verlag, Berlin, 1985.

[50] K.C. Kiwiel, An ellipsoid trust region bundle method for nonsmooth convex minimization, SIAM J. Control & Optimiz. 27, 737-757, 1989.

[51] K.C. Kiwiel, A restricted step proximal bundle method for nonconvex nondifferentiable optimization, In [20], 175-188.

[52] K.C. Kiwiel, Restricted step and Levenberg-Marquardt techniques in proximal bundle methods for nonconvex nondifferentiable optimization, SIAM J. Optimiz. 6, 227-249, 1996.

[53] O. Knüppel, BIAS - Basic Interval Arithmetic Subroutines, Berichte des Forschungsschwerpunktes Informations- und Kommunikationstechnik Technische Universität Hamburg-Harburg, Bericht 93.3, Juli 1993.

[54] O. Knüppel, PROFIL - Programmer's Runtime Optimized Fast Interval Library, Berichte des Forschungsschwerpunktes Informations- und Kommunikationstechnik Technische Universität Hamburg-Harburg, Bericht 93.4, Juli 1993.

[55] O. Knüppel und Th. Simenec, PROFIL/BIAS Extensions, Berichte des Forschungsschwerpunktes Informations- und Kommunikationstechnik Technische Universität Hamburg-Harburg, Bericht 93.5, November 1993.

[56] O. Knüppel, A Multiple Precision Arithmetic for PROFIL, Berichte des Forschungsschwerpunktes Informations- und Kommunikationstechnik Technische Universität Hamburg-Harburg, Bericht 93.6, November 1993.

[57] O. Knüppel, A PROFIL/BIAS Implementation of a Global Minimization Algorithm, Berichte des Forschungsschwerpunktes Informations- und Kommunikationstechnik Technische Universität Hamburg-Harburg, Bericht 95.4, Oktober 1995.

[58] R. Krawczyk, Newton-Algorithmen zur Bestimmung von Nullstellen mit Fehlerschranken, Computing 4, 187-201, 1969.

[59] R. Krawczyk, A class of interval Newton operators, Computing 37, 179-183, 1986.

[60] R. Krawczyk und A. Neumaier, Interval Slopes for Rational Functions and Associated Centered Forms, SIAM J. Num. Anal. 22, 604-616, 1985.

[61] C. Lemaréchal, A view of line-searches. In [4].

[62] C. Lemaréchal und M. Bancora Imbert, Le Module M1FC1, INRIA, Le Chesnay, 1985.

[63] C. Lemaréchal, Nondifferentiable Optimization. In [79].

[64] C. Lemaréchal, Langrangian decomposition and nonsmooth optimization: Bundle algorithm, prox iteration, augmented Lagrangian. In [20], 201-216.

[65] C. Lemaréchal und J. Zowe, A condensened introduction to bundle methods in nonsmooth optimization, In [102], 357-382.

[66] D.G. Luenberger, *Introduction to Linear and Nonlinear Programming*, Addison-Wesley, Mass., 1973.

[67] M. Mäkelä und P. Neittaanmäki, *Nonsmooth Optimization - Analysis and Algorithms with Applications to Optimal Control*, World Scientific, Singapore, 1992.

[68] D.Q. Mayne und E. Polak, Outer approximation algorithm for nondifferentiable optimization problems, J. Optimiz. Theory & Appl. 42, 19-30, 1984.

[69] D.Q. Mayne und E. Polak, Algorithm Models for nondifferentiable optimization, SIAM J. Control & Optimiz. 23, 477-491, 1985.

[70] D.Q. Mayne, E. Polak und Y. Wardi, On the extension of constrained optimization algorithms from the differentiable to nondifferentiable functions, SIAM J. Control & Optimiz. 21, 179-203, 1983.

[71] G. P. McCormick, *Nonlinear Programmming*, Wiley, New York, 1983.

[72] R. Mifflin, Semismooth and Semiconvex Functions in Constrained Optimization, SIAM J. Control & Optimiz. 15, 959-972, 1977.

[73] R. Mifflin, A modification and an extension of Lemaréchal's algorithm for nonsmooth minimization, Math. Program. Study 17, 77-90. 1982.

[74] R. Mifflin, Ideas for developing a rapidly convergent algorithm for nonsmooth minimization. In [20], 228-239.

[75] R. Mifflin, A quasi-second-order proximal bundle algorithm, Math. Program. 73, 51-72, 1996.

[76] R.E. Moore, Interval Arithmetic and automatic error analysis in digital computation, Ph.D. Thesis, Stanford University, 1962.

[77] R.E. Moore, *Interval Analysis*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, N.J., 1966.

[78] R.E. Moore, R.E. (ed.), *Reliability in Computing: The Role of Interval Mathematics*, Academic Press, San Diego, 1988.

[79] Nemhauser et al., *Handbooks in Operation Research & Management Science, Vol.I Optimization*, Elsevier Science Publishers B.V., Amsterdam, 1989.

[80] A. Neumaier, Interval iteration for zeroes of systems of equations, BIT 25, 256-273, 1985.

[81] A. Neumaier, *Interval Methods for Systems of Equations*, Cambridge University Press, Cambridge, 1990.

[82] K. Nickel, On the Newton method in interval analysis, Mathematics Research Center Report 1136, University of Wisconsin, 1971.

[83] J.D. Pintér, *Global Optimization in Action*, Kluwer, Dordrecht, 1996.

[84] H. Ratschek, Some recent aspects of interval algorithms for global optimization. In [78], 325-339.

[85] H. Ratschek J. und Rokne, *Computer Methods for the Range of Functions*, Horwood, Chichester, 1984.

[86] H. Ratschek und J. Rokne, *New Computer Methods for Global Optimization*, Horwood, Chichester, 1988.

[87] H. Ratschek, Mathematische Optimierung I, Vorlesung gehalten an der HHU Düsseldorf im Wintersemester 1992/93.

[88] H. Ratschek und J. Rokne, Interval Methods. In [38], 751-828, 1995.

[89] H. Ratschek und R. Voller, Unconstrained optimization over unbounded domains, SIAM J. Control & Optimiz. 28, 528-539, 1990.

[90] D. Ratz, Automatische Ergebnisverifikation bei globalen Optimierungsproblemen. Ph. D. thesis, Karlsruhe, 1992.

[91] D. Ratz und T. Csendes, On the selection of subdivision directions in interval branch-and-bound methods for global optimization, J. Global Optimiz. 7, 183-207, 1995.

[92] D. Ratz, A Nonsmooth Global Optimization Technique Using Slopes - The One-Dimensional Case, J. Global Optimiz., erscheint demnächst.

[93] D. Ratz, Automatic Slope Computation and its Application in Nonsmooth Global Optimization, Habilitationsschrift, eingereicht an der Universität Karlsruhe (TH), 1998.

[94] R.T. Rockafellar, *Convex Analysis*, Princeton University Press, New Jersey, 1970.

[95] S.M. Robinson, Computable error bounds for nonlinear programming, Mathem. Progr. 5, 235-242, 1973.

[96] K. Schittkowski (ed.), *Computational Mathematical Programming*, Springer-Verlag, Berlin, 1985.

[97] H. Schramm, Eine Kombination von Bundle- und Trust-Region-Verfahren zur Lösung nichtdifferenzierbarer Optimierungsprobleme. Bayreuther Mathematische Schriften, Heft 30, Bayreuth, 1989.

[98] H. Schramm and J. Zowe, A version of the bundle idea for minimizing a nonsmooth function: Conceptual idea, convergence analysis, numerical results. SIAM J. Optimiz. 2, 121-152, 1992.

[99] N.Z. Shor, On a method for minimizing almost differentiable functions, Kibernetika (Kiev) 4, 65-70, 1972.

[100] N.Z. Shor, *Minimization Methods for Nondifferentiable Functions*, Springer-Verlag, Berlin, 1985.

[101] N.Z. Shor, *Nondifferentiable Optimization and Polynomial Problems*, Kluwer, Dordrecht, 1998.

[102] E. Spedicato (ed.), *Algorithms for Continuous Optimization: The State of Art,* Kluwer, Dordrecht, 1994.

[103] V.P. Sreedharan, Subgradient Projection Algorithm I, J. Approx. Theory 41, 217-243, 1986.

[104] V.P. Sreedharan, Subgradient Projection Algorithm II, J. Approx. Theory 47, 228-239, 1984.

[105] V. Stahl, Interval methods for bounding the range of polynomials and solving systems of linear equations. Ph. D. thesis, Linz, 1995.

[106] A.A. Törn und A. Žilinkas, *Global Optimization*, Springer-Verlag, 1989.

[107] P. Wolfe, A method of conjugate subgradients for minimizing nondifferentiable functions, Mathem. Progr. Study 3, 145-173, 1975.

[108] M.A. Wolfe und L.S. Zhang, An interval algorithm for nondifferentiable global optimization, Appl. Math. & Comput. 63, 101-122, 1994.

[109] R.S. Womersley und R. Fletcher, An Algorithm for Composite Nonsmooth Optimization Problems, J. Optimiz. Theory & Appl. 48, No. 3, 493-523, 1986.

[110] X. Ye, Subgradient Projection Algorithms for Constrained Nonsmooth Optimization II: Nonlinear Constraints, Optimiz. Vol. 24, 75-90, 1992.

[111] L.S. Zhang und X.L. Sun, An Algorithm for Minimizing a Class of Locally Lipschitz Functions, J. Optimiz. Theory & Appl. 90, No. 1, 203-212, 1996.

[112] H. Zhenyu, An Interval Entropy Penalty Method for Nonlinear Global Optimization, Reliable Comp., 4, 15-25, 1998.

[113] J. Zowe, Nondifferentiable Optimization. In [96], 323-356.