

Parallele Raumzerlegungsverfahren für Optimierungsprobleme mit Anwendungen auf Parameteridentifikationsaufgaben

Von der Fakultät für Mathematik und Informatik
der Technischen Universität Bergakademie Freiberg

genehmigte

Dissertation

zur Erlangung des akademischen Grades
doctor rerum naturalium
(Dr.rer.nat.)

vorgelegt von

Diplom–Mathematiker Sven Michael Keesmann
geboren am 10. Mai 1971 in Kinshasa (damals Zaïre)

Gutachter: Prof. Dr.rer.nat. habil. Wolfgang Mönch, Freiberg
Prof. Dr.rer.nat. habil. Andreas Frommer, Wuppertal
Prof. Dr.rer.nat. habil. Christian Großmann, Dresden

Tag der Verleihung: 2. Dezember 2002

Vorwort

We have learned more than we thought possible [...]. [18]

Die vorliegende Arbeit entstand als Stipendiat im DFG–Graduiertenkolleg *Transportvorgänge in porösen Systemen der Verfahrens- und Geotechnik* am Institut für Angewandte Mathematik II sowie während meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter an den Instituten für Wärme- und Automatisierungstechnik der Technischen Universität Bergakademie Freiberg.

Bei Prof. Mönch bedanke ich mich herzlich für die engagierte Betreuung und die Unterstützung meines Promotionsvorhabens, auch in schwierigen Phasen der Arbeit. Prof. Eiermann danke ich für die Diskussionen, die den Weg zu einem eleganten Zugang zu einem der wesentlichen Ergebnisse der Arbeit wiesen.

Das Graduiertenkolleg gewährte mir drei Jahre lang nicht nur ein Stipendium sondern stellte mir auch die Mittel bereit für den Besuch von Tagungen und Sommer Schulen und nicht zuletzt für so manches Buch, was mir das Arbeiten sehr erleichtert hat. Die Arbeit setzte ich anschließend während meiner Tätigkeit an den Instituten für Wärme- und Automatisierungstechnik fort. Durch die nun im Vordergrund stehende Projektarbeit wurde mein Interesse an der Regelungstechnik und optimalen Steuerung geweckt, insbesondere durch die Erfahrung, damit auch praktisch erfolgreich wirken zu können. Für diesen Einblick in die ingenieurtechnische Praxis, vor allem aber für die anhaltende Unterstützung meines Promotionsvorhabens bin ich meinen Kollegen dankbar.

Bedanken möchte ich mich auch für Diskussionsrunden der Foren `sci.math` und `sci.math.num-analysis` und bei all denjenigen, die das Arbeiten mit freier Software ermöglichen und erleichtern.

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	1
1 Freie Minimierungsaufgaben	4
1.1 Klassische Abstiegsverfahren	4
1.2 Verallgemeinerte Abstiegsverfahren	7
1.2.1 M -monotone Folgen	7
1.2.2 Verallgemeinert minimierende Folgen	11
1.3 Verallgemeinerte Strahlminimierungsverfahren	22
1.4 Raumzerlegungsverfahren	26
1.4.1 Definition und Eigenschaften der Raumzerlegung	26
1.4.2 Monotone Raumzerlegungsverfahren	33
1.4.3 Verallgemeinerte Raumzerlegungsverfahren	36
1.4.4 Nicht überlappende Raumzerlegungen	39
1.4.5 Konvergenzgeschwindigkeit	41
1.5 Vergangenheitsbezug in der Abstiegsrichtung	44
1.5.1 Das Verfahren	44
1.5.2 Konvergenztheorie	46
1.5.3 Raumzerlegungsverfahren	49
2 Restringierte Minimierungsaufgaben	52
2.1 Einführung	52
2.2 Konvex restringierte Minimierungsaufgaben	54
2.2.1 Grundlagen	54
2.2.2 Verallgemeinerte Abstiegsverfahren	58
2.2.3 Raumzerlegungsverfahren	61
2.3 Einige Grundlagen nichtlinearer Optimierung	70
2.3.1 Aufgabenstellung und Bezeichnungen	70

2.3.2	Optimalitätskriterien	71
2.3.3	Restriktionsqualifikationen	73
2.4	Raumzerlegungen in modifizierten Straftermverfahren	75
2.4.1	Straftermverfahren	76
2.4.2	Erweiterte Lagrangeverfahren	79
2.4.3	Eine Konvergenzaussage ohne exakte Minimierung	85
2.4.4	Erweiterte Lagrangeverfahren mit Raumzerlegung	90
3	Anwendungen	110
3.1	Parameteridentifikation	110
3.2	Identifikation elliptischer Modelle	112
3.2.1	Der eindimensionale Fall	113
3.2.2	Der zweidimensionale Fall	131
3.3	Identifikation eines parabolischen Modells	136
	Zusammenfassung	143
A	Hilfsaussagen	145
A.1	\mathcal{F} -Funktionen	145
A.2	Konvexe Funktionen	147
A.3	Miscellanea	149
B	Tabellen	151
	Literaturverzeichnis	154
	Symbolregister	161
	Personen- und Sachregister	163

Einleitung

Natur- und Ingenieurwissenschaften stellen immer höhere Anforderungen an die Vorhersagbarkeit und damit an die Genauigkeit der Abbildung naturwissenschaftlicher und technischer Prozesse durch mathematische Modelle. Eine Strategie des wissenschaftlichen Rechnens, den erhöhten Rechenanforderungen zu entsprechen, ist die Entwicklung parallelisierbarer Verfahren oder auch die Einführung von Verfahrensmodifikationen zur Effizienzsteigerung in spezifischen Situationen. Während diese Entwicklung beispielsweise für Methoden zur Berechnung durch partielle Differentialgleichungen gegebener Modelle weit fortgeschritten ist, ist dies für im Modellierungsprozess auftretende Optimierungsprobleme wie der Parameteridentifikation weit weniger der Fall.

Gegenstand der vorliegenden Arbeit sind Verfahren für große freie und restringierte Minimierungsprobleme. Dabei wird der Ansatz verfolgt, mit Hilfe des Raumzerlegungskonzepts Verfahren mit einer immanenten parallelen Struktur zu entwerfen, die damit zu *grobkörnig* parallelisierbaren Algorithmen führen. Solche Verfahren sind für unrestringierte Probleme im Rahmen der klassischen Abstiegsverfahren bekannt und beschrieben. Hier werden die Raumzerlegungsverfahren jedoch in eine Theorie verallgemeinerter Abstiegsverfahren eingebettet, die auf den monotonen Abfall des Zielfunktionswertes im Iterationsprozess verzichten. Im Rahmen der restringierten Probleme wird dieses Vorgehen zunächst auf konvex restringierte Aufgaben ausgedehnt. Anschließend steht das gleichungsrestringierte Minimierungsproblem im Vordergrund. Das Konzept verallgemeinerter Abstiegsverfahren ist jedoch auf Methoden der nichtlinearen Optimierung, deren Verfahrensschritten nicht notwendig im Zulässigkeitsbereich liegen, nur schwer übertragbar und wird hier nicht weiter verfolgt. Das entworfene Raumzerlegungsverfahren für das nichtlineare Optimierungsproblem und die dazu entwickelte Konvergenztheorie ist in dieser Form vermutlich bisher nicht bekannt oder veröffentlicht. Die Beispiele des letzten Kapi-

tels aus dem Bereich der Identifikation verteilter Parameter stützen die These der sinnfälligen numerischen Anwendbarkeit des entwickelten Verfahrens.

Notation

Sämtliche auftretende endlichdimensionale Vektorräume werden als Hilberträume über \mathbb{R} (außer \mathbb{C}^n) versehen mit der vom Skalarprodukt $\langle \cdot, \cdot \rangle$ induzierten Vektornorm $\|\cdot\|$ aufgefasst. Für $x = (x_1, \dots, x_n)'$ und y aus \mathbb{R}^n ist $\langle x, y \rangle = \sum_{i=1}^n x_i y_i = x' y$ und entsprechend $\|x\|$ die euklidische Vektornorm. In \mathbb{R}^n ist außerdem die Maximumnorm $\|x\|_\infty = \max\{|x_i| : i = 1, \dots, n\}$ definiert. Um Normen in verschiedenen Vektorräumen V und W gegeneinander abzuheben, kann der Bezeichner des Raumes als Index mit $\|\cdot\|_V$ und $\|\cdot\|_W$ auftreten. Der zu $W \subseteq V$ orthogonale Unterraum in V wird mit $W^\perp = \{v \in V : \langle v, w \rangle = 0 \ \forall w \in W\}$ bezeichnet, und $v \perp W$ bedeutet $v \in W^\perp$. Der Spann einer endlichen Zahl von Vektoren $v_i \in V$ ist der Unterraum $\text{spann}\{v_i : i = 1, \dots, n\} = \{\sum_{i=1}^n \alpha_i v_i : \alpha_i \in \mathbb{R}^n\}$.

Die Norm einer linearen Abbildung $B : W \rightarrow V$ ist durch $\|B\| = \sup\{\|Bx\|_V : \|x\|_W = 1\}$ gegeben. Gegebenenfalls wird stillschweigend vom abstrakten Hilbertraum V zu einer Darstellung durch \mathbb{R}^n gleicher Dimension übergegangen und eine lineare Abbildung zwischen solchen Darstellungen als Matrix aufgefasst; I_n bezeichnet die Einheitsmatrix aus $\mathbb{R}^{n \times n}$, $I_V : V \rightarrow V$ die Identität im Vektorraum V . Mit B' wird die Transponierte von B bezeichnet. Für eine komplexe Matrix $B \in \mathbb{C}^{n \times m}$ bezeichnet B^* die elementweise konjugierte der Transponierten von B . Das Bild der linearen Abbildung $B : W \rightarrow V$ ist $\text{bild}(B) = \{Bw : w \in W\} \subseteq V$ und ihr Nullraum oder Kern $\text{kern}(B) = \{w : Bw = 0\}$; der Rang von B ist $\text{rang}(B) = \dim(\text{bild}(B))$. Das Spektrum einer quadratischen Matrix wird mit $\text{spek}(B)$, ihr Spektralradius mit $\text{sprd}(B)$ bezeichnet. Zwei quadratische Matrizen gleicher Ordnung stehen in der Relation $A \succ B$, wenn $A - B$ positiv definit ist, bei $A \succeq B$ ist $A - B$ positiv semidefinit.

Für $x \in \mathbb{R}^n$ und $X \subset \mathbb{R}^n$ seien $x - X = X - x = \{x - y : y \in X\}$ und $d(x, X) = \inf\{\|x - y\| : y \in X\}$ der Abstand von x zu X . Die Sprechweise, dass für eine gegebene Folge $\{x^k\} = \{x^k : k \in \mathbb{N}_0\}$ eine Eigenschaft für *schließlich alle* Folgenglieder oder *fast immer* gilt, bedeutet, dass die Eigenschaft für alle Folgenglieder bis auf endlich viele gilt. Der Gradient einer differenzierbaren, reellwertigen Funktion $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ ist der *Spaltenvektor* $\nabla f(x) = (\partial_{x_1} f(x), \dots, \partial_{x_n} f(x))'$. Für Lebesgue-

und Sobolevräume über einem Gebiet Ω finden die üblichen Bezeichnungen $L_2(\Omega)$ sowie $H^1(\Omega)$ und $H_0^1(\Omega)$ Verwendung. Es sei auf das Symbolregister auf S. 160 hingewiesen.

Es sei noch die Verwendung der Bezeichnungen *Aussage*, *Lemma* und *Satz* erläutert. Sinngemäße Zitate von Propositionen, Lemmata und Sätzen aus der Literatur werden (außer im Anhang) unter einer nummerierten Aussage in den Text aufgenommen. Sätze sind Schlusssteine einer eigenen Diskussion zu einem Ansatz oder konkreten Verfahren, während Lemmata meist als Meilensteine auf dem Weg zu einem Satz anzusehen sind. Eigene Aussagen hingegen stellen eine Bereicherung der Werkzeugkiste dar, die die Arbeit strukturiert und angenehmer gestaltet.

Alle genannten Textabschnitte besitzen zusammen mit den *Definitionen*, *Bemerkungen*, *Korollaren* und *Algorithmen* einen *gemeinsamen* Zähler. Unabhängig davon werden Gleichungen gezählt, deren Nummerierung auch im Zitat *immer* in Klammern gesetzt ist.

1 Freie Minimierungsaufgaben

One of the greatest frustrations in the study of optimization algorithms is the almost total lack of a general theory. [74]

1.1 Klassische Abstiegsverfahren

Klassische Iterationsverfahren zur näherungsweise Berechnung des freien, d. h. unrestringierten Minimierungsproblems

$$x^* = \operatorname{argmin}_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) \quad (\text{Min})$$

für eine differenzierbare Zielfunktion $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ verlangen in jedem Iterationsschritt einen (hinreichenden) Abstieg des Zielfunktionswertes

$$f(x^{k+1}) < f(x^k). \quad (1.1.1)$$

Verfahren mit dieser Eigenschaft heißen *Abstiegsverfahren*. Diese Bezeichnung wird in einigen Arbeiten einschränkend für Strahlminimierungsverfahren benutzt.

Es wird immer vorausgesetzt, dass das Zielfunktional hinreichend oft stetig differenzierbar ist. In der weiteren Darstellung bezeichnet x^k die Verfahrenspunkte mit den Zielfunktionswerten $f^k = f(x^k)$. Für den Gradienten schreiben wir auch $g = \nabla f$ und $g^k = \nabla f(x^k) = \nabla f^k$. Desweiteren sei

$$X_0 = \{x \in \mathbb{R}^n : f(x) \leq f(x^0)\}$$

die durch den Startwert der Iteration x^0 erzeugte Niveaumenge von f und

$$S_0 = \{x \in X_0 : \nabla f(x) = 0\}$$

die Menge der darin enthaltenen stationären Stellen; dabei heißt $x \in \mathbb{R}^n$ genau dann stationär bezüglich f , wenn $\nabla f(x) = 0$ gilt.

Auf die umfangreiche Literatur und große Zahl von Algorithmen zur konkreten Behandlung von (Min) ist nicht ausdrücklich zu verweisen, genannt seien die Monographien [35, 20, 28, 44, 3, 34, 18, 8, 55]. Während reale Probleme häufig Verfahren, die die Struktur und Problemgröße berücksichtigen, erfordern, lassen sich nach [34] und [71] zumindest für unrestringierte Probleme mit glattem Zielfunktional die zwei grundsätzlichen Ansätze

- Strahlminimierungsverfahren (*line search methods*) und
- Vertrauensbereichverfahren (*trust region methods*)

unterschieden. Die Strahlminimierungsverfahren sind dadurch gekennzeichnet, dass in jedem Iterationsschritt eine Richtung bestimmt wird, entlang welcher approximativ eine *eindimensionale* Minimierung durchgeführt wird. Entscheidend ist in diesem Schritt neben dem hinreichenden Abstieg im Zielfunktional die Bedingung an eine hinreichend große zu erzielende Schrittweite. Der Basisalgorithmus hat die folgende Gestalt.

1.1.1 Algorithmus (StMin)

wähle $x^0 \in \mathbb{R}^n$ und $\delta \in (0, 1)$

für $k = 0, 1, \dots$

bestimme Abstiegsrichtung d^k , d. h. $-\langle g^k, d^k \rangle > 0$

berechne Schrittweite $\alpha^k > 0$ mit

$$f(x^k + \alpha^k d^k) \leq f(x^k) + \delta \alpha^k \langle g^k, d^k \rangle \quad (1.1.2)$$

setze $x^{k+1} = x^k + \alpha^k d^k$

Diese Verfahrensidee geht bis auf Cauchy in [14] aus dem Jahr 1847 zurück.

Im Gegensatz dazu findet bei den Verfahren mit Vertrauensbereich in jedem Iterationsschritt eine ungleichungsrestringierte Minimierung statt, die den Gültigkeitsbereich einer (quadratischen) Ersatzzielfunktion als Approximation der zu minimierenden Funktion um die aktuelle Iterierte einschränkt; diese ist jedoch konzeptionell

nicht auf einen Korrektorraum niedriger Dimension beschränkt. Die Konvergenztheorie verlangt wie bei den Strahlminimierungsverfahren lediglich einen hinreichenden Abstieg im Zielfunktionswert, der durch ein Strahlminimierungsverfahren, Kombinationen des steilsten Abstiegs mit einem Newton–Abstieg in der *dogleg*–Methode oder Krylovraum–Verfahren erreicht werden kann.

1.1.2 Algorithmus (Vertrauensbereichverfahren, [34, 18])

wähle $\bar{\Delta} > 0$, $\Delta^0 \in (0, \bar{\Delta})$, $\eta \in [0, \frac{1}{4})$, $x^0 \in \mathbb{R}^n$

für $k = 0, 1, \dots$

bestimme lokales Modell $m^k(\xi)$ für $f(x^k + \xi)$

berechne $\xi^k \approx \operatorname{argmin}\{m^k(\xi) : \|\xi\| \leq \Delta^k\}$

setze $\rho^k = (f(x^k) - f(x^k + \xi^k)) / (m^k(0) - m^k(\xi^k))$

falls $\rho^k > \eta$ akzeptiere ξ^k und setze $x^{k+1} = x^k + \xi^k$

andernfalls $x^{k+1} = x^k$

Bestimme neuen Vertrauensradius $\Delta^{k+1} = \Delta(\Delta^k, \rho^k) \leq \bar{\Delta}$

Auf Verfahren mit Vertrauensbereich wird im Folgenden nicht explizit näher eingegangen, da die Diskussion von Restriktionen bei den zu diskutierenden Raumzerlegungsverfahren dem zweiten Kapitel vorbehalten bleibt.

Eine *Allgemeine Theorie der Abstiegsverfahren*, die auf dem Begriff der *minimierenden Folge* beruht, findet sich in [87, Kapitel 6]. Dieser gestattet unabhängig von konkreten numerischen Verfahren, Konvergenzeigenschaften bezüglich stationärer Stellen solcher Folgen zu untersuchen. Letztere werden in diesem Zusammenhang auf ihre Fähigkeit, minimierende Folgen zu erzeugen, untersucht.

Seit dem Ende der siebziger Jahre existieren jedoch Ansätze für nichtmonotone Verfahren, die auf den Abstieg des Zielfunktionswertes (1.1.1) in jedem Iterationsschritt verzichten, [15, 38, 39, 40, 41, 54, 93, 94, 98, 64]. Die Publikation [15] ist vermutlich die erste (veröffentlichte) Arbeit mit diesem Ansatz, interessanter Weise auf dem Gebiet der restringierten Probleme mit dem Hintergrund, den Maratos–Effekt zu vermeiden. Der Ausgangspunkt für die Untersuchungen der vorliegenden Arbeit ist

jedoch [38] von Grippo, Lampariello und Lucidi (*A nonmonotone line search technique for Newton's method*), auf die sich viele Publikationen mit nichtmonotonen Optimierungsstrategien beziehen. Die Bedingung (1.1.1) wird zu

$$f(x^{k+1}) \leq \min\{f(x^{k-j}) : 0 \leq j \leq \min\{k, M\}\} \quad (1.1.3)$$

abgeschwächt, wobei $M \in \mathbb{N}_0$ vorgegeben ist. Diese Modifikation lässt auch (in jeweils höchstens M aufeinander folgenden Schritten) einen Anstieg des Zielfunktionswertes zu. Die Theorie der klassischen Verfahren ist auf solche Verfahren nicht mehr anwendbar.

1.2 Verallgemeinerte Abstiegsverfahren

Iterationsverfahren zur näherungsweisen Lösung des unrestringierten Minimierungsproblems (*Min*), deren Zielfunktionswertfolge statt des monotonen Abstiegs nur noch die Eigenschaft (1.1.3) besitzt, werden als *verallgemeinerte Abstiegsverfahren* bezeichnet. Um die Untersuchung dieser Methoden vorzubereiten, wird zunächst die Folgenklasse, denen derartige Zielfunktionswertfolgen angehören, näher betrachtet.

1.2.1 M -monotone Folgen

Die folgende Begriffsbildung dient dazu, die interessierende Folgenklasse unabhängig vom Kontext der einzuführenden Minimierungsverfahren zu beschreiben.

1.2.1 Definition (M -monotone Folgen, M -Majorisierende) Sei $M \in \mathbb{N}_0$. Die M -Majorisierende einer Folge $\{y^k\}_{k \in \mathbb{N}_0} \subseteq \mathbb{R}$ ist die durch

$$Y_M^k = Y^k = \max\{y^{k-j} : 0 \leq j \leq \min\{M, k\}\} \quad (1.2.1)$$

definierte Folge $\{Y_M^k\}_{k \in \mathbb{N}_0}$. Eine Folge $\{y^k\}$ heißt M -monoton fallend, falls

$$y^{k+1} \leq Y^k \quad \text{für alle } k \in \mathbb{N}_0 \quad (1.2.2)$$

gilt. \mathcal{M}_M sei die Menge der M -monoton fallenden Folgen, während Elemente aus

$$\mathcal{M} := \bigcup \{ \mathcal{M}_M : M \in \mathbb{N}_0 \}$$

\mathcal{M} -Folgen heißen.

Die später formulierten Algorithmen erfordern streng genommen einen etwas allgemeineren Begriff der \mathcal{M} -Folgen. Es kann algorithmisch sinnvoll sein, die Zahl M , die gewissermaßen angibt, wie weit in die Vergangenheit des Verfahrens zurückreichende Informationen in die aktuelle Berechnung einfließen, durch eine Folge m^k variabel zu gestalten. Die Beschränkung der m^k durch ein festes $M \in \mathbb{N}_0$ bleibt jedoch notwendig. Zu einer gegebenen Folge $\{m^k\}$ aus \mathbb{N}_0 mit der Eigenschaft $m^0 = 0$ und $m^{k+1} \leq \min\{m^k + 1, M\}$ wird die $\{m^k\}$ -Majorisierende

$$Y_{m^k}^k = Y^k = \max\{y^{k-j} : 0 \leq j \leq m^k\}$$

gebildet. Damit kann dann eine $\{m^k\}$ -monoton fallende Folge durch die Forderung

$$y^{k+1} \leq Y_{m^k}^k$$

definiert werden. Jedoch ist eine $\{m^k\}$ -monotone Folge wegen

$$y^{k+1} \leq Y_{m^k}^k = \max\{y^{k-j} : 0 \leq j \leq m^k\} \leq \max\{y^{k-j} : 0 \leq j \leq \min\{M, k\}\} = Y_M^k$$

auch M -monoton, so dass alle folgenden Aussagen über M -monotone Folgen auch für $\{m^k\}$ -monotone Folgen gelten. Tatsächlich lassen sich auch die Aussagen über die M -Majorisierenden und deren Beweise *mutatis mutandis* problemlos auf $\{m^k\}$ -Majorisierende übertragen. Da daraus keine weiteren theoretischen Ergebnisse zu erwarten sind, wird hier auf die Darstellung mit $\{m^k\}$ -Folgen verzichtet.

Elementare und für die spätere Diskussion notwendige Eigenschaften M -monotoner Folgen fasst das folgende Lemma zusammen.

1.2.2 Lemma *Es gelten die folgenden Aussagen.*

(i) \mathcal{M}_0 ist die Menge der monoton fallenden Folgen in \mathbb{R} .

(ii) Es gilt $\mathcal{M}_N \subseteq \mathcal{M}_M$ für $N \leq M$.

- (iii) Teilfolgen von \mathcal{M} -Folgen liegen nicht notwendig wieder in \mathcal{M} .
- (iv) Jede \mathcal{M} -Folge hat eine monoton fallende Teilfolge.
- (v) Die M -Majorisierende $\{Y^k\}$ einer Folge $\{y^k\}$ aus \mathcal{M}_M fällt monoton. Gilt $Y^k > Y^{k+1}$, so folgt $k \geq M$ und $y^{k-M} > y^{k-M+l}$ für $l > 0$. Sie fällt genau dann schließlich streng monoton, d. h. es gibt ein k_0 , so dass $\{Y^k\}_{k \geq k_0}$ streng monoton fällt, wenn die erzeugende Folge $\{y^k\}$ schließlich streng monoton fällt.
- (vi) Die M -Majorisierende $\{Y^k\}$ ist nicht notwendig eine Teilfolge der M -monoton fallenden Folge $\{y^k\}$. Es gibt aber eine Teilfolge von $\{y^k\}$, die auch Teilfolge von $\{Y^k\}$ ist, in dem Sinne, dass es streng monoton wachsende Folgen $\{k_j\}$ und $\{l_j\}$ in \mathbb{N}_0 gibt, derart dass $y^{k_j} = Y^{l_j}$ gilt. Ist $Y^{l_j+1} < Y^{l_j}$, so gilt $l_j \geq k_j + M$.
- (vii) Ist $\{Y^k\}$ beschränkt, so gilt

$$\limsup_{k \rightarrow \infty} y^k = \lim_{k \rightarrow \infty} Y^k.$$

Beweis

Aus der Definition folgt unmittelbar $Y^k = y^k$ für Folgen aus \mathcal{M}_0 , die dann wegen $y^{k+1} \leq Y^k$ monoton sind. Für eine N -monotone Folge mit $N \leq M$ gilt

$$\begin{aligned} y^{k+1} \leq Y_N^k &= \max\{y^{k-j} : 0 \leq j \leq \min\{N, k\}\} \\ &\leq \max\{y^{k-j} : 0 \leq j \leq \min\{M, k\}\} = Y_M^k, \end{aligned}$$

so dass die Folge auch M -monoton ist. Damit sind die ersten beiden Aussagen bewiesen.

Für den Beweis der Aussage (iii) sei $\{y^k\} \in \mathcal{M}$ durch

$$y^k = \begin{cases} 1, & \text{bei } k = 2l \text{ für ein } l \in \mathbb{N}_0 \\ 1 - \frac{1}{l+1}, & \text{bei } k = 2l + 1 \text{ für ein } l \in \mathbb{N}_0 \end{cases}$$

gegeben. Die Folge liegt in \mathcal{M}_1 , jedoch ist die Teilfolge $\{y^{2l+1}\}$ streng monoton wachsend und ist damit nicht aus \mathcal{M} .

Die Monotonie der Majorisierenden nach Aussage (v) gilt gemäß der Abschätzung

$$\begin{aligned} Y^{k+1} &= \max\{y^{k+1-j} : 0 \leq j \leq \min\{k+1, M\}\} \\ &\leq \max\{y^{k+1-j} : 0 \leq j \leq \min\{k+1, M+1\}\} = \max\{y^{k+1}, Y^k\} = Y^k. \end{aligned}$$

Da die ersten $M+1$ Folgenglieder der M -Majorisierenden einer \mathcal{M}_M -Folge wegen (1.2.1) und (1.2.2) gleich y^0 sind,

$$y^0 = Y^0 = Y^1 = \dots = Y^M,$$

folgt aus dem echten Abstieg $Y^{k+1} < Y^k$, dass $k \geq M$ und

$$\begin{aligned} y^{k+1-M+l} &\leq \max\{y^{k+1-j} : 0 \leq j \leq M\} = Y^{k+1} < \\ &Y^k = \max\{y^{k-j} : 0 \leq j \leq M\} = y^{k-M} \end{aligned}$$

für $l \geq 0$ gelten. Daraus lässt sich sofort ableiten, dass $\{y^k\}_{k \geq k_0 - M}$ streng monoton fällt, wenn $\{Y^k\}_{k \geq k_0}$ streng monoton fällt. Die Umkehrung folgt sofort aus (1.2.1), womit (v) vollständig bewiesen ist.

Zum Beweis der ersten Behauptung in (vi) sei $\{y^k\}$ eine streng monoton fallende Folge und $\{Y^k\}$ deren 2-Majorisierende. Diese kann wegen $y^0 = Y^0 = Y^1 > y^1$ nicht Teilfolge von $\{y^k\}$ sein.

Wegen $Y^l = \max\{y^{l-j} : 0 \leq j \leq \min\{M, l\}\}$ gibt es für jeden Index l einen Index n_l im Intervall

$$\max\{l - M, 0\} \leq n_l \leq l,$$

derart dass $Y^l = y^{n_l}$ gilt. Wegen der sich daraus ergebenden Ungleichungskette

$$\max\{l - M, 0\} \leq n_l \leq l < l + 1 \leq n_{l+M+1} \leq l + M + 1$$

lassen sich die Folgen $\{l_j\}$ und $\{k_j\}$ aus Aussage (vi) gemäß $l_j = j(M+1)$ und $k_j = n_{j(M+1)}$, $j \in \mathbb{N}_0$, konstruieren. Gemäß dem Beweis zu (v) gilt bei $Y^{l_j+1} < Y^{l_j}$ die Ungleichung

$$y^{l_j - M + i} < Y^{l_j} = y^{l_j - M} = y^{k_j}$$

für $i > 0$, so dass $k_j \leq l_j - M$ folgt.

Aussage (iv) folgt unmittelbar aus (v) und (vi). Laut (vi) gibt es eine Teilfolge $\{y^{k_j}\}$ mit $y^{k_j} = Y^{l_j}$. Nach Aussage (v) fällt $\{Y^k\}$ monoton und damit die Teilfolge der \mathcal{M} -Folge $\{y^k\}$.

Aussage (vii) ergibt sich aus $y^k \leq Y^k$ und daraus, dass wegen (vi) der existierende Grenzwert von $\{Y^k\}$ Häufungspunkt von $\{y^k\}$ ist. \square

Die in Hinblick auf die verallgemeinerten Abstiegsverfahren unangenehmste Eigenschaft M -monotoner Folgen ist der mögliche Verlust jedes fallenden Monotonieverhaltens beim Übergang zu Teilfolgen. Jedoch lässt sich für eine Iterationsfolge $\{x^k\}$ mit M -monotoner Zielfunktionswertfolge $\{f(x^k)\}$ zunächst die folgende Aussage aus dem vorausgehenden Lemma ableiten.

1.2.3 Korollar *Die Funktion $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ sei nach unten beschränkt. Weiterhin sei $\{x^k\}$ eine Folge in \mathbb{R}^n und $\{f(x^k)\}$ M -monoton fallend mit der M -Majorisierenden $\{F^k\}$. Außerdem sei $X_0 = \{x \in \mathbb{R}^n : f(x) \leq f(x^0)\}$ die von x^0 erzeugte Niveaumenge zu f . Dann gelten die folgenden Aussagen.*

- (i) *Die Folge $\{F^k\}$ fällt monoton, und es gilt $\lim_{k \rightarrow \infty} F^k = \limsup_{k \rightarrow \infty} f(x^k)$.*
- (ii) *Die Folge $\{x^k\}_{k \in \mathbb{N}_0}$ liegt in X_0 .*

Beweis

Die Aussagen unter (i) folgen aus den Behauptungen (v) und (vii) des Lemmas 1.2.2, da die M -Majorisierende durch die Voraussetzung an f nach unten beschränkt ist.

Behauptung (ii) gilt wegen $f^{k+1} \leq F^k \leq F^0 = f^0$. \square

1.2.2 Verallgemeinert minimierende Folgen

Die Stationaritätsbedingung

$$\nabla f(x) = 0 \tag{1.2.3}$$

ist für Verfahren der unrestringierten Minimierung mit differenzierbarem Zielfunktional ein wesentliches Kriterium zur Bewertung der Iterierten. Ein stationärer Häufungspunkt einer klassischen, nicht abbrechenden Abstiegsfolge kann kein lokales Maximum sein. Diese Eigenschaft bleibt für verallgemeinerte Verfahren erhalten.

Daher ist es in der Regel auch bei realen Verfahren nicht nötig, neben der Stationarität weitere Kriterien für die Optimalität zu berücksichtigen, da zu erwarten ist, dass auch in der Umgebung von Sattelpunkten durch numerische Effekte Abstiegsrichtungen einen Einfluss auf das Verfahren nehmen und die Iterierten von solchen Stellen wegtreiben.

Es ist zunächst das Ziel, grundlegende Prinzipien von durch verallgemeinerte Abstiegsverfahren erzeugte Iterationsfolgen herauszuarbeiten, ohne auf konkrete Verfahren einzugehen. Diesem Zweck dient die Definition kritischer und verallgemeinert minimierender Folgen.

1.2.4 Definition (kritische und verallgemeinert minimierende Folgen)

Seien $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ und $\{x^k\}_{k \in \mathbb{N}_0} \subseteq X_0 = \{x \in \mathbb{R}^n : f(x) \leq f(x^0)\}$. Die Zielfunktion f sei differenzierbar auf X_0 . Die Folge $\{x^k\}$ heißt schwach kritisch (bezüglich f), falls

$$\liminf_{k \rightarrow \infty} \|\nabla f(x^k)\| = 0 \quad (1.2.4)$$

gegeben ist, und kritisch, falls stärker

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \|\nabla f(x^k)\| = 0 \quad (1.2.5)$$

gilt. Ist zusätzlich die Zielfunktionswertfolge $\{f(x^k)\}$ M -monoton, so heißt eine (schwach) kritische Folge verallgemeinert (schwach) minimierend. Im monotonen Fall $\{f(x^k)\} \in \mathcal{M}_0$ heißt die Folge $\{x^k\}$ (schwach) minimierend. Ein iteratives Minimierungsverfahren heißt verallgemeinert (schwach) minimierend, falls jede Folge erzeugter Iterierten im obigen Sinne verallgemeinert (schwach) minimierend ist.

1.2.5 Bemerkung Wegen (iii) in Lemma 1.2.2 sind Teilfolgen verallgemeinert minimierender Folgen nicht notwendig wieder verallgemeinert minimierend. Insbesondere ist eine Teilfolge $\{x^{k_j}\}$ der verallgemeinert schwach minimierenden Folge $\{x^k\}$ mit $\lim_{j \rightarrow \infty} \nabla f(x^{k_j}) = 0$ zwar kritisch, aber nicht notwendig verallgemeinert minimierend. \square

Das hier entwickelte Konzept verallgemeinerter Abstiegsverfahren einschließlich der zugehörigen Konvergenztheorie ist wesentlich durch [38] motiviert. Diese Arbeit

wird dahingehend analysiert, wie weit das dort beschriebene Verfahren verallgemeinert minimierende Folgen erzeugt. Die Darstellung und die Beweistechniken sind systematisiert und in Teilen verändert sowie Aussagen in einen allgemeineren Zusammenhang gestellt. Bereits die Untersuchung M -monotoner Folgen gestattet es, Eigenschaften von $\{f(x^k)\}$ festzustellen, unabhängig davon, dass es sich um eine Bildfolge von $\{x^k\}$ handelt.

Das Anliegen des folgenden Satzes, der durch Satz 6.1.2 aus [87] zur Theorie der monotonen Verfahren motiviert ist, besteht darin, aus der bloßen definierenden Eigenschaft kritischer und verallgemeinert minimierender Folgen sowie Eigenschaften des Zielfunktional Konvergenzaussagen abzuleiten. Für Definitionen und Aussagen zum Konvexitätsbegriff sei auf den Anhang A.2 verwiesen.

1.2.6 Satz Die Zielfunktion $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ sei auf der Niveaumenge $X_0 = \{x \in \mathbb{R}^n : f(x) \leq f(x^0)\}$ stetig differenzierbar. Außerdem sei $S_0 = \{x \in X_0 : \nabla f(x) = 0\}$ die Menge der in X_0 enthaltenen stationären Stellen von f . Dann gelten die folgenden Aussagen, falls die Folge $\{x^k\}$ verallgemeinert schwach minimierend bezüglich f ist.

- (i) Es gibt eine kritische Teilfolge $\{x^{k_j}\}$ von $\{x^k\}$, d. h. $\lim_{j \rightarrow \infty} \nabla f(x^{k_j}) = 0$; jeder Häufungspunkt der Teilfolge $\{x^{k_j}\}$ ist stationär. Ist $\{x^k\}$ verallgemeinert minimierend, so ist jeder Häufungspunkt der Folge $\{x^k\}$ stationär.
- (ii) Ist X_0 beschränkt, so existiert eine konvergente Teilfolge von $\{x^k\}$ mit stationärem Grenzwert. Außerdem gilt

$$\liminf_{k \rightarrow \infty} d(x^k, S_0) = 0,$$

wobei $d(x, S_0) := \inf\{\|x - s\| : s \in S_0\}$ den Abstand von x zur Menge S_0 bezeichnet. Ist die Folge $\{x^k\}$ verallgemeinert minimierend, so gilt $\lim_{k \rightarrow \infty} d(x^k, S_0) = 0$.

- (iii) Ist X_0 beschränkt und konvex und ist die Zielfunktion f konvex auf X_0 , so gibt es mindestens eine Minimumstelle $x^* \in X_0$ von f . Außerdem konvergiert die Zielfunktionswertfolge $\{f(x^{k_j})\}$ jeder kritischen Teilfolge $\{x^{k_j}\}$ gegen das Minimum $f(x^*)$,

$$\lim_{j \rightarrow \infty} f(x^{k_j}) = f(x^*). \tag{1.2.6}$$

Dann ist auch jeder Häufungspunkt einer kritischen Teilfolge $\{x^{k_j}\}$ eine Mi-

Minimumstelle von f .

(iv) Ist die Niveaumenge X_0 konvex und f gleichmäßig konvex auf X_0 , so ist die Niveaumenge beschränkt und es gibt genau eine Minimumstelle $x^* \in X_0$ von f . Zusätzlich zu (1.2.6) gilt $\lim_{j \rightarrow \infty} x^{k_j} = x^*$ für jede kritische Teilfolge.

Beweis

Die Aussagen unter Punkt (i) folgen unmittelbar aus der definierenden Eigenschaft (schwach) kritischer Folgen und der stetigen Differenzierbarkeit.

In (ii) ist die Niveaumenge X_0 abgeschlossen, da f stetig ist, und mit der vorausgesetzten Beschränktheit dann auch kompakt. Wegen (i) gibt es eine kritische, konvergente Teilfolge $\{x^{k_j}\}$ mit Grenzwert x^* . Damit ergibt sich

$$0 \leq \liminf_{k \rightarrow \infty} d(x^k, S_0) \leq \liminf_{j \rightarrow \infty} d(x^{k_j}, S_0) \leq \liminf_{j \rightarrow \infty} \|x^{k_j} - x^*\| = 0.$$

Sei nun $\{x^{k_l}\}$ eine Teilfolge mit

$$\limsup_{k \rightarrow \infty} d(x^k, S_0) = \lim_{l \rightarrow \infty} d(x^{k_l}, S_0).$$

Diese sei konvergent gegen einen Grenzwert x^* , was gegebenenfalls durch eine weitere Teilfolgenbildung erreicht werden kann. Ist $\{x^k\}$ verallgemeinert minimierend, so ist x^* stationär, d. h. $x^* \in S_0$ und es folgt

$$\limsup_{k \rightarrow \infty} d(x^k, S_0) = \lim_{j \rightarrow \infty} d(x^{k_j}, S_0) = 0.$$

Damit ist $0 \leq \liminf_{k \rightarrow \infty} d(x^k, S_0) \leq \limsup_{k \rightarrow \infty} d(x^k, S_0) = 0$ gezeigt, woraus unmittelbar $\lim_{k \rightarrow \infty} d(x^k, S_0) = 0$ folgt.

Die Konvexität von f in (iii) impliziert nach Satz A.2.3 die Ungleichung

$$f(y) \geq f(x) + \langle g(x), y - x \rangle$$

für alle $x, y \in X_0$. Da X_0 beschränkt ist und $\lim_{k \rightarrow \infty} g^{k_j} = 0$ für die nach Voraussetzung kritische Teilfolge $\{x^{k_j}\}$ gilt, existiert für jedes $\delta > 0$ ein $j_\delta \in \mathbb{N}$, derart dass

$$f(y) - f(x^{k_j}) \geq \langle g^{k_j}, y - x^{k_j} \rangle \geq -\delta$$

für alle $j \geq j_\delta$ und $y \in X_0$ erfüllt ist. Insbesondere gilt für eine Minimumstelle x^* von f , die im Kompaktum X_0 existiert,

$$0 \geq f(x^*) - f(x^{k_j}) \geq -\delta, \quad \forall \delta > 0, \forall j \geq j_\delta,$$

so dass $\lim_{j \rightarrow \infty} f(x^{k_j}) = f(x^*)$. Für jeden Häufungspunkt $x^+ \in X_0$ einer kritischen Teilfolge, der damit auch Grenzwert einer kritischen Folge ist, ergibt sich $f(x^+) = f(x^*)$ und $g(x^+) = 0$; d. h. x^+ ist Minimumstelle.

In (iv) folgt aus der gleichmäßigen Konvexität der Zielfunktion die Beschränktheit der Niveaumenge sowie Existenz und Eindeutigkeit der Minimumstelle x^* , Satz A.2.4. Diese ist dann in X_0 eindeutig durch $g(x^*) = 0$ bestimmt. Daher ist x^* der einzig mögliche Häufungspunkt einer in X_0 beschränkten und kritischen Folge. Letztere ist dann konvergent, da es andernfalls einen weiteren stationären Häufungspunkt in X_0 gäbe. \square

1.2.7 Bemerkung In den Aussagen (i) und (ii) des vorangehenden Satzes spielt das Monotonieverhalten der Zielfunktionswertfolge keine Rolle. Damit gelten die jeweiligen Beweise in [87, Satz 6.1.2] auch für den verallgemeinerten Fall. Der Beweis zu (ii) ist hier der Vollständigkeit halber gegeben und liefert keine beweistechnische Neuerungen. Das gilt auch für die Ableitung der Aussage (iv) aus (iii). In diesen Aussagen ist das Zielfunktionswertverhalten jedoch entscheidend, so dass der auf der Monotonie dieser Folge beruhende Beweis von (iii) nicht übertragbar ist. Für den neuen Beweis müssen die Teilfolgen als kritisch vorausgesetzt werden, während für den klassischen Fall gemäß [87] in der betreffenden Aussage *schwach* minimierend und damit schwach kritisch für das Gradientenverhalten hinreichend ist. Durch die Abschwächung der Abstiegsbedingung spielt die „kritische Eigenschaft“ der Iterationsfolgen eine größere Rolle. \square

Ungleichungen der Gestalt

$$f(x^k) - f(x^{k+1}) \geq -c \alpha^k \langle \nabla f(x^k), d^k \rangle \quad (1.2.7)$$

haben eine Schlüsselfunktion in der Theorie der (klassischen) Abstiegsverfahren, wo-

bei c eine positive Konstante, d^k die Abstiegsrichtung und α^k die Schrittweite im k -ten Schritt zur Berechnung von $x^{k+1} = x^k + \alpha^k d^k$ ist. Die Konvergenztheorie beruht dann typischer Weise auf Abschätzungen für den „Winkel“ zwischen dem negativen Gradienten des Zielfunktional und der Abstiegsrichtung $-\langle \nabla f^k, d^k \rangle \geq c_d \|\nabla f^k\|^{q_d}$ wie für die Schrittweite $\alpha^k \geq c_\alpha \|\nabla f^k\|^{q_\alpha}$. Die auftretenden Exponenten q_d und q_α sind letztlich entscheidend bei der Abschätzung der Konvergenzgeschwindigkeit eines konkreten Verfahrens. Für möglichst allgemeingültige Konvergenzaussagen genügen aber Ungleichungen der Art $-\langle \nabla f^k, d^k \rangle \geq \varphi(\|\nabla f^k\|)$ und $\alpha^k \geq \psi(\|\nabla f^k\|)$, um die Verknüpfung zwischen der Zielfunktionswertfolge $\{f^k\}$ bzw. der Iterierten $\{x^k\}$ und der Gradientenfolge $\{\nabla f^k\}$ und letztlich der Stationaritätsbedingung (1.2.3) herzustellen. Dabei gehören die Funktionen φ und ψ der in der angelsächsischen Literatur als *forcing functions*, [72], bekannten Klasse der \mathcal{F} -Funktionen an.

1.2.8 Definition (\mathcal{F} -Funktion) Ein Element der Menge

$$\mathcal{F} = \{\varphi : \mathbb{R}_0^+ \rightarrow \mathbb{R}_0^+ \mid \varphi^{-1}(0) = \{0\}, \varphi \text{ monoton wachsend}\}$$

heißt \mathcal{F} -Funktion. Die Teilmenge $\mathcal{F}^* \subset \mathcal{F}$ bezeichne die Menge der in Null stetigen \mathcal{F} -Funktionen.

Die wesentliche Eigenschaft einer \mathcal{F} -Funktion φ ist, dass aus der Konvergenz

$$\text{der Bildfolge } \lim_{k \rightarrow \infty} \varphi(t^k) = 0 \quad \text{die Konvergenz der Urbildfolge } \lim_{k \rightarrow \infty} t^k = 0$$

folgt, siehe Aussage A.1.3, was häufig als definierende Eigenschaft benutzt wird. Existiert jedoch für eine \mathcal{F} -Funktion φ eine Folge $t^k > 0$ mit $\lim_{k \rightarrow \infty} \varphi(t^k) = 0$, so ist φ wegen der Monotonie in Null stetig und damit aus \mathcal{F}^* . Eine Stärke des Begriffs liegt darin, dass zahlreiche Verknüpfungen von \mathcal{F} -Funktionen wieder zu \mathcal{F} -Funktionen führen; Aussagen über \mathcal{F} -Funktionen sind im Anhang A.1 zusammengestellt.

Damit sind die notwendigen Begriffe und Aussagen entwickelt, um ein wichtiges Werkzeug für die weitere Untersuchung verallgemeinerter Abstiegsverfahren zur Verfügung stellen zu können.

1.2.9 Lemma Seien $\{x^k\} \subset \mathbb{R}^n$, $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ differenzierbar und beschränkt auf X_0 , und $\{F^k\}$ die M -Majorisierende der Folge $\{f(x^k)\}$. Weiterhin gebe es eine \mathcal{F} -

Funktion φ mit

$$F^k - f(x^{k+1}) \geq \varphi(\|\nabla f(x^k)\|) \quad \text{für schließlich alle } k \in \mathbb{N}_0. \quad (1.2.8)$$

Dann gelten die folgenden Aussagen.

- (i) Die Zielfunktionswertfolge $\{f(x^k)\}$ ist M -monoton fallend.
- (ii) Die Folge $\{x^k\}$ ist verallgemeinert schwach minimierend.
- (iii) Die Folge $\{x^k\}$ ist verallgemeinert minimierend, falls die Folge der Zielfunktionswerte $\{f(x^k)\}$ konvergiert.
- (iv) Ist fast immer $\nabla f(x^k) \neq 0$, so hat $\{F^k\}$ eine streng monoton fallende Teilfolge und es gilt

$$\limsup_{k \rightarrow \infty} f(x^k) < F^l \quad \text{für alle } l \in \mathbb{N}_0. \quad (1.2.9)$$

- (v) Gilt fast immer $\nabla f(x^k) \neq 0$ und ist die Konvergenz

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \|x^{k+1} - x^k\| = 0, \quad (1.2.10)$$

gegeben, so ist kein Häufungspunkt von $\{x^k\}$ lokales Maximum.

- (vi) Das Zielfunktional f sei nach unten beschränkt und gleichmäßig stetig auf X_0 . Weiterhin gebe es eine \mathcal{F}^* -Funktion ψ mit

$$\|x^{k+1} - x^k\| \leq \psi(\|\nabla f(x^k)\|), \quad \forall k \in \mathbb{N}_0. \quad (1.2.11)$$

Dann ist $\{f(x^k)\}$ konvergent und $\{x^k\}$ ist verallgemeinert minimierend. Außerdem gilt dann $\lim_{k \rightarrow \infty} \|x^{k+1} - x^k\| = 0$.

Beweis

Die erste Behauptung bedeutet $f(x^{k+1}) \leq F^k$, was unmittelbar aus (1.2.8) folgt.

(ii): Wegen der zweiten Aussage in (i) des Korollars 1.2.3 und (1.2.8) gibt es eine Teilfolge $\{x^{k_j}\}$, derart dass

$$\varphi(\|g^{k_j-1}\|) \leq F^{k_j-1} - f^{k_j} \longrightarrow 0 \quad (j \rightarrow \infty).$$

Hieraus folgt mit Aussage A.1.3 dann $\lim_{j \rightarrow \infty} g^{k_j-1} = 0$ und damit $\liminf_{k \rightarrow \infty} \|g^k\| = 0$.

Für (iii) ist $\lim_{k \rightarrow \infty} g^k = 0$ zu zeigen. Dies folgt jedoch unmittelbar aus der vorausgesetzten Konvergenz von $\{f^k\}$, (1.2.8) und A.1.3.

(iv): Es gibt ein $k_0 \in \mathbb{N}_0$, so dass $g^k \neq 0$ für $k \geq k_0$. Für jedes $l > k_0 + M$ gibt es ein $k_l \in \mathbb{N}_0$ mit $k_0 < l - M \leq k_l \leq l$, so dass $F^l = f^{k_l}$. Daraus ergibt sich aus (1.2.8) die Abschätzung $F^{k_l-1} - F^l \geq \varphi(\|g^{k_l-1}\|) > 0$, woraus

$$F^{l-M-1} \geq F^{k_l-1} > F^l \quad \text{für alle } l \geq k_0 + M$$

folgt. Die Teilfolge $\{F^{k_0+j(M+1)}\}_{j \in \mathbb{N}_0}$ ist demnach streng monoton fallend und es folgt mit der Monotonie von $\{F^k\}$ die Ungleichung (1.2.9).

Zum Beweis der Aussage (v) sei x^* ein Häufungspunkt der Folge $\{x^k\}$. Es wird gezeigt, dass in jeder Umgebung von x^* ein x mit $f(x) > f(x^*)$ existiert:

Für alle $\varepsilon > 0$ gibt es ein k_ε , so dass

$$\|x^{k+1} - x^k\| \leq \frac{\varepsilon}{M+1} \quad \text{für alle } k \geq k_\varepsilon.$$

Desweiteren existiert ein $l \geq k_\varepsilon$ mit $\|x^l - x^*\| < \frac{\varepsilon}{M+1}$. Damit folgt mit der Dreiecksungleichung

$$\|x^{l+j} - x^*\| < \varepsilon \quad \text{für } j = 0, \dots, M.$$

Für ein $0 \leq j^* \leq M$ gilt dann mit der Ungleichung (1.2.9)

$$f(x^{l+j^*}) = F^{l+M} > \lim_{k \rightarrow \infty} F^k = \limsup_{k \rightarrow \infty} f^k \geq f(x^*).$$

Damit kann x^* kein lokales Maximum sein.

Zum Beweis von (vi) sei die Folge $\{k_l\}$ wie im Beweis von (iv) mit $f^{k_l} = F^l$ und $l - M \leq k_l \leq l$ gewählt. Die Konvergenz von $\{F^l\}$ gegen einen Grenzwert f^* liefert mit der Voraussetzung (1.2.8)

$$\varphi(\|g^{k_l-1}\|) \leq F^{k_l-1} - f^{k_l} \longrightarrow 0 \quad (l \rightarrow \infty), \quad \text{so dass} \quad \lim_{l \rightarrow \infty} g^{k_l-1} = 0,$$

woraus mit der Voraussetzung (1.2.11) die Konvergenz $\lim_{l \rightarrow \infty} \|x^{k_l} - x^{k_l-1}\| = 0$ folgt. Die gleichmäßige Stetigkeit von f sichert dann $f^* = \lim_{l \rightarrow \infty} f^{k_l} = \lim_{l \rightarrow \infty} f^{k_l-1}$. Induktiv

wird jetzt

$$\lim_{l \rightarrow \infty} \|x^{k_l} - x^{k_l-j}\| = 0 \quad \text{und} \quad f^* = \lim_{l \rightarrow \infty} f^{k_l-j} \quad \text{für } j \in \mathbb{N}_0 \quad (1.2.12)$$

bewiesen. Dies ist für $j = 1$ gezeigt, und die Gültigkeit sei für den Induktionsschritt für ein j angenommen, mit der Folge

$$\varphi(\|g^{k_l-j-1}\|) \leq F^{k_l-j-1} - f^{k_l-j} \longrightarrow 0, \quad (l \rightarrow \infty).$$

In analoger Weise zum Beweis des Induktionsanfangs ergibt sich

$$\lim_{l \rightarrow \infty} \|x^{k_l-j} - x^{k_l-j-1}\| = 0 \quad \text{mit der Konsequenz} \quad \lim_{l \rightarrow \infty} f^{k_l-j} = \lim_{l \rightarrow \infty} f^{k_l-j-1}.$$

Damit folgt unmittelbar (1.2.12) für $j + 1$, womit die Induktion abgeschlossen ist.

Die Konvergenz von $\{f^k\}$ wird nun bewiesen. Für jedes $k \in \mathbb{N}_0$ gibt es l und j aus \mathbb{N}_0 mit $0 \leq j \leq M$ und $k = k_l - j$, so dass $|l - k| \leq |l - k_l| + M \leq 2M$ und

$$|f^* - f^k| = |f^* - f^{k_l-j}| \leq |f^* - f^{k_l}| + \max_{0 \leq i \leq M} |f^{k_l} - f^{k_l-i}|.$$

Da mit $k \rightarrow \infty$ auch $l \rightarrow \infty$ gilt, folgt aus (1.2.12) und obiger Abschätzung die Konvergenz von $\{f^k\}$ gegen f^* . Wegen $\lim_{k \rightarrow \infty} f^k = \limsup_{k \rightarrow \infty} f^k = \lim_{k \rightarrow \infty} F^k$ folgt mit (1.2.8) und Aussage A.1.3, dass $\lim_{k \rightarrow \infty} g^k = 0$ gilt, d.h. die Folge $\{x^k\}$ ist verallgemeinert minimierend und nach Satz 1.2.6 ist dann jeder ihrer Häufungspunkte stationär. \square

- 1.2.10 Bemerkung**
1. Die Voraussetzung „fast immer $\nabla f(x^k) \neq 0$ “ in Aussage (iv) des vorangehenden Lemmas lässt sich nicht einfach zu „ $\nabla f(x^k) \neq 0$ unendlich oft“ abschwächen. Benötigt wird exakt, dass unendlich oft gleichzeitig $\nabla f(x^k) \neq 0$ und $f(x^{k+1}) = F^{k+l}$ für ein l mit $1 \leq l \leq M + 1$ gelten, woraus mit (1.2.8) die Abschätzung $F^k > F^{k+l}$ folgt.
 2. Aussage (v) findet sich im Hauptsatz der Publikation [38] mit der gleichen Beweisidee, die hier systematisiert wurde. Aussage (vi) ist ein aus dem Beweis des Hauptsatzes aus [38] abgeleitetes Prinzip, das mit Lemma 1.2.11 und dessen Korollar 1.2.13 zur Wirkung kommen wird. Dies stellt eine beweistechnische Neuerung dar.

3. Die Schlüsselbedingungen (1.2.8) und (1.2.11) des Lemmas 1.2.9 stellen den Zusammenhang zwischen der Folge der Zielfunktionswerte $\{f^k\}$ bzw. der Verfahrensiterierten $\{x^k\}$ und der Gradientenfolge $\{\nabla f^k\}$ her. Diese abstrahieren damit von den (starken) Voraussetzungen

$$\begin{aligned} -\langle \nabla f^k, d^k \rangle &\geq c_1 \|\nabla f^k\|^2 \\ \|d^k\| &\leq c_2 \|\nabla f^k\| \end{aligned}$$

an die Abstiegsrichtung d^k des Verfahrens in [38] zusammen mit der dort gewählten Armijo-Strategie bei der Strahlminimierung für die Schrittweite α^k , siehe Lemma 1.3.3, die gemäß der Aufdatierung $x^{k+1} = x^k + \alpha^k d^k$ zur nächsten Iterierten führen. Mit einer Ungleichung der Art (1.2.7) ist dann die entscheidende Bedingung (1.2.8) erfüllt, ebenso wie (1.2.11), wenn eine verfahrensbedingte Beschränktheit der Schrittweiten $\alpha^k \leq \bar{\alpha}$ gegeben ist. Das Strahlminimierungsverfahren spielt in Lemma 1.2.9 jedoch noch explizit keine Rolle. In den nächsten Abschnitten wird die Verknüpfung zu den Bedingungen (1.2.8) und (1.2.11) über viel schwächere Voraussetzung als den oben genannten ähnlich wie in [87, Satz 6.1.8] für die klassischen, monotonen Verfahren hergestellt.

□

Das Lemma 1.2.9 ist das entscheidende Hilfsmittel in der darzustellenden Konvergenztheorie verallgemeinerter Abstiegsverfahren. Neben der fundamentalen Voraussetzung (1.2.8) als Angelpunkt wesentlicher Aussagen ist die Eigenschaft (1.2.10) der Iterationsfolge $\{x^k\}$, die sowohl als Voraussetzung wie als Konsequenz in den Aussagen des Lemmas auftritt, Ausgangspunkt für weitere Konvergenzüberlegungen zur Iterationsfolge $\{x^k\}$. Durch den Rückgriff auf eine konvergente Bildfolge von $\{x^k\}$ gelingt es, eine Brücke von der Eigenschaft $\lim_{k \rightarrow \infty} \|x^{k+1} - x^k\| = 0$ zu ihrer Konvergenz zu schlagen.

1.2.11 Lemma Sei $\{x^k\}$ eine in der abgeschlossenen Menge $X \subseteq \mathbb{R}^n$ enthaltene Folge mit

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \|x^{k+1} - x^k\| = 0.$$

Weiterhin sei $\psi : X \rightarrow \mathbb{R}$ stetig und $\{\psi(x^k)\}$ konvergiere gegen $\eta \in \mathbb{R}$; außerdem habe die Urbildmenge $S = \psi^{-1}(\eta)$ keinen Häufungspunkt. Dann konvergiert die Folge $\{x^k\}$ genau dann, wenn sie einen Häufungspunkt besitzt.

Beweis

Für den Beweis seien $\psi(X) \subseteq \mathbb{R}_0^+$ und $\eta = 0$ angenommen; andernfalls gehe man zur stetigen Abbildung $\tilde{\psi}(x) = |\psi(x) - \eta|$ über.

Ist $x^* \in X$ Häufungspunkt von $\{x^k\}$, so gilt, da ψ stetig ist, $\psi(x^*) = 0$ bzw. $x^* \in S \neq \emptyset$. Sei $\delta > 0$ und

$$R_\delta := \{y \in X : \|y - x^*\| \leq \delta \wedge \|y - x^*\| \geq \frac{1}{2}\delta\}$$

ein möglicherweise leerer Ring um x^* mit dem eingeschlossenen Kreis

$$K_\delta := \{y \in X : \|y - x^*\| \leq \frac{1}{2}\delta\}.$$

Da ψ stetig und R_δ kompakt ist, ist

$$\psi_\delta := \begin{cases} \min\{\psi(x) : x \in R_\delta\}, & \text{falls } R_\delta \neq \emptyset \\ 1, & \text{falls } R_\delta = \emptyset \end{cases}$$

wohldefiniert. Ein hinreichend kleines δ gewährleistet $R_\delta \cap S = \emptyset$ und damit $\psi_\delta > 0$. Es gibt ein $k_\delta \in \mathbb{N}$ derart, dass x^{k_δ} in K_δ liegt und für alle $k \geq k_\delta$ sowohl $\|x^{k+1} - x^k\| < \frac{1}{2}\delta$ als auch $\psi(x^k) < \psi_\delta$ gilt. Dann folgt durch vollständige Induktion, dass $x^k \in K_\delta$ für jedes $k \geq k_\delta$ gilt: gemäß der Wahl von k_δ liegt x^{k_δ} in K_δ ; nun sei $x^k \in K_\delta$ für ein $k \geq k_\delta$ angenommen, um daraus $x^{k+1} \in K_\delta$ abzuleiten; dies folgt jedoch gemäß der Wahl von k_δ aus $x^{k+1} \notin R_\delta$, da $\psi(x^{k+1}) < \psi_\delta$, und $\|x^{k+1} - x^k\| < \frac{1}{2}\delta$, weil für $x \notin R_\delta \cup K_\delta$ die Abschätzung $\|x - x^k\| > \frac{1}{2}\delta$ gilt. Da $\delta > 0$ beliebig klein gewählt werden kann, folgt die Konvergenz der Folge gegen x^* . \square

1.2.12 Bemerkung Das Lemma lässt sich auch als Korollar zu Satz A.3.3 von Ostrowski auffassen, gemäß dem die Menge der Häufungspunkte von $\{x^k\}$ unter der Bedingung (1.2.10) ein Kontinuum bilden. Denn für jeden Häufungspunkt x^* gilt $\psi(x^*) = \eta$. Dann hat nach Voraussetzung die Menge der Häufungspunkte der Folge

keinen eigenen Häufungspunkt. Da sie jedoch ein Kontinuum bildet, ist sie leer oder einelementig. \square

Die in Lemma 1.2.11 vorausgesetzte Existenz eines Häufungspunktes der Folge $\{x^k\}$ wird im Weiteren dadurch erfüllt, dass die Beschränktheit der Folge verlangt wird. Dies ist eine übliche Voraussetzung und stellt keine bedeutende Einschränkung für die untersuchten Verfahren dar.

Wendet man das Lemma mit $\psi = f$ oder $\psi = \|\nabla f\|$ an, so erhält man für Minimierungsverfahren relevante Aussagen.

1.2.13 Korollar Sei $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ nach unten beschränkt und stetig, und die beschränkte Folge $\{x^k\} \subseteq \mathbb{R}^n$ genüge $\lim_{k \rightarrow \infty} \|x^{k+1} - x^k\| = 0$.

- (i) Konvergiert die Bildfolge $\{f(x^k)\}$ gegen $f^* = \min \{f(x) : x \in \mathbb{R}^n\}$ und hat die Menge der Urbilder $f^{-1}(f^*)$ keinen Häufungspunkt, dann konvergiert $\{x^k\}$ gegen eine Minimumstelle des Zielfunktional f .
- (ii) Ist f stetig differenzierbar und ist die Urbildfolge $\{x^k\}$ verallgemeinert minimierend, so konvergiert $\{x^k\}$ gegen einen stationären Grenzwert, falls die Menge der stationären Stellen von f keinen Häufungspunkt hat.

Eine Teilmenge eines metrischen Raumes, die keinen Häufungspunkt besitzt, wird auch *diskret* genannt.

1.3 Verallgemeinerte Strahlminimierungsverfahren

The linesearch approach is a young person's dream: pick any old direction, and charge downhill as fast as possible regardless of the consequences. [18]

Ein allgemeines Strahlminimierungsverfahren nach [87, Abschnitt 6.1.4], lässt sich mit einer nichtmonotonen Strategie aus [38] zu einem verallgemeinerten Verfahren abwandeln, indem die Abstiegsbedingung (1.1.2) in der Strahlminimierung

$$f(x^k + \alpha^k d^k) \leq f(x^k) + \delta \alpha^k \langle g^k, d^k \rangle \quad \text{durch} \quad f(x^k + \alpha^k d^k) \leq F^k + \delta \alpha^k \langle g^k, d^k \rangle$$

ersetzt wird. Mit dieser Modifikation und einer weiteren generalisierten Bedingung an den Zielfunktionswert an der Stelle x^{k+1} ergibt sich aus dem Verfahren (StMin) des Algorithmus 1.1.1 das folgende verallgemeinerte Strahlminimierungsverfahren.

1.3.1 Algorithmus (vStMin)

wähle $x^0 \in \mathbb{R}^n$, $0 < \mu \leq 1$, $0 < \delta < 1$, $M \in \mathbb{N}_0$

$m^{-1} = -1$

für $k = 0, 1, \dots$

falls $g^k = 0$, stop

wähle m^k mit $0 \leq m^k \leq \min\{m^{k-1} + 1, M\}$

setze $F^k = \max_{0 \leq j \leq m^k} f^{k-j}$

wähle $d^k \in \mathbb{R}^n$ mit $-\langle g^k, d^k \rangle > 0$

bestimme Schrittweite $\alpha^k \geq 0$ mit

$$f(x^k + \alpha^k d^k) \leq F^k + \delta \alpha^k \langle g^k, d^k \rangle \quad (1.3.1)$$

wähle x^{k+1} mit

$$f(x^{k+1}) \leq \mu f(x^k + \alpha^k d^k) + (1 - \mu) F^k \quad (1.3.2)$$

Für den Fall $M = 0$, was einen Abstieg im Zielfunktionswert in *jedem* Iterationsschritt bedeutet, ist die Wahl von x^{k+1} gemäß (1.3.2), also

$$f(x^{k+1}) \leq \mu f(x^k + \alpha^k d^k) + (1 - \mu) f(x^k),$$

bereits in [87, 6.1.4] vorgeschlagen worden.

Der nachstehende Satz ist ein Sonderfall der unten folgenden Sätze 1.4.10 und 1.4.11 und wird daher ohne Beweis angegeben. Er charakterisiert die Konvergenz des Algorithmus 1.3.1 unter geeigneten Voraussetzungen, insbesondere an die Korrekturrichtung d^k und die Schrittweite α^k .

1.3.2 Satz Sei $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ nach unten beschränkt und differenzierbar, und $\{x^k\}$ sei eine von Algorithmus 1.3.1 erzeugte, nicht abbrechende Folge. Weiterhin gebe es \mathcal{F} -Funktionen φ^1 und φ^2 , derart dass für $k \in \mathbb{N}_0$ die Abschätzungen

$$-\langle g^k, d^k \rangle \geq \varphi^1(\|g^k\|) \quad (1.3.3a)$$

$$\alpha^k \geq \varphi^2(\|g^k\|) \quad (1.3.3b)$$

für die Absteigsrichtungen und Schrittweiten gelten. Dann ist die Folge $\{x^k\}$ verallgemeinert schwach minimierend.

Für die übrigen Aussagen sei zudem vorausgesetzt, dass $\bar{\alpha} > 0$ sowie \mathcal{F}^* -Funktionen ψ^1 und ψ^2 existieren, so dass die Ungleichungen

$$\alpha^k \leq \bar{\alpha} \quad (1.3.4a)$$

$$\|d^k\| \leq \psi^1(\|g^k\|) \quad (1.3.4b)$$

$$\|x^{k+1} - x^k\| \leq \psi^2(\alpha^k \|d^k\|) \quad (1.3.4c)$$

für alle $k \in \mathbb{N}_0$ erfüllt sind. Dann gelten die folgenden Aussagen.

- (i) Die Iterationsfolge $\{x^k\}$ ist verallgemeinert minimierend; insbesondere ist jeder Häufungspunkt stationär.
- (ii) Kein Häufungspunkt von $\{x^k\}$ ist lokales Maximum von f .
- (iii) Die Zielfunktionswertfolge $\{f(x^k)\}$ konvergiert.
- (iv) Die Folge $\{x^k\}$ konvergiert, falls es eine die Folge enthaltende, abgeschlossene Menge gibt, die keinen Häufungspunkt von $S_0 = \{x \in \mathbb{R}^n : \nabla f(x) = 0\}$ enthält.

Die Struktur des Satzes 1.3.2 lehnt sich an die des Satzes aus [38] an, der den theoretischen Hintergrund für ein nichtmonotones Abstiegsverfahren mit Armijo-Schrittweitenbestimmung liefert.

Es ist bekannt, dass bei Verfahren, deren Abstiegsrichtungen d^k sich durch

$$d^k = - (H^k)^{-1} g^k$$

in Abhängigkeit vom Gradienten darstellen lassen, wie es bei den Newton- oder

Quasi-Newtonverfahren der Fall ist, die Voraussetzung (1.3.3a) erfüllt ist, falls die Matrizen H^k gleichmäßig positiv definit und beschränkt sind, im Sinne von

$$\lambda \langle x, x \rangle \leq \langle H^k x, x \rangle \leq \Lambda \langle x, x \rangle \quad \forall x \in \mathbb{R}^n \quad \forall k \in \mathbb{N}_0 \quad (1.3.5)$$

mit positiven Konstanten λ und Λ . Dann gilt

$$-\langle g^k, d^k \rangle \geq \frac{1}{\Lambda} \|g^k\|^2 \geq \frac{\lambda^2}{\Lambda} \|d^k\|^2$$

und die Bedingungen (1.3.3a) und (1.3.4b) des Konvergenzsatzes sind erfüllt. Mit einer Schrittweitenstrategie nach Armijo (*backtracking*, [71]) und der Aufdatierung $x^{k+1} = x^k + \alpha^k d^k$ werden auch die übrigen Voraussetzungen erfüllt, wie das nächste Lemma als leichte Verallgemeinerung von Lemma 3.2 in [44] zeigt.

1.3.3 Lemma (Armijo–Schrittweite) *Es sei $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ differenzierbar mit Lipschitz–stetiger Ableitung (Lipschitzkonstante L). Die Armijo–Schrittweite*

$$\alpha^k = \max \{ \alpha \in \{ \bar{\alpha} \beta^j : j \in \mathbb{N}_0 \} : f(x^k + \alpha d^k) \leq f(x^k) + \delta \alpha \langle \nabla f(x^k), d^k \rangle \}$$

für gegebenes $\bar{\alpha} > 0$, $\beta \in (0, 1)$ und $\delta \in (0, 1)$ genügt für $-\langle \nabla f(x^k), d^k \rangle > 0$ der Abschätzung

$$\alpha^k \geq \min \left\{ \bar{\alpha}, -2\beta \frac{(1-\delta) \langle \nabla f(x^k), d^k \rangle}{L \|d^k\|^2} \right\}.$$

Beweis

Es gilt nach Lemma A.3.1 (mit $x = x^k$ und $y = x^k + \alpha d^k$)

$$f(x^k + \alpha d^k) \leq f(x^k) + \alpha \langle \nabla f(x^k), d^k \rangle + \alpha^2 \frac{L}{2} \|d^k\|^2.$$

Setzt man $\tilde{\alpha}^k = -\frac{2(1-\delta) \langle \nabla f(x^k), d^k \rangle}{L \|d^k\|^2}$, ergibt sich

$$\begin{aligned} f(x^k + \alpha d^k) &\leq f(x^k) + \alpha \delta \langle \nabla f(x^k), d^k \rangle + \alpha \left((1-\delta) \langle \nabla f(x^k), d^k \rangle + \alpha \frac{L}{2} \|d^k\|^2 \right) \\ &\leq f(x^k) + \alpha \delta \langle \nabla f(x^k), d^k \rangle \end{aligned}$$

für alle $\alpha \in [0, \tilde{\alpha}^k]$, woraus wegen der Armijo–Strategie $\alpha^k \geq \min \{ \bar{\alpha}, \beta \tilde{\alpha}^k \}$ folgt. \square

1.4 Raumzerlegungsverfahren

1.4.1 Definition und Eigenschaften der Raumzerlegung

Zerlegungsstrategien treten leitmotivisch im wissenschaftlichen Rechnen überall dort auf, wo „große“ Probleme d. h. speicher- oder zeitintensive zu lösen sind. Die Zerlegung kann darauf abzielen, Aufgaben mit einer bewältigbaren Speicheranforderung zu erhalten, oder darauf, unabhängige und damit parallel berechenbare Teilaufgaben zu formulieren.

Im Bereich linearer wie nichtlinearer Gleichungen, insbesondere in dem der partiellen Differentialgleichungen sind Theorie und numerische Verfahren mit Zerlegungsstrategien, wie den bekannten Konzepten der Mehrfach- und Gebietszerlegung, weit entwickelt, [30, 96, 76, 95]. Dahingegen sind Zerlegungsmethoden für stetige Optimierungsprobleme weit weniger erforscht, [25, 9, 26, 81, 65, 80, 79, 91, 92, 68, 78, 88, 89, 42, 61, 62, 63, 21]. Dies gilt für freie Minimierungsprobleme, insbesondere jedoch für den restringierten Fall [25, 26, 68, 89, 63]. Auch in [17] findet sich zum freien Minimierungsproblem eine Diskussion über Unterraumverfahren, allerdings nicht mit dem Ziel paralleler Raumzerlegungsverfahren.

Der Zugang von Renaut und Mittelman in [80] ist es, den Ansatz eines *block multisplitting* im Kontext der nichtlinearen Mehrfachzerlegungen, [30], auf das Optimierungsproblem (*Min*) anzuwenden. Mit der Blockzerlegung $x = (x_1, \dots, x_p) \in \mathbb{R}^{n_1} \times \dots \times \mathbb{R}^{n_p}$ werden in einem Verfahren mit einer nicht überlappenden, blockweisen Jacobi-Struktur Korrekturen in den einzelnen Blöcken gemäß

$$y_i^k = \operatorname{argmin}_{y_i \in V_i} f(x_1^k, \dots, x_{i-1}^k, y_i, x_{i+1}^k, \dots, x_p^k)$$

berechnet, um anschließend in einem Synchronisationsschritt mit einer Konvexkombination

$$x^{k+1} = \sum_{i=1}^p \alpha_i^k(x_1^k, \dots, x_{i-1}^k, y_i^k, x_{i+1}^k, \dots, x_p^k)$$

eine neue globale Iterierte zu bilden, [81, 80, 79]. Das als *parallel gradient distribution* bezeichnete Verfahren in [66] besitzt ebenfalls Jacobi-Struktur, beschränkt sich in der Darstellung jedoch auf gradientenähnliche Verfahren und formuliert hinreichende Abstiegsbedingungen in den einzelnen Teilloptimierungsproblemen. Die

Arbeit [42] von Grippo und Sciandrone bietet einen viel allgemeineren Zugang zur Untersuchung nicht überlappender Blockzerlegungen. Ausgehend von Operatoren $T_i : \mathbb{R}^{n_1} \times \dots \times \mathbb{R}^{n_p} \rightarrow \mathbb{R}^{n_i}$ werden auf der Grundannahme

$$f(x_1^k, \dots, x_{i-1}^k, T_i(x^k), x_{i+1}^k, \dots, x_p^k) \leq f(x^k)$$

und weiteren Annahmen über das Verhalten von $\nabla_{x_i} f(y^k)$ und $\|T_i(x^k) - x_i^k\|$ Verfahrenseigenschaften abgeleitet.

Bei den von Ferris, Mangasarian, [26], und Solodov, [88, 89], unter der Bezeichnung *parallel variable distribution* untersuchten Verfahren treten bei der Berechnung der Teilkorrektur im i -ten Block in den Nebenblöcken $j \neq i$ Suchrichtungen d_{ij} in Gestalt des sogenannten *forget-me-not*-Termes $\lambda_{ij} d_{ij}$ hinzu. Die Teilraumminimierungen

$$(y_i^k, \lambda_{i1}^k, \dots, \lambda_{ii}^k, \dots, \lambda_{ip}^k) = \underset{y_i, \lambda_{ij}}{\operatorname{argmin}} \{ f(x_1^k + \lambda_{i1} d_{i1}^k, \dots, x_{i-1}^k + \lambda_{i,i-1} d_{i,i-1}^k, y_i, x_{i+1}^k + \lambda_{i,i+1} d_{i,i+1}^k, \dots, x_p^k + \lambda_{ip} d_{ip}^k) \}$$

(λ_{ii}^k taucht nicht auf) führen über die Zwischenlösungen

$$\hat{x}^{k,i} = (x_1^k + \lambda_{i1}^k d_{i1}^k, \dots, x_{i-1}^k + \lambda_{i,i-1}^k d_{i,i-1}^k, y_i^k, x_{i+1}^k + \lambda_{i,i+1}^k d_{i,i+1}^k, \dots, x_p^k + \lambda_{ip}^k d_{ip}^k)$$

im Synchronisationsschritt schließlich zur Aufdatierung

$$x^{k+1} = \alpha_0^k x^k + \sum_{i=1}^p \alpha_i^k \hat{x}^{k,i}$$

in der Form einer Konvexkombination.

Bereits in [92] taucht in diesem Zusammenhang bei Tai die Raumzerlegung in der Gestalt $V = \sum_{i=1}^p V_i$ auf. Mit der Fortführung dieses Ansatzes stellt die Publikation [31] von Frommer und Renault einen allgemeinen Zugang für den unrestringierten Fall dar, der es gestattet die beiden Zugänge *multisplitting* und *parallel variable distribution* in einen gemeinsamen Rahmen einzubetten.

Die Arbeiten [89] und [92] gehen bereits auf Zerlegungsverfahren im konvex restringierten Fall ein. Die Behandlung von restringierten und insbesondere nicht separa-

bel gleichungsrestringierten Optimierungsproblemen bleibt jedoch unbefriedigend, [26, 81].

1.4.1 Definition (Raumzerlegung) Seien V und W_i , $i = 1, \dots, p$ endlichdimensionale Vektorräume. Gegeben seien ferner lineare Abbildungen $R_i : V \rightarrow W_i$ (Restriktionen) und $P_i : W_i \rightarrow V$ (Einbettungen). Dann heißt $\{(W_i, P_i, R_i) : i = 1, \dots, p\}$ Raumzerlegung von V , falls die folgenden Eigenschaften erfüllt sind.

(i) V lässt sich als Summe der eingebetteten Räume $V_i = P_i W_i$ darstellen,

$$V = \sum_{i=1}^p V_i. \quad (1.4.1)$$

(ii) R_i ist Linksinverse von P_i , d. h. für alle $x \in W_i$ ist

$$R_i P_i x = x. \quad (1.4.2)$$

(iii) Es gibt eine positive reelle Zahl c mit

$$\sum_{i=1}^p \|R_i x\|_{W_i} \geq c \|x\|_V \quad \text{für alle } x \in V. \quad (1.4.3)$$

Die gegebene Definition der Raumzerlegung verlangt nicht wie in [31], dass die W_i Unterräume des Vektorraumes V sind. Die Raum W_i wird hier als *Teilraum* in Abgrenzung zu dem Unterraum $V_i = P_i W_i$ bezeichnet.

Ebensowenig wird verlangt, dass $\|R_i\| = \|P_i\| = 1$ und die Abbildungen orthogonale Projektoren sind. Vielmehr können mit den Restriktionen und Einbettungen lineare Koordinatentransformationen und insbesondere Skalierungen beschrieben werden. Für nicht überlappende Zerlegungen in Koordinatenräume ist dieser Ansatz bereits in [32] verfolgt worden.

1.4.2 Lemma Sei $\{(W_i, P_i, R_i) : i = 1, \dots, p\}$ eine Raumzerlegung von V . Es gelten die folgenden Aussagen.

(i) Die Einbettungen P_i sind injektiv.

(ii) Die Restriktionen R_i sind surjektiv.

(iii) Es gibt positive Konstanten C und c , so dass

$$C \|x\|_V \geq \sum_{i=1}^p \|R_i x\|_{W_i} \geq c \|x\|_V \quad \text{für alle } x \in V \text{ gilt.} \quad (1.4.4)$$

Insbesondere ist $x \in V$ genau dann Null, wenn $R_i x = 0$ für $i = 1, \dots, p$ gilt.

(iv) Seien $Q_i : V \rightarrow V$ die Orthogonalprojektionen auf die Unterräume $V_i = P_i W_i$, $i = 1, \dots, p$, d. h. es gelten $Q_i^2 = Q_i$, $\text{bild}(Q_i) = V_i$ und $Q_i' = Q_i$. Dann gibt es eine positive Konstante c , so dass

$$\max\{\|Q_i x\|_V : 1 \leq i \leq p\} \geq c \|x\|_V \quad \text{für alle } x \in V \text{ gilt.} \quad (1.4.5)$$

(v) Es gibt positive Konstanten C und c , so dass

$$C \|x\|_V \geq \sum_{i=1}^p \|P_i' x\|_{W_i} \geq c \|x\|_V \quad \text{für alle } x \in V \text{ gilt.} \quad (1.4.6)$$

Beweis

Mit (1.4.2) folgt aus $P_i x = P_i y$ die Identität $x = R_i P_i x = R_i P_i y = y$, so dass P_i injektiv ist, während sich die Surjektivität von R_i unmittelbar an (1.4.2) ablesen lässt. Die zweite Abschätzung in (1.4.4) aus Aussage (iii) gilt nach Voraussetzung (1.4.3), während die erste mit $C = p \max\{\|R_i\| : i = 1, \dots, p\}$ erfüllt ist.

Für den Beweis von (iv) sei angenommen, dass es eine Folge $\{x^k\}$ gebe mit

$$\max\{\|Q_i x^k\|_V : 1 \leq i \leq p\} \leq \frac{1}{k} \|x^k\|_V.$$

Es kann sowohl durch Normierung die Eigenschaft $\|x^k\|_V = 1$ als auch durch Teilfolgenbildung in einem Kompaktum die Konvergenz der Folge gegen einen Grenzwert x^* angenommen werden. Dann gilt $\|x^*\|_V = 1$ und mit

$$\|Q_i x^*\|_V \leq \|Q_i x^k\|_V + \|Q_i(x^* - x^k)\|_V \leq \frac{1}{k} + \|Q_i(x^* - x^k)\|_V \rightarrow 0 \quad \text{für } k \rightarrow \infty$$

für jedes i auch $Q_i x^* = 0$, was $x^* \perp V_i$ bedeutet. Wegen der Eigenschaft (1.4.1) der Raumzerlegung folgt daraus $x^* \perp V$ und somit $x^* = 0$ im Widerspruch zu $\|x^*\| = 1$.

Wegen $\ker(P'_i) = \text{bild}(P_i)^\perp = V_i^\perp$ gilt mit Aussage (iv) die Abschätzung

$$\sum_{i=1}^p \|P'_i x\| = \sum_{i=1}^p \|P'_i Q_i x\| \geq \sum_{i=1}^p \sigma_i^{\min} \|Q_i x\| \geq \min_{1 \leq i \leq p} \{\sigma_i^{\min}\} c \|x\|$$

für jedes $x \in V$, wobei $\sigma_i^{\min} > 0$ der kleinste Singulärwert von P_i ist. Mit $C = p \max\{\|P_i\| : i = 1, \dots, p\}$ ist Aussage (v) bewiesen. \square

Während die Ungleichung (1.4.6) letztlich eine Folge der definierenden Eigenschaft (1.4.1) einer Raumzerlegung und der Injektivität der Einbettungen P_i ist, muss die Bedingung (1.4.3) an die Restriktionen R_i nicht notwendig erfüllt sein, wie das folgende Beispiel zeigt.

1.4.3 Beispiel Mit den Räumen $V = \mathbb{R}^{2n}$, $W_1 = W_2 = \mathbb{R}^n$ seien die Einbettungen durch

$$P_1 = \begin{pmatrix} I_n \\ 0_{n \times n} \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad P_2 = \begin{pmatrix} 0_{n \times n} \\ I_n \end{pmatrix}$$

sowie die Restriktionen durch

$$R_1 = \begin{pmatrix} I_n & -I_n \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad R_2 = \begin{pmatrix} -I_n & I_n \end{pmatrix}$$

gegeben. Dann ist offenbar $R_1 P_1 = R_2 P_2 = I_n$. Jedoch gilt auch für jedes Element $x \in \mathbb{R}^{2n}$, das sich mit einem $y \in \mathbb{R}^n$ in der Gestalt $x = (y', y)'$ darstellen lässt, die Identität $R_1 x = R_2 x = 0$. Damit ist (1.4.3) in diesem Fall nicht erfüllbar. \square

Mit der natürlichen Festlegung $R_i = (P'_i P_i)^{-1} P'_i$ erhält man zu gegebenen Räumen W_i und Einbettungen P_i , die (1.4.1) genügen, immer eine vollständige Raumzerlegung, falls

$$\dim(\text{bild}(P_i)) = \dim(W_i) \leq \dim(V)$$

gilt, was gerade die Injektivität der Einbettungen bedeutet.

Das folgende Lemma ist ein nützliches Hilfsmittel zur Arbeit mit \mathcal{F} -Funktionen bei Raumzerlegungen.

1.4.4 Lemma Seien W_i , $i = 1, \dots, p$, und V normierte Vektorräume sowie

$$S_i : V \rightarrow W_i$$

lineare Abbildungen, für welche positive Konstanten c und C existieren, derart dass

$$C\|x\|_V \geq \sum_{i=1}^p \|S_i x\|_{W_i} \geq c\|x\|_V \quad \text{für alle } x \in V \quad (1.4.7)$$

gilt. Außerdem seien φ_i gegebene \mathcal{F} -Funktionen. Dann gibt es zwei \mathcal{F} -Funktionen φ und ϕ mit der Eigenschaft

$$\phi(\|x\|_V) \geq \sum_{i=1}^p \varphi_i(\|S_i x\|_{W_i}) \geq \varphi(\|x\|_V) \quad \text{für alle } x \in V. \quad (1.4.8)$$

Beweis

Die Abbildung $t \mapsto \varphi(t) = \min\{\varphi_i(\frac{c}{p}t) : i = 1, \dots, p\}$ ist nach Aussage A.1.2 eine \mathcal{F} -Funktion. Für jedes $x \in V$ gibt es wegen (1.4.7) einen Index j_x mit $\|S_{j_x} x\|_{W_{j_x}} \geq \frac{c}{p}\|x\|_V$, so dass

$$\sum_{i=1}^p \varphi_i(\|S_i x\|_{W_i}) \geq \varphi_{j_x}(\|S_{j_x} x\|_{W_{j_x}}) \geq \varphi_{j_x}(\frac{c}{p}\|x\|_V) \geq \varphi(\|x\|_V).$$

Die Funktion $\phi \in \mathcal{F}$ lässt sich mit $t \mapsto \phi(t) = p \max\{\varphi_i(Ct) : i = 1, \dots, p\}$ angeben. □

1.4.5 Bemerkung Die Voraussetzung (1.4.7) des Lemmas für die rechte Abschätzung kann mit einer \mathcal{F} -Funktion ω zu

$$\sum_{i=1}^p \|S_i x\|_{W_i} \geq \omega(\|x\|_V) \quad \text{für alle } x \in V$$

formal abgeschwächt werden. Die \mathcal{F} -Funktion φ in (1.4.8) lässt sich dann durch

$$\varphi(t) = \min_{1 \leq j \leq p} \left\{ \varphi_j\left(\frac{1}{p}\omega(t)\right) \right\}$$

auf \mathbb{R}_0^+ bilden. Die Konstante c in (1.4.7) lässt sich immer mit $c = \min\{\sum_{i=1}^p \|S_i x\| : \|x\| = 1\} \geq 0$ angeben. Falls es jedoch eine \mathcal{F} -Funktion ω mit der obigen Eigenschaft gibt, so ist wegen $\omega(1) > 0$ auch $c > 0$. Für eine nicht lineare Situation wie im konvex restringierten Fall des Abschnittes 2.2 kann die Abschwächung jedoch

hilfreich sein. □

Die Aussagen des folgenden Lemmas werden vorbereitend für das zweite Kapitel zur Verfügung gestellt.

1.4.6 Lemma Sei $H : V \rightarrow V$ eine lineare Abbildung, und es gebe eine positive Konstante α , so dass $\langle Hv, v \rangle \geq \alpha \langle v, v \rangle$ für alle $v \in V$ erfüllt ist. Weiterhin sei $\{(W_i, P_i, R_i) : i = 1, \dots, p\}$ eine Raumzerlegung von V . Dann gelten die folgenden Aussagen.

(i) Es gibt ein $\beta > 0$ mit

$$\langle HP_i w, P_i w \rangle_V \geq \beta \|w\|_{W_i}^2, \quad \forall w \in W_i \quad (i = 1, \dots, p). \quad (1.4.9)$$

(ii) Gegeben seien positive Konstanten α_i , $i = 1, \dots, p$. Dann gibt es ein $\gamma > 0$ mit

$$\sum_{i=1}^p \alpha_i \left\langle \left(P_i' H P_i \right)^{-1} P_i' v, P_i' v \right\rangle_{W_i} \geq \gamma \|v\|_V^2, \quad \forall v \in V.$$

Beweis

Wegen Aussage (iii) des Lemmas 1.4.2 gibt es eine positive Konstante C , so dass

$$\langle HP_i w, P_i w \rangle \geq \alpha \|P_i w\|^2 \geq \frac{\alpha}{C} \sum_{j=1}^p \|R_j P_i w\|_{W_j}^2 \geq \frac{\alpha}{C} \|R_i P_i w\|_{W_i}^2 = \beta \|w\|_{W_i}^2$$

mit $\beta = \frac{\alpha}{C}$ gilt. Die zweite Behauptung folgt aus der Anwendung von Aussage (v) aus Lemma 1.4.2 unter Berücksichtigung der Äquivalenz der 1- und 2-Norm in \mathbb{R}^p in der Abschätzung

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^p \alpha_i \left\langle \left(P_i' H P_i \right)^{-1} P_i' v, P_i' v \right\rangle &\geq \sum_{i=1}^p \frac{\alpha_i \beta}{\|P_i' H P_i\|^2} \|P_i' v\|^2 \geq \frac{b}{\beta} \sum_{i=1}^p \|P_i' v\|^2 \\ &\geq \frac{b}{p\beta} \left(\sum_{i=1}^p \|P_i' v\| \right)^2 \geq \gamma \|v\|^2 \end{aligned}$$

mit $0 < b \leq \min_{i=1, \dots, p} \{\alpha_i\}$, $\gamma = \frac{bc^2}{p\beta}$ und c aus der Ungleichung (1.4.6). □

1.4.2 Monotone Raumzerlegungsverfahren

Die Grundidee paralleler Raumzerlegungsverfahren (RzV) besteht in der unabhängigen Berechnung von Korrekturen in den einzelnen Räumen W_i der Raumzerlegung. Die i -te Teilraumoptimierung zur Aufdatierung von x^k findet in dem affinen Unterraum $x^k + P_i W_i$ von V statt und führt in W_i zu einer Teilraumkorrektur y_i^k . Der Gradient der auf den Teilraum W_i eingeschränkten Zielfunktion $f_i(y; x) = f(x + P_i y)$ lässt sich gemäß

$$\nabla_y f_i(y; x) = P_i' \nabla f(x + P_i y)$$

darstellen. Wegen Aussage (v) des Lemmas 1.4.2 ist x^* *globale* kritische Stelle von f im Sinne von $\nabla f(x^*) = 0$, wenn x^* *lokal* kritisch in *allen* Teilräumen (einer beliebigen Raumzerlegung) im Sinne von

$$\nabla_y f_i(0, x^*) = 0 \quad i = 1, \dots, p$$

ist. Diese Eigenschaft geht für den unten diskutierten konvex restringierten Fall verloren.

In einem Synchronisationsschritt wird nach den parallel ausführbaren Teilraumoptimierungen aus x^k und den y_i^k die nächste globale Iterierte x^{k+1} unter den Forderungen

$$x^{k+1} \in x^k + \text{spann}\{P_i y_i^k : i = 1, \dots, p\} \quad (1.4.10a)$$

$$f(x^{k+1}) \leq \mu \sum_{i=1}^p \beta_i f(x^k + P_i y_i^k) + (1 - \mu) f(x^k) \quad (1.4.10b)$$

mit Verfahrensparametern $\beta_i > 0$, $\sum_{i=1}^p \beta_i = 1$ und $\mu \in (0, 1]$ ermittelt. Der folgende Algorithmus eines parallelen Raumzerlegungsverfahrens stammt (mit einem etwas eingeschränkteren Raumzerlegungsbegriff und $\mu = 1$) aus [31].

1.4.7 Algorithmus (StMinRz)

wähle $x^0 \in X$, $\beta_i > 0$ mit $\sum_{i=1}^p \beta_i = 1$ und $\mu \in (0, 1]$

für $k = 0, 1, \dots$

falls $g^k = 0$, stop

wähle Raumzerlegung $\{(W_i^k, P_i^k, R_i^k) : i = 1, \dots, p\}$ von V

für $i = 1, \dots, p$

berechne $y_i^k \in W_i^k$ mit

$$f(x^k + P_i^k y_i^k) = \min_{y_i \in W_i^k} f(x^k + P_i^k y_i)$$

setze $x^{i,k} = x^k + P_i^k y_i^k$

bestimme γ_i^k , $i = 1, \dots, p$, so dass

$$x^{k+1} = x^k + \sum_{i=1}^p \gamma_i^k P_i^k y_i^k \quad (1.4.11)$$

mit

$$f(x^{k+1}) \leq \mu \sum_{i=1}^p \beta_i f(x^{i,k}) + (1 - \mu) f(x^k) \quad (1.4.12)$$

1.4.8 Bemerkung Falls das Zielfunktional f differenzierbar und ∇f Lipschitzstetig mit der Lipschitzkonstanten L ist, so gilt die Abschätzung

$$f(x^k) - f(x^{i,k}) \geq \frac{1}{2L\|P_i^k\|^2} \|(P_i^k)' \nabla f(x^k)\|^2 \quad (1.4.13)$$

für den Abstieg im Teilraum W_i^k . Das Lemma A.3.1 führt nämlich mit $x = x^k$ und $y = x^k - \frac{1}{L\|P_i^k\|^2} P_i^k (P_i^k)' \nabla f(x^k)$ in der dort verwendeten Notation wegen

$$f(x^{i,k}) = \min_{y_i \in W_i^k} f(x^k + P_i^k y_i)$$

zu

$$\begin{aligned} f(x^k) - f(x^{i,k}) &\geq f(x) - f(y) \geq -\langle \nabla f(x), y - x \rangle - \frac{L}{2} \|y - x\|^2 \\ &= \frac{1}{L\|P_i^k\|^2} \langle \nabla f(x^k), P_i^k (P_i^k)' \nabla f(x^k) \rangle^2 - \frac{1}{2L\|P_i^k\|^4} \|P_i^k (P_i^k)' \nabla f(x^k)\|^2 \\ &\geq \frac{1}{2L\|P_i^k\|^2} \|(P_i^k)' \nabla f(x^k)\|^2. \end{aligned}$$

Aus (1.4.12) folgt damit

$$f(x^k) - f(x^{k+1}) \geq \mu \sum_{i=1}^p \frac{\beta_i}{2L\|P_i^k\|^2} \|(P_i^k)' \nabla f(x^k)\| \geq c \|\nabla f(x^k)\|^2$$

mit einer geeigneten positiven Konstanten c . Diese Bedingung ist für ein nach unten beschränktes Zielfunktional hinreichend für die Aussagen, dass $\lim_{k \rightarrow \infty} \nabla f(x^k) = 0$ gilt und jeder Häufungspunkt der Iterationsfolge $\{x^k\}$ stationär ist. Jede mit Algorithmus 1.4.7 erzeugte Folge $\{x^k\}$ ist damit minimierend im Sinne von Definition 1.2.4. Für diese Eigenschaft genügt es, dass $x^{i,k}$ der Abschätzung (1.4.13) genügt, also nicht notwendig als Minimumstelle im Teilraum W_i^k zu bestimmen ist; siehe dazu die Bemerkung in [31, 3.2]. Es ist beispielsweise (1.4.13) erfüllt, falls $x^{i,k}$ aus x^k durch einen Schritt in negativer Gradientenrichtung $d_i^k = -(P_i^k)' \nabla f(x^k)$ mit Schrittweite $\alpha_i^k = \frac{1}{L\|P_i^k\|^2}$ im Teilraum W_i^k bestimmt wird. \square

In [31] werden die folgenden Strategien im Synchronisationsschritt (1.4.11) zur Bestimmung der nächsten Iterierten $x^{k+1} = x^k + \sum_{i=1}^p \gamma_i^k P_i d_i^k$ aus den Teilraumkorrekturen diskutiert:

- vollständige Unterraumoptimierung

$$(\gamma_1^*, \dots, \gamma_p^*) = \underset{(\gamma_1, \dots, \gamma_p) \in \mathbb{R}^p}{\operatorname{argmin}} f\left(x^k + \sum_{i=1}^p \gamma_i (x^{i,k} - x^k)\right)$$

mit $x^{k+1} = x^k + \sum_{i=1}^p \gamma_i^* (x^{i,k} - x^k)$

- Auswahl der besten Teilraumkorrektur (im Sinne des größten erzielten Abstiegs)

$$x^{k+1} = \underset{i=1, \dots, p}{\operatorname{argmin}} f(x^{i,k})$$

- Konvexkombination mit $\gamma_i = \beta_i$ für ein konvexes Zielfunktional

$$x^{k+1} = \sum_{i=1}^p \beta_i x^{i,k}$$

Die erste Strategie liefert zwar den besten Abstieg im Zielfunktionswert, bedeutet

jedoch einen möglicherweise großen Rechenaufwand, ohne die Iteration entscheidend zu beschleunigen. Die einfachste Möglichkeit stellt für nicht konvexe Zielfunktionale die zweite Variante dar. Der damit erzielte Gesamtabstieg ist hinreichend für die darzustellende Konvergenztheorie. Dies gilt auch für die letzte Variante, die sich für konvexe Zielfunktionale anbietet, da die Konvexität in diesem Fall die Abschätzung $f(x^{k+1}) \leq \sum_{i=1}^p \beta_i f(x^{i,k})$ impliziert.

1.4.3 Verallgemeinerte Raumzerlegungsverfahren

Die verallgemeinerten Raumzerlegungsverfahren (vRzV) zur Bestimmung einer numerischen Lösung von (Min) ergeben sich aus den RzV durch den Übergang zu verallgemeinerten Abstiegsverfahren in der Berechnung der Teilraumkorrekturen.

1.4.9 Algorithmus (vStMinRz)

! additiv, für p Prozessoren

wähle $M \in \mathbb{N}_0$, $x^0 \in \mathbb{R}^n$, $\underline{\beta} \in (0, \frac{1}{p}]$, $\delta_i \in (0, 1)$ und $\mu \in (0, 1]$

für $k = 0, 1, \dots$

falls $g^k = 0$, stop

wähle m^k mit $0 \leq m^k \leq \min\{m^{k-1} + 1, M\}$

setze $F^k = \max_{0 \leq j \leq m^k} f(x^{k-j})$

wähle Raumzerlegung $\{(W_i^k, P_i^k, R_i^k) : i = 1, \dots, p\}$ von V

wähle $\beta_i^k \geq \underline{\beta}$ mit $\sum_{i=1}^p \beta_i^k = 1$

für $i = 1, \dots, p$

setze $g_i^k = (P_i^k)' g^k$

bestimme Abstiegsrichtung $d_i^k \in W_i^k$ mit $-\langle g_i^k, d_i^k \rangle_{W_i} \geq 0$

berechne Schrittweite $\alpha_i^k > 0$, so dass

$$f(x^k + \alpha_i^k P_i^k d_i^k) \leq F^k + \delta_i \alpha_i^k \langle g_i^k, d_i^k \rangle \quad (1.4.14)$$

setze $x^{i,k} = x^k + \alpha_i^k P_i^k d_i^k$

bestimme x^{k+1} mit

$$f(x^{k+1}) \leq \mu \sum_{i=1}^p \beta_i^k f(x^{i,k}) + (1 - \mu)F^k \quad (1.4.15)$$

Der folgende Satz zeigt, dass das Verfahren (vStMinRz) unter schwachen Voraussetzungen verallgemeinert schwach minimierende Folgen erzeugt.

1.4.10 Satz Sei f stetig differenzierbar und auf der von x^0 erzeugten Niveaumenge X_0 beschränkt. Die Folge $\{x^k\}$ sei eine nach Algorithmus 1.4.9 erzeugte und nicht abbrechende Iterationsfolge. Die Raumzerlegungen $\{(W_i^k, P_i^k, R_i^k) \mid i = 1, \dots, p\}$ im Algorithmus 1.4.9 seien so gewählt, dass die Abschätzung (1.4.3) mit einer vom Iterationsindex k unabhängigen und positiven Konstanten c erfüllt ist. Ferner gebe es \mathcal{F} -Funktionen φ_i^1 und φ_i^2 derart, dass in jedem Schritt die Abstiegsrichtungen d_i^k in den Teilräumen und die Schrittweiten α_i^k die Ungleichungen

$$-\langle g_i^k, d_i^k \rangle \geq \varphi_i^1(\|g_i^k\|) \quad (1.4.16a)$$

$$\alpha_i^k \geq \varphi_i^2(\|g_i^k\|) \quad (1.4.16b)$$

mit $g_i^k = (P_i^k)' \nabla f(x^k)$ für $i = 1, \dots, p$ erfüllen. Dann ist die Iterationsfolge $\{x^k\}$ verallgemeinert schwach minimierend.

Beweis

Nach Konstruktion ist $f^{k+1} \leq F^k$ und $\{x^k\} \subseteq X_0$. Die lokale verallgemeinerte Abstiegsbedingung (1.4.14) liefert

$$\begin{aligned} f(x^{k+1}) &\leq \mu \sum_{i=1}^p \beta_i^k f(x^{k,i}) + (1 - \mu)F^k \\ &\leq \mu \sum_{i=1}^p \beta_i^k (F^k + \delta_i \alpha_i^k \langle g_i^k, d_i^k \rangle) + (1 - \mu)F^k \\ &= F^k + \mu \sum_{i=1}^p \beta_i^k \delta_i \alpha_i^k \langle g_i^k, d_i^k \rangle. \end{aligned}$$

Gemäß Lemma 1.4.4 gibt es nun eine \mathcal{F} -Funktion φ mit

$$\begin{aligned} F^k - f(x^{k+1}) &\geq -\mu \sum_{i=1}^p \beta_i^k \delta_i \alpha_i^k \langle g_i^k, d_i^k \rangle \\ &\geq \mu \underline{\beta} \sum_{i=1}^p \delta_i \varphi_i^1(\|g_i^k\|) \varphi_i^2(\|g_i^k\|) \geq \varphi(\|g^k\|). \end{aligned}$$

Damit ist $\{x^k\}$ nach (ii) in Lemma 1.2.9 verallgemeinert schwach minimierend. \square

Verstärkt man etwas die Anforderungen an das verallgemeinerte Strahlminimierungsverfahren in den Teilräumen, so erhält man wesentlich stärkere Konvergenzaussagen.

1.4.11 Satz Die Voraussetzungen von Satz 1.4.10 seien erfüllt. Ferner gebe es positive Konstanten c und C , so dass die Bedingung (1.4.4) gleichmäßig für alle Raumzerlegungen $\{(W_i^k, P_i^k, R_i^k) : i = 1, \dots, p\}$ erfüllt ist. Die Iterationsfolge $\{x^k\}$ sei beschränkt, und es gebe eine Konstante $\bar{\alpha} > 0$ und \mathcal{F}^* -Funktionen ψ und ψ_i^1, ψ_i^2 , $i = 1, \dots, p$, mit denen die Ungleichungen

$$\begin{aligned} \alpha_i^k &\leq \bar{\alpha} \\ \|d_i^k\| &\leq \psi_i^1(\|g_i^k\|) \\ \|x^{k+1} - x^k\| &\leq \psi\left(\max_{0 \leq i \leq p} \psi_i^2(\alpha_i^k \|d_i^k\|)\right) \end{aligned}$$

für alle $k \in \mathbb{N}_0$ und $i \in \{1, \dots, p\}$ erfüllt sind. Dann gelten die folgenden Aussagen.

- (i) Die Iterationsfolge $\{x^k\}$ ist verallgemeinert minimierend; insbesondere ist jeder Häufungspunkt stationär.
- (ii) Kein Häufungspunkt von $\{x^k\}$ ist lokales Maximum von f .
- (iii) Die Zielfunktionswertfolge $\{f(x^k)\}$ konvergiert.
- (iv) Die Folge $\{x^k\}$ konvergiert, falls es eine die Folge enthaltende, abgeschlossene Menge gibt, die keinen Häufungspunkt von $S_0 = \{x \in \mathbb{R}^n : \nabla f(x) = 0\}$ enthält.

Beweis

Für die nicht abbrechende, nach Algorithmus 1.4.9 erzeugbare Iterationsfolge $\{x^k\}$

gilt $g^k \neq 0$ für alle $k \in \mathbb{N}_0$. Desweiteren existiert nach Lemma A.1.2 eine \mathcal{F} -Funktion Ψ , derart dass die Abschätzung

$$\begin{aligned} \|x^{k+1} - x^k\| &\leq \psi\left(\max_{0 \leq i \leq p} \psi_i^2(\alpha_i^k \|d_i^k\|)\right) \leq \psi\left(\max_{0 \leq i \leq p} \psi_i^2(\bar{\alpha} \psi_i^1(\|g_i^k\|))\right) \\ &\leq \psi\left(\max_{0 \leq i \leq p} \psi_i^2(\bar{\alpha} \psi_i^1(C\|g^k\|))\right) \leq \Psi(\|g^k\|) \end{aligned}$$

gilt. Es gibt nun ein Kompaktum K , das die Iterationsfolge enthält und in X_0 liegt, $\{x^k\} \subseteq K \subseteq X_0$. Das Zielfunktional ist auf K beschränkt und gleichmäßig stetig. Die ersten drei Aussagen des Satzes folgen dann aus (vi) und (v) des Lemmas 1.2.9. Die Behauptung (iv) hingegen ist eine Konsequenz des Korollars 1.2.13. \square

1.4.12 Bemerkung Die verallgemeinerten Raumzerlegungsverfahren sind hier lediglich als verallgemeinerte Strahlminimierungsverfahren mit der Beziehung (1.4.14) für die Teilraumkorrektur $y_i^k = \alpha_i^k d_i^k$ eingeführt. Wesentlich ist unabhängig von dieser speziellen Struktur, dass letztlich

$$f(x^k + P_i^k y_i^k) \leq F^k - \varphi_i(\|g_i^k\|) \quad (i = 1, \dots, p)$$

mit \mathcal{F} -Funktionen φ_i für die Teilraumkorrekturen gilt. \square

1.4.4 Nicht überlappende Raumzerlegungen

Falls für eine gegebene Raumzerlegung der Raum V die direkte Summe

$$V = \bigoplus_{i=1}^p V_i \tag{1.4.18}$$

der Unterräume $V_i = P_i W_i$ ist, d. h. $V_j \cap \sum_{i=1}^{j-1} V_i = 0$ für $j = 2, \dots, p$, so heißt die Raumzerlegung $\{(W_i, P_i, R_i)\}$ *nicht überlappend*. Für jedes $x \in V$ ist dann die Darstellung

$$x = \sum_{i=1}^p x_i, \quad x_i \in V_i$$

eindeutig, so dass x mit dem Tupel $(x_1, \dots, x_p) \in V_1 \times \dots \times V_p$ identifiziert werden kann. Diejenigen Komponenten, die nicht in V_i liegen, werden mit \bar{x}_i zusammen gefasst; dies erlaubt wiederum die Identifikation $x = (x_i, \bar{x}_i)$.

Für das Zielfunktional seien nun „Zerlegungen“

$$f(x_i, \bar{x}_i) = f_i(x_i, \bar{x}_i) + \bar{f}_i(\bar{x}_i) \quad (i = 1, \dots, p) \quad (1.4.19)$$

gegeben, [61]. Das Ziel der Zerlegungen ist es, solche Darstellungen zu finden, in denen $f_i(x_i, \bar{x}_i)$ mit geringerem Aufwand berechnet werden kann als $f(x_i, \bar{x}_i)$. Lässt sich das Zielfunktional im sogenannten separablen Fall sogar in der Form

$$f(x) = \sum_{i=1}^p f_i(x_i)$$

darstellen, so zerfällt das Optimierungsproblem offensichtlich in p voneinander völlig unabhängige Optimierungsaufgaben $x_i^* = \operatorname{argmin}_{x_i \in V_i} f_i(x_i)$.

1.4.13 Beispiel Der Raum $V = \mathbb{R}^2$ wird in die Teilräume $V_1 = \mathbb{R} \times \{0\}$ und $V_2 = \{0\} \times \mathbb{R}$ zerlegt. Das Zielfunktional $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ mit

$$f(x_1, x_2) = x_1^2 + x_2^2 + 2x_1x_2$$

lässt sich bezüglich der Raumzerlegung gemäß

$$\begin{aligned} f_1(x_1, x_2) &= x_1^2 + 2x_1x_2 & \bar{f}_1(x_2) &= x_2^2 \\ f_2(x_1, x_2) &= x_2^2 + 2x_1x_2 & \bar{f}_2(x_1) &= x_1^2 \end{aligned}$$

aufspalten, so dass die Auswertung von f_i einen geringeren Aufwand als von f verursacht. □

Es gilt offenbar auch

$$P'_i \nabla f(x_i, \bar{x}_i) = P'_i \nabla f_i(x_i, \bar{x}_i), \quad (1.4.20)$$

beziehungsweise $P'_i \nabla \bar{f}_i(\bar{x}_i) = 0$, so dass sich die Berechnung der Unterraumgradienten ggf. auch effizienter gestalten lässt, etwa bei numerischer Approximation durch finite Differenzen. Der Algorithmus 1.4.9 lässt sich damit für nicht überlappende

Raumzerlegungen in der Berechnung der lokalen Gradienten durch

$$g_i^k = (P_i^k)' \nabla f_i(x_i^k, \bar{x}_i^k)$$

und in der Strahlminimierung gemäß

$$f_i(x_i^k + \alpha_i^k P_i^k d_i^k, \bar{x}_i^k) \leq F^k - \bar{f}(\bar{x}_i^k) + \delta_i \alpha_i^k \langle g_i^k, d_i^k \rangle$$

modifizieren. Das modifizierte Verfahren bleibt dadurch für nicht überlappende Zerlegungen zum ursprünglichen Verfahren äquivalent in dem Sinne, dass eine von einem der Verfahren erzeugte Iterationsfolge auch vom jeweils anderen Verfahren erzeugt werden kann.

1.4.5 Konvergenzgeschwindigkeit

Im Abschnitt 1.4.3 konnte die Konvergenz der Zielfunktionswertfolge, die durch das Verfahren (vStMinRz) erzeugt wird, unter verhältnismäßig schwachen Voraussetzungen gezeigt werden. Für die monotone Variante des Verfahrens ($M = 0$) lässt sich, allerdings unter wesentlich stärkeren Voraussetzungen an das Zielfunktional, die Q-lineare Konvergenz zeigen. Diese Diskussion der Konvergenzgeschwindigkeit von $\{f(x^k)\}$ lehnt sich an die entsprechenden Darstellungen in [89, 32] für spezielle nicht überlappende Raumzerlegungsverfahren an.

Die Menge der Minimumstellen des Zielfunctionals in X_0 sei S_0^* , die nicht leer sei, so dass f auf X_0 das mit f^* bezeichnete Minimum annimmt. Für die Folge $\{x^k\}$ gelte

$$\lim_{k \rightarrow \infty} d(x^k, S_0^*) = 0 \tag{1.4.21}$$

mit $d(x^k, S_0^*) = \inf_{s \in S_0^*} \|x - s\|$. Weiter sei angenommen, dass f die Eigenschaft

$$\|\nabla f(x)\| \geq c_1 d(x, S_0^*) \quad \forall x \in X_0 \tag{1.4.22}$$

mit einer positiven Konstanten c_1 auf X_0 besitze. Dies ist z. B. für ein strikt konvexes Zielfunktional gegeben. Die zusätzliche Forderung

$$f(x) - f^* \leq c_2 d(x, S_0^*)^2 \quad \forall x \in X_0 \tag{1.4.23}$$

mit $c_2 > 0$ an das Zielfunktional ist immer erfüllt, wenn der Gradient ∇f Lipschitzstetig auf X_0 ist, und zwar wegen der Abschätzung

$$\begin{aligned} |f(x) - f(x^*)| &= \left| \int_0^1 \langle \nabla f(x^* + t(x - x^*)), x - x^* \rangle dt \right| \\ &\leq \int_0^1 tL \|x - x^*\|^2 dt = \frac{L}{2} \|x - x^*\|^2 = \frac{L}{2} d(x, S_0^*)^2 \end{aligned}$$

mit der Lipschitzkonstanten L und $x^* \in S_0^*$ mit $\|x - x^*\| = d(x, S_0^*)$, welches existiert, da $S_0^* = f^{-1}(f^*) \cap X_0$ abgeschlossen ist.

Als letzte Bedingung wird an den Abstieg der Teilraumkorrekturen die Forderung

$$F^k - f(x^{k,i}) \geq \bar{c}_i \| (P_i^k)' \nabla f(x^k) \|^2, \quad i = 1, \dots, p. \quad (1.4.24)$$

gestellt. Hieraus lässt sich mit der Eigenschaft (1.4.15) des Verfahrens die Ungleichung

$$\begin{aligned} F^k - f(x^{k+1}) &\geq \mu \sum_{i=1}^p \beta_i^k (F^k - f(x^{k,i})) \geq \\ &\mu \sum_{i=1}^p \beta_i^k \bar{c}_i \| (P_i^k)' \nabla f(x^k) \|^2 \geq c \| \nabla f(x^k) \|^2 \end{aligned}$$

mit einer geeigneten Konstanten $c > 0$ ableiten, mit der Folge

$$F^k - f(x^{k+1}) \geq c \| \nabla f(x^k) \|^2 \geq c c_1 d(x^k, S_0^*)^2 \geq \frac{c c_1}{c_2} (f(x^k) - f^*)$$

und

$$F^k - f(x^k) + \left(1 - \frac{c c_1}{c_2}\right) (f(x^k) - f^*) \geq f^{k+1} - f^*.$$

Mit $q = 1 - \frac{c c_1}{c_2} \in (0, 1)$ folgt daraus

$$\sum_{j=0}^k (F^j - f(x^j))(q)^j + (q)^{k+1} (f(x^0) - f^*) \geq f(x^{k+1}) - f^*.$$

Für den monotonen Fall $F^k = f(x^k)$ lässt sich damit wegen

$$f(x^{k+1}) - f^* \leq q(f(x^k) - f^*) \leq (q)^{k+1}(f(x^0) - f^*)$$

die Q -lineare Konvergenz der Zielfunktionswertfolge feststellen.

Wie in [32, S. 667] folgt aus

$$\begin{aligned} (1+q)(q)^k(f(x^0) - f^*) &\geq (1+q)(f(x^k) - f^*) \\ &\geq |f(x^k) - f^*| + |f(x^{k+1}) - f^*| \geq |f(x^k) - f(x^{k+1})| \\ &\geq c\|\nabla f(x^k)\|^2 \geq c(c_1)^2 d(x^k, S_0^*)^2 \end{aligned}$$

die Abschätzung $d(x^k, S_0^*) \leq Cq^{\frac{k}{2}}$, was die R -lineare Konvergenz der Folge bedeutet.

Die Diskussion lässt sich in dem folgenden Satz zusammen fassen.

1.4.14 Satz *Es seien die Voraussetzungen des Satzes 1.4.11 erfüllt, und die Iterationsfolge $\{x^k\}$ sei nach dem monotonen Algorithmus 1.4.9, d. h. mit $M = 0$, generiert. Die Iterationsfolge habe die Eigenschaft (1.4.21) und erzeuge in den Teilräumen jeweils einen Abstieg, der der Abschätzung (1.4.24) genügt. Desweiteren habe das Zielfunktional f die Eigenschaften (1.4.22) und (1.4.23) auf X_0 . Dann strebt die Zielfunktionswertfolge $\{f(x^k)\}$ Q -linear gegen das Minimum f^* , und die Folge $\{d(x^k, S_0^*)\}$ konvergiert R -linear.*

Dieses Ergebnis ist etwas allgemeiner als Korollar 3.5 in [31].

1.5 Vergangenheitsbezug in der Abstiegsrichtung

The trust-region approach, by contrast, is ideally suited to those of us who now look back upon our youth with fond memories. [18]

1.5.1 Das Verfahren

Die bisher vorgestellten verallgemeinerten Abstiegsverfahren beziehen über die Abstiegsbedingung

$$f(x^k + \alpha^k d^k) \leq \max_{0 \leq j \leq m^k} \{f(x^{k-j})\} + \delta \alpha^k \langle g^k, d^k \rangle$$

bereits in jedem aktuellen Iterationsschritt über die Zielfunktionswerte $f(x^{k-j})$ Informationen vergangener Iterationen in die Berechnungen ein. In der Arbeit [37] von Gould, Lucidi, Roma und Toint des Titels *A linesearch algorithm with memory for unconstrained optimization* wird ein Ansatz verfolgt, bei dem nicht nur auf vergangene Zielfunktionswerte in der Abstiegsbedingung sondern auch auf vergangene Richtungsinformationen in der Berechnung der Abstiegsrichtung zurückgegriffen wird. Die an selber Stelle vorgestellten numerischen Rechnungen zeigen, dass dieser Zugang in gewissen Situationen Vorteile gegenüber den bisher vorgestellten Verfahren bieten kann. Hier wird nun die bisher entwickelte Konvergenztheorie, beruhend auf dem Begriff der verallgemeinert minimierenden Folge, auf die vorzustellende Verfahrensklasse ausgedehnt. Im Weiteren wird das Verfahren durch die Raumzerlegungsmethode erweitert.

An der aktuellen Iterationsstelle x^k wird zunächst das lokale quadratische Modell

$$\mathbf{m}^k(x) = f^k + \langle g^k, x - x^k \rangle + \frac{1}{2} \langle H^k(x - x^k), x - x^k \rangle$$

für das Zielfunktional f aufgestellt. Wir gehen an dieser Stelle der Einfachheit halber davon aus, dass die Matrizen H^k positiv definit sind. Für eine Strategie, falls dies nicht der Fall ist, wird auf [37] verwiesen. Desweiteren betrachtet man ein Modell

$$\bar{\mathbf{m}}^k(x) = \bar{f}^k + \langle \bar{g}^k, x - x^k \rangle + \frac{1}{2} \langle \bar{H}^k(x - x^k), x - x^k \rangle$$

in das über eine Konvexkombination als Rekursionsbeziehung

$$\bar{\mathbf{m}}^k = (1 - \mu^k) \mathbf{m}^k + \mu^k \bar{\mathbf{m}}^{k-1} \quad (1.5.1)$$

Eigenschaften aus zurückliegenden Schritten einfließen. Hierbei wird durch die Bedingung $\mu^k \in [0, \bar{\mu}]$ für einen festen Verfahrensparameter $\bar{\mu} \in [0, 1)$ gesichert, dass die jeweils aktuellen Daten in $\bar{\mathbf{m}}^k$ nicht marginalisiert werden. Außerdem wird verlangt, dass für eine \mathcal{F}^* -Funktion $\hat{\mu}$ die Bedingung

$$\mu^k \leq \hat{\mu}(\|x^k - x^{k-1}\|) \quad (1.5.2)$$

erfüllt ist. Dem liegt die Idee zugrunde, dass nach kleinen Schritten, die in der Regel gegen Ende der Iteration auftreten, die lokalen Daten eine größere Gewichtung erhalten. Außerdem wird die natürliche Festlegung $\mu_0 = 0$ und $\bar{\mathbf{m}}^0 = \mathbf{m}^0$ getroffen. Damit gelten die Beziehungen $\bar{g}^0 = g^0$, $\bar{H}^0 = H^0$ und

$$\begin{aligned} \bar{g}^k &= (1 - \mu^k)g^k + \mu^k \bar{g}^{k-1} + \mu^k \bar{H}^{k-1}(x^k - x^{k-1}), \\ \bar{H}^k &= (1 - \mu^k)H^k + \mu^k \bar{H}^{k-1} \quad (k = 1, 2, \dots). \end{aligned}$$

Da hier die Matrizen H^k als positiv definit vorausgesetzt sind, gilt dies auch für die \bar{H}^k , was unmittelbar induktiv folgt. Andernfalls sind Modifikationen der \bar{H}^k vorzunehmen, die in [37] diskutiert werden aber an dieser Stelle nicht von Bedeutung sind. In [37] wird gezeigt, dass unter den gegebenen Verhältnissen die Darstellung

$$\bar{\mathbf{m}}^k(x) = \sum_{i=0}^k (1 - \mu^k) \left(\prod_{j=i+1}^k \mu^j \right) \mathbf{m}^i(x) \quad (1.5.3)$$

für das vergangenheitsbezogene Modell gilt. Die Berechnung einer Korrekturrichtung erfolgt mit dem Modell $\bar{\mathbf{m}}^k$ gemäß

$$d^k = -(\bar{H}^k)^{-1} \bar{g}^k.$$

Die Schrittweite wird mit einer Armijo-Strategie zur Abstiegsbedingung

$$f(x^k + \alpha^k d^k) \leq \tilde{f}^k + \delta \alpha^k \langle \bar{g}^k, d^k \rangle \quad (1.5.4)$$

ermittelt. Dabei ist $f^k \leq \tilde{f}^k \leq F^k$ und F^k die M -Majorisierende zu gegebenem

$M \in \mathbb{N}_0$. Falls $\tilde{f}^k = f^k$ gilt, wird über die Forderung

$$\langle g^k, d^k \rangle < \nu \langle \bar{g}^k, d^k \rangle$$

mit einem festen Verfahrensparameter $\nu \in (0, 1]$ erreicht, dass die Abstiegsbedingung (1.5.4) erfüllbar ist. Das Verfahren lässt sich in dem folgenden Algorithmus zusammenfassen.

1.5.1 Algorithmus

gegeben seien ein Startwert x^0 und die Verfahrensparameter $\delta \in (0, 1)$, $c > 0$, $q > 0$, $\bar{\mu} \in [0, 1)$ und $M \in \mathbb{N}_0$

setze $m^{-1} = -1$

für $k = 0, 1, \dots$

falls $\bar{g}^k = 0$, stop

wähle $m^k \in \mathbb{N}_0$ mit $m^k \leq \min\{m^{k-1} + 1, M\}$

setze $F^k = \max\{f(x^{k-j}) : 0 \leq j \leq m^k\}$

wähle \tilde{f}^k mit $f^k \leq \tilde{f}^k \leq F^k$

berechne \bar{g}^k und \bar{H}^k aus der Rekursion (1.5.1)

berechne eine Abstiegsrichtung d^k mit $-\langle \bar{g}^k, d^k \rangle > 0$

bestimme eine Schrittweite $\alpha^k > 0$ mit

$$f(x^k + \alpha^k d^k) \leq \tilde{f}^k + \delta \alpha^k \langle \bar{g}^k, d^k \rangle$$

setze $x^{k+1} = x^k + \alpha^k d^k$

wähle $\mu^k \in [0, \bar{\mu})$ mit $\mu^k \leq c \|\alpha^k d^k\|^q$

1.5.2 Konvergenztheorie

Das zunächst auftretende Problem bei der Konvergenzuntersuchung des Verfahrens gegenüber der entwickelten Konvergenztheorie verallgemeinerter Strahlmini-

mierungsverfahren besteht darin, dass die Bedingung $F^k - f(x^k) \geq \varphi(\|g^k\|)$ nicht mehr verfahrensgemäß ist und durch

$$F^k - f(x^k) \geq \varphi(\|\bar{g}^k\|) \quad (1.5.5)$$

zu ersetzen ist. Um mit dieser modifizierten Bedingung arbeiten zu können, wird eine neue Lesart des zentralen Lemmas 1.2.9 eingeführt. Dies geschieht dadurch, dass der analytische Bezug zwischen $f(x^k)$ und $\|\nabla f(x^k)\|$, der in der Tat im Beweis des Lemmas keine Rolle spielt, aufgelöst und die Folge $\{\|\nabla f(x^k)\|\}$ durch eine formale Folge $\{\gamma^k\} \subset \mathbb{R}_0^+$ ersetzt wird.

1.5.2 Lemma Seien $\{x^k\} \subseteq \mathbb{R}^n$, $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ stetig auf X_0 , $\{F^k\}$ die M -Majorisierende der Folge $\{f(x^k)\}$ und $\{\gamma^k\} \subseteq \mathbb{R}_0^+$. Weiterhin gebe es eine \mathcal{F} -Funktion φ mit

$$F^k - f(x^{k+1}) \geq \varphi(\gamma^k) \quad \text{für schließlich alle } k \in \mathbb{N}_0. \quad (1.5.6)$$

Dann gelten die folgenden Aussagen.

- (i) Die Folge $\{f(x^k)\}$ ist M -monoton fallend.
- (ii) Es gilt $\liminf_{k \rightarrow \infty} \gamma^k = 0$.
- (iii) Es gilt $\lim_{k \rightarrow \infty} \gamma^k = 0$, falls $\{f(x^k)\}$ konvergiert.
- (iv) Ist fast immer $\gamma^k \neq 0$, so hat $\{F^k\}$ eine streng monoton fallende Teilfolge und es gilt

$$\limsup_{k \rightarrow \infty} f(x^k) < F^l \quad \text{für alle } l \in \mathbb{N}_0. \quad (1.5.7)$$

- (v) Gilt fast immer $\gamma^k \neq 0$ und ist die Konvergenz

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \|x^{k+1} - x^k\| = 0, \quad (1.5.8)$$

gegeben, so ist kein Häufungspunkt von $\{x^k\}$ lokales Maximum.

- (vi) Das Zielfunktional f sei nach unten beschränkt und gleichmäßig stetig auf X_0 . Weiterhin gebe es eine \mathcal{F}^* -Funktion ψ mit

$$\|x^{k+1} - x^k\| \leq \psi(\gamma^k), \quad \forall k \in \mathbb{N}_0. \quad (1.5.9)$$

Dann ist $\{f(x^k)\}$ konvergent, und damit gelten

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \gamma^k = 0 \quad \text{und} \quad \lim_{k \rightarrow \infty} \|x^{k+1} - x^k\| = 0.$$

Offenbar lässt sich der Beweis von 1.2.9 unmittelbar *mutatis mutandis* auf die obige Situation übertragen. In völliger Analogie zur ersten Aussage von Satz 1.3.2 folgt durch Lemma 1.5.2 mit $\gamma^k = \|\bar{g}^k\|$ statt des Lemmas 1.2.9 die folgende Aussage, deren Voraussetzungen offenbar die Bedingung (1.5.5) absichern.

1.5.3 Lemma Sei $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ nach unten beschränkt und differenzierbar. Die nicht abbrechende Folge $\{x^k\}$ sei durch Algorithmus 1.5.1 erzeugt. Weiter gebe es \mathcal{F} -Funktionen φ^1 und φ^2 , derart dass für $k \in \mathbb{N}_0$ die Abschätzungen

$$\begin{aligned} -\langle \bar{g}^k, d^k \rangle &\geq \varphi^1(\|\bar{g}^k\|) \\ \alpha^k &\geq \varphi^2(\|\bar{g}^k\|) \end{aligned}$$

gelten. Dann gilt $\liminf_{k \rightarrow \infty} \|\bar{g}^k\| = 0$.

Von einer schwach verallgemeinert minimierenden Folge $\{x^k\}$ kann man angesichts der Eigenschaft $\liminf_{k \rightarrow \infty} \|\bar{g}^k\| = 0$ statt $\liminf_{k \rightarrow \infty} \|g^k\| = 0$ (noch) nicht sprechen. Unter den in Abschnitt 1.5.1 dargestellten Voraussetzungen gilt jedoch Lemma 3.4 aus [37], dessen Aussage im folgenden zitiert wird.

1.5.4 Aussage ([37], Lemma 3.4) Es herrsche der Zusammenhang (1.5.3) zwischen den Modellen \mathbf{m}^k und $\bar{\mathbf{m}}^k$, wobei die Kombinationsparameter $\mu^k \in [0, 1)$ der Bedingung (1.5.2) genügen. Falls zusätzlich die Iterationsfolge $\{x^k\}$ beschränkt ist und die Schrittweiten beliebig klein werden, im Sinne von

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \|x^{k+1} - x^k\| = 0,$$

wird die Approximation von $g^k = \nabla \mathbf{m}^k(x^k) = \nabla f(x^k)$ durch $\bar{g}^k = \nabla \bar{\mathbf{m}}^k(x^k)$ beliebig genau, d. h.

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \|g^k - \bar{g}^k\| = 0.$$

Mit dieser Aussage, lässt sich der zweite Teil von Satz 1.3.2 übertragen.

1.5.5 Satz *Es gelten die Voraussetzungen des Lemmas 1.5.3, und es sei zudem vorausgesetzt, dass $\bar{\alpha} > 0$ und \mathcal{F}^* -Funktionen ψ^1 und ψ^2 existieren, mit denen die Abschätzungen*

$$\begin{aligned}\alpha^k &\leq \bar{\alpha} \\ \|d^k\| &\leq \psi^1(\|\bar{g}^k\|) \\ \|x^{k+1} - x^k\| &\leq \psi^2(\alpha^k \|d^k\|)\end{aligned}$$

für alle $k \in \mathbb{N}_0$ erfüllt sind. Dann gelten die folgenden Aussagen.

- (i) *Die Iterationsfolge ist verallgemeinert minimierend.*
- (ii) *Kein Häufungspunkt von $\{x^k\}$ ist lokales Maximum von f .*
- (iii) *Die Zielfunktionswertfolge $\{f(x^k)\}$ konvergiert.*
- (iv) *Die Folge $\{x^k\}$ konvergiert, falls es eine die Folge enthaltende, abgeschlossene Menge gibt, die keinen Häufungspunkt von $S_0 = \{x \in \mathbb{R}^n : \nabla f(x) = 0\}$ enthält.*

Beweis

Die Aussagen (ii) folgt unter den Voraussetzungen unmittelbar aus der entsprechenden Aussagen von Lemma 1.5.2. Wegen

$$\|x^{k+1} - x^k\| \leq \psi^2(\alpha^k \|d^k\|) \leq \psi^2(\bar{\alpha} \|d^k\|) \leq \psi^2(\bar{\alpha} \psi^1(\|\bar{g}^k\|))$$

gilt mit Aussage (vi) von 1.5.2 die Behauptung (iii) sowie $\lim_{k \rightarrow \infty} \bar{g}^k = 0$. Wegen der Konsequenz $\lim_{k \rightarrow \infty} \|x^{k+1} - x^k\| = 0$ lässt sich Aussage 1.5.4 anwenden, woraus sich $\lim_{k \rightarrow \infty} g^k = 0$ ergibt. D. h. die Folge $\{x^k\}$ ist verallgemeinert minimierend. Damit sind in (iv) die Voraussetzung von Punkt (ii) des Korollars 1.2.13 erfüllt, was die Konvergenz der Iterationsfolge $\{x^k\}$ nach sich zieht. \square

1.5.3 Raumzerlegungsverfahren

Die Anwendung von Raumzerlegungsstrategien und deren Konvergenztheorie lässt sich aufbauend auf der obigen Diskussion in naheliegender Weise entwickeln.

1.5.6 Algorithmus

! additiv, für p Prozessoren

wähle $x^0 \in X$ und $\beta_i > 0$, $i = 1, \dots, p$, mit $\sum_{i=1}^p \beta_i = 1$, $\delta_i \in (0, 1)$

für $k = 0, 1, \dots$

falls $\bar{g}^k = 0$, stop

wähle m^k mit $0 \leq m^k \leq \min\{m^{k-1} + 1, M\}$

setze $F^k = \max_{0 \leq j \leq m^k} f(x^{k-j})$

wähle \tilde{f}^k mit $f^k \leq \tilde{f}^k \leq F^k$

wähle Raumzerlegung $\{(W_i^k, P_i^k, R_i^k) : i = 1, \dots, p\}$ von V

für $i = 1, \dots, p$

setze $\bar{g}_i^k = (P_i^k)' \bar{g}^k$

bestimme Abstiegsrichtung d_i^k mit $-\langle \bar{g}_i^k, d_i^k \rangle > 0$

berechne Schrittweite $\alpha_i^k > 0$ mit

$$f(x^k + \alpha_i^k P_i^k d_i^k) \leq \tilde{f}^k + \delta_i \alpha_i^k \langle \bar{g}_i^k, d_i^k \rangle$$

setze $x^{i,k} = x^k + \alpha_i^k P_i^k d_i^k$

bestimme x^{k+1} mit

$$f(x^{k+1}) \leq \sum_{i=1}^p \beta_i f(x^{i,k})$$

In analoger Weise zur Theorie des vorangegangenen Abschnittes 1.5.2 lassen sich in der Situation mit Raumzerlegung die entsprechenden Aussagen angeben.

1.5.7 Lemma Sei f stetig differenzierbar und auf der von x^0 erzeugten Niveaumenge beschränkt. Die Folge $\{x^k\}$ sei eine nach dem Algorithmus in 1.5.6 erzeugte und nicht abbrechende Iterationsfolge. Die Raumzerlegungen $\{(W_i^k, P_i^k, R_i^k) : i = 1, \dots, p\}$ in Algorithmus 1.5.6 seien so gewählt, dass die Abschätzung (1.4.3) mit

einem festen $c > 0$ erfüllt ist. Ferner gebe es \mathcal{F} -Funktionen φ_i^1 und φ_i^2 , derart dass in jedem Schritt die Abstiegsrichtung in den Teilräumen d_i^k und die Schrittweiten α_i^k mit $\bar{g}_i^k = (P_i^k)' \nabla f(x^k)$ den Ungleichungen

$$\begin{aligned} -\langle \bar{g}_i^k, d_i^k \rangle &\geq \varphi_i^1(\|\bar{g}_i^k\|) \\ \alpha_i^k &\geq \varphi_i^2(\|\bar{g}_i^k\|) \end{aligned}$$

für $i = 1, \dots, p$ genügen. Dann gilt $\liminf_{k \rightarrow \infty} \bar{g}^k = 0$.

Unter den Voraussetzungen des Lemmas 1.5.7 gibt es \mathcal{F} -Funktionen, so dass die Voraussetzungen des Lemmas 1.5.3 erfüllt sind und sich die Behauptung ergibt. Das Gleiche gilt für den folgenden Satz mit Bezug auf Satz 1.5.5.

1.5.8 Satz *Es gelten die Voraussetzungen von Lemma 1.5.7. Es gebe positive Konstanten c und C , so dass (1.4.4) gleichmäßig für alle Raumzerlegungen $\{(W_i^k, P_i^k, R_i^k) : i = 1, \dots, p\}$ erfüllt ist. Desweiteren sei die nach Algorithmus 1.5.6 erzeugte Iterationsfolge $\{x^k\}$ beschränkt, und es gebe ein $\bar{\alpha} > 0$ und \mathcal{F}^* -Funktionen ψ und ψ_i^1, ψ_i^2 , $i = 1, \dots, p$, so dass die im Verfahren verwendeten Schrittweiten α_i^k , die Korrekturrichtungen d_i^k und die Korrekturen $x^{k+1} - x^k$ den Abschätzungen*

$$\begin{aligned} \alpha_i^k &\leq \bar{\alpha} \\ \|d_i^k\| &\leq \psi_i^1(\|\bar{g}_i^k\|) \\ \|x^{k+1} - x^k\| &\leq \psi\left(\max_{0 \leq i \leq p} \psi_i^2(\alpha_i^k \|d_i^k\|)\right) \end{aligned}$$

für alle $k \in \mathbb{N}_0$ und $i \in \{1, \dots, p\}$ genügen. Dann gelten die folgenden Aussagen.

- (i) Die Iterationsfolge $\{x^k\}$ ist verallgemeinert minimierend.
- (ii) Kein Häufungspunkt von $\{x^k\}$ ist lokales Maximum von f .
- (iii) Die Zielfunktionswertfolge $\{f(x^k)\}$ konvergiert.
- (iv) Die Folge $\{x^k\}$ konvergiert, falls es eine die Folge enthaltende, abgeschlossene Menge gibt, die keinen Häufungspunkt von S_0 enthält.

Es wird sich im Abschnitt 2.2 über konvex restringierte Aufgaben zeigen, dass die Verallgemeinerung der Konvergenztheorie, die sich eher als formaler Akt darstellt, in einem weiteren Fall von Nutzen ist.

2 Restringierte Minimierungsaufgaben

In optimization one investigates problems of the determination of a minimal point of a functional on a nonempty subset of a real linear space. [53]

2.1 Einführung

Die im Folgenden interessierende endlichdimensionale Minimierungsaufgabe zu einem gegebenem Zielfunktional $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ und einem Zulässigkeitsbereich $X \subseteq \mathbb{R}^n$ lautet

$$x^* = \operatorname{argmin}_{x \in X} f(x).$$

Dabei sei das Zielfunktional weiterhin als differenzierbar angenommen. Für den Zulässigkeitsbereich X werden die Fälle betrachtet, dass X konvex und abgeschlossen oder in der Gestalt

$$X = \{x \in \mathbb{R}^n : c_G(x) = 0, c_U(x) \leq 0\} \neq \emptyset \quad (2.1.1)$$

gegeben ist, wobei die Restriktionsfunktionen $c_G : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^{n_G}$ und $c_U : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^{n_U}$ wiederum differenzierbar sind. Damit bewegt sich die Diskussion im Rahmen der sogenannten nichtlinearen Optimierung bzw. des *nonlinear programming* [27, 3, 90, 8, 71]. Dies steht beispielsweise in Abgrenzung zur diskreten Optimierung oder des *non-smooth programming*, wobei im erstgenannten Fall X und im zweiten f nicht den Annahmen entspricht und die Aufgabe damit andere Herangehensweisen und Lösungsverfahren erfordert als die hier diskutierten.

Der konvex restringierte Fall wird hier unabhängig von einer Darstellung der Art (2.1.1) in Zusammenhang mit „zulässigen“ Verfahren behandelt, was bedeuten soll,

dass die Verfahrenspunkte im Zulässigkeitsbereich liegen, $x^k \in X$. Diese Verfahren lassen sich dadurch motivieren, dass konvexe Zulässigkeitsbereiche häufig durch ein System einfacher Ungleichungen wie etwa Intervallbedingungen gegeben sind. Es zeigt sich, dass sich unter diesen Umständen, Begriffe und Verfahren zur freien Minimierung des ersten Kapitels auf den konvex restringierten Fall verallgemeinern lassen. Insbesondere bei den Raumzerlegungsverfahren sind jedoch restriktionsbedingte Effekte zu diskutieren.

Die Situation verändert sich völlig, wenn die Zulässigkeit der Iterierten nicht mehr verlangt wird. Mit der Darstellung (2.1.1) des Zulässigkeitsbereichs wird hier davon ausgegangen, dass die Bestimmung eines Elementes aus X einen großen Aufwand darstellt. Dies zielt auf den im Kapitel 3 beschriebenen Fall, dass die Restriktionen durch die Diskretisierung mathematischer Modelle in Gestalt gewöhnlicher oder partieller Differentialgleichungen entstehen. Daher steht hier mit dem erweiterten Lagrangeverfahren ein Verfahren im Mittelpunkt, das die Lösung der Gleichungssysteme in jedem Iterationsschritt vermeidet und die „näherungsweise Zulässigkeit“ im Verlauf der Iteration verbessert. Zu dem Optimalitätskriterium für die Iterierten solcher „nicht zulässigen“ Verfahren tritt ein Zulässigkeitskriterium, das ersteres in gewisser Weise dominiert. Die Übertragung des Begriffs (verallgemeinert) minimierender Folgen im Sinne des ersten Kapitels ist damit nicht ohne Weiteres möglich, obwohl durchaus nichtmonotone Verfahren (in Bezug auf Bewertungsfunktionen) für restringierte Aufgaben vorgeschlagen wurden, [15, 99]. Allein der Versuch, den Begriff kritischer Folgen mit Hilfe der Fritz-John- oder Karush–Kuhn–Tucker-Bedingungen einzuführen und zu entwickeln, ist ein mühsames und letztlich wenig ergiebiges Unterfangen. Jedoch gestattet die Struktur der Straftermverfahren und insbesondere des erweiterten Lagrangeverfahrens, die Raumzerlegungsmethode zunächst auf die gleichungsrestringierte Minimierungsaufgabe anzuwenden und eine Konvergenztheorie für dieses vermutlich neue Verfahren zu entwickeln. Die Idee, mit Hilfe der erweiterten Lagrangefunktion die Lösung restringierter Optimierungsaufgaben zu parallelisieren, ist allerdings längst bekannt, [26].

2.2 Konvex restringierte Minimierungsaufgaben

We will see, that the main algorithmic ideas for solving the unconstrained and the constrained problems are quite similar. [8]

2.2.1 Grundlagen

Mit der konvexen und abgeschlossenen Menge $K \subset \mathbb{R}^n$, die weder leer noch einelementig sei, lautet die konvex restringierte Minimierungsaufgabe

$$x^* = \operatorname{argmin}_{x \in K} f(x). \quad (\text{Min}_K)$$

Damit ist der unrestringierte Fall mit $K = \mathbb{R}^n$ ein Sonderfall der hier diskutierten Aufgabenstellung. Für Aussagen zur konvex restringierten Optimierung sei u. a. auf [3, Kapitel 2 und 3], [8, Kapitel 2], [18, Teil III] und die Zusammenstellung im Anhang A.2 verwiesen. Das Zielfunktional wird jedoch nicht als notwendig konvex angenommen, so dass es sich nicht um eine Aufgabenstellung des *convex programming* handelt, [27].

Die Stationaritätsbedingung als notwendiges Optimalitätskriterium des freien Optimierungsproblems einer Stelle $x^* \in K$ nimmt bezüglich der konvex restringierten Aufgabe (Min_K) die Gestalt einer Variationsungleichung

$$\langle -\nabla f(x^*), x - x^* \rangle \leq 0 \quad \forall x \in K \quad (2.2.1)$$

an; gilt (2.2.1) an der Stelle x^* , so heisst diese Stelle *kritisch* (bzgl. (Min_K)). Anschaulich bedeutet dies, dass an der Stelle x^* keine Abstiegsrichtung in den Zulässigkeitsbereich K hineinführt, Abbildung 2.2.1. Offenbar ist dies im unrestringierten Fall $K = \mathbb{R}^n$ äquivalent zu $\nabla f(x^*) = 0$. Mit Hilfe der einzuführenden Projektion von \mathbb{R}^n auf K , lässt sich eine zu (2.2.1) äquivalente Aussage in Gleichungsform angeben. Diese Projektion $\Pi_K^{\mathbb{R}^n} : \mathbb{R}^n \rightarrow K$, die jedem $y \in \mathbb{R}^n$ ihre Bestapproximierende bezüglich der euklidischen Norm $\|\cdot\|$ in K zuordnet, ist durch die Eigenschaft

$$\|y - \Pi_K^{\mathbb{R}^n}(y)\| = d(y, K) = \inf\{\|y - x\| : x \in K\}$$

eindeutig bestimmt. Wesentliche Eigenschaften der Abbildung werden in der nach-

stehenden Aussage zitiert.

2.2.1 Aussage ([8], Proposition 2.1.3 (Projektionssatz)) Sei K eine nicht leere, abgeschlossene und konvexe Teilmenge von \mathbb{R}^n .

- (i) Für jedes $y \in \mathbb{R}^n$ gibt es ein eindeutig bestimmtes Element $x^* \in K$, das den Abstand $\|y - x\|$ für alle $x \in K$ minimiert. Diese Bestapproximierende $x^* = \Pi_K^{\mathbb{R}^n}(y)$ heißt Projektion von y auf K .
- (ii) Für $y \in \mathbb{R}^n$ ist x^* genau dann die Projektion von y auf K , wenn die nachstehende Variationsungleichung gilt.

$$\langle y - x^*, x - x^* \rangle \leq 0 \quad \forall x \in K$$

- (iii) Die Abbildung $\Pi_K^{\mathbb{R}^n} : \mathbb{R}^n \rightarrow K$ ist Lipschitz-stetig mit

$$\|\Pi_K^{\mathbb{R}^n}(y) - \Pi_K^{\mathbb{R}^n}(z)\| \leq \|y - z\| \quad \forall y, z \in \mathbb{R}^n.$$

- (iv) Falls K ein Teilraum des \mathbb{R}^n ist, so ist $x^* \in K$ genau dann die Projektion von $y \in \mathbb{R}^n$ auf K , wenn $y - x^*$ orthogonal auf K steht, im Sinne von $\langle y - x^*, x \rangle = 0$ für alle $x \in K$.

Ist die Menge K durch Intervallbedingungen $K = \{x \in \mathbb{R}^n : \underline{x} \leq x \leq \bar{x}\}$ gegeben, lässt sich der Operator $\Pi_K^{\mathbb{R}^n}$ leicht komponentenweise angeben:

$$\left(\Pi_K^{\mathbb{R}^n}(y)\right)_i = \begin{cases} \underline{x}_i & \text{falls } y_i < \underline{x}_i, \\ y_i, & \text{falls } \underline{x}_i \leq y_i \leq \bar{x}_i, \\ \bar{x}_i & \text{falls } y_i > \bar{x}_i. \end{cases}$$

Im Allgemeinen kann die Berechnung von Projektionen, d. h. die Lösung des Minimierungsproblems

$$\Pi_K^{\mathbb{R}^n}(y) = \operatorname{argmin}_{x \in K} \|y - x\|^2,$$

jedoch einen erheblichen Rechenaufwand bedeuten.

Mit Blick auf die einzuführenden Raumzerlegungsverfahren erscheint es methodisch sinnvoll, zwischen der Punktemenge K als Untermenge eines Punktraumes $\mathcal{P} =$

\mathbb{R}^n und dem Vektorraum $V = \mathbb{R}^n$ der auf den Punkten gemäß

$$\mathcal{P} \times V \rightarrow \mathcal{P} : (x, d) \mapsto x + d$$

operierenden Translationen in einer affingometrischen Auffassung zu unterscheiden. Die Translation, die den Punkt x auf y abbildet, wird mit $y - x$ bezeichnet, so dass man mit

$$K - x = \{y - x : y \in K\} \subseteq V$$

die Menge der zu einem Punkt $x \in K$ bezüglich K zulässigen Translationen, die x wieder auf ein Element in K abbilden, erhält. Der Gradient $\nabla f(x)$ wird als Translation aufgefasst, $\nabla f(x) \in V$. Die Variationsungleichung (2.2.1) ist damit sachgemäß eine Beziehung im Translationsraum V , also

$$\langle -\nabla f(x^*), \xi \rangle \leq 0 \quad \forall \xi \in K - x^*.$$

Die Variationsungleichung motiviert die folgende Definition eines Kritizitätsmaßes im Punkt $x \in K$ durch

$$\chi(x) := \sup \left\{ \frac{\langle -\nabla f(x), \xi \rangle}{\|\xi\|} : \xi \in K - x, \xi \neq 0 \right\}. \quad (2.2.2)$$

Offenbar gilt damit $|\chi(x)| \leq \|\nabla f(x)\|$ und $\chi(x)$ lässt sich als Länge des auf den Tangentialraum projizierten Gradienten interpretieren, wenn die Richtung $-\nabla f(x)$ an der Stelle x aus K heraus führt und der Tangentialraum an der Stelle existiert (allgemeiner auf eine geeignete die Menge K im Punkt x unterstützende Hyperebene), was in Abbildung 2.2.1 skizziert ist. Als weiteres Maß dient die Länge der Projektion des negativen Gradienten auf die „Menge der zulässigen Änderungen“ $K - x \subseteq V$ an der Stelle x gemäß

$$\Gamma_K(x) := \|\Pi_{K-x}^V(-\nabla f(x))\|. \quad (2.2.3)$$

Es lässt sich der folgende Zusammenhang zwischen den Größen Γ_K und χ formulieren.

2.2.2 Lemma Sei $x \in K$. Dann ist $\Gamma_K(x) = 0$ äquivalent zu $\chi(x) \leq 0$. Falls $\chi(x) \geq 0$ gilt, ist $\chi(x) \geq \Gamma_K(x)$.

Beweis

Wegen der mit Aussage (ii) des Projektionssatzes 2.2.1 und $0 \in K - x$ für $x \in K$ geltenden Abschätzung

$$\begin{aligned} & \langle -\nabla f(x), \Pi_{K-x}^V(-\nabla f(x)) \rangle \\ &= \langle -\nabla f(x) - \Pi_{K-x}^V(-\nabla f(x)), \Pi_{K-x}^V(-\nabla f(x)) \rangle + \|\Pi_{K-x}^V(-\nabla f(x))\|^2 \\ & \qquad \qquad \qquad \geq (\Gamma_K(x))^2 \end{aligned}$$

und der Definition von $\chi(x)$ in (2.2.2) gilt

$$\Gamma_K(x) \chi(x) \geq \langle -\nabla f(x), \Pi_{K-x}^V(-\nabla f(x)) \rangle \geq (\Gamma_K(x))^2. \quad (2.2.4)$$

Daraus folgt bereits für $\Gamma_K(x) > 0$ die Behauptung $\chi(x) \geq \Gamma_K(x)$.

Für die Projektion der Richtung $-\nabla f(x)$ auf $K - x$ gilt wiederum mit dem Projektionssatz

$$\langle -\nabla f(x) - \Pi_{K-x}^V(-\nabla f(x)), \xi - \Pi_{K-x}^V(-\nabla f(x)) \rangle \leq 0 \quad \forall \xi \in K - x,$$

so dass im Falle von $\Pi_{K-x}^V(-\nabla f(x)) = 0$ die Variationsungleichung

$$\langle -\nabla f(x), \xi \rangle \leq 0 \quad \forall \xi \in K - x$$

folgt, mit der Konsequenz $\chi(x) \leq 0$ für $\Gamma_K(x) = 0$. □

Da die Stationaritätsbedingung (2.2.1) äquivalent zu $\chi(x^*) \leq 0$ ist, lässt sich die nächste Schlussfolgerung ziehen.

2.2.3 Korollar *Der Punkt $x^* \in K$ erfüllt genau dann die Variationsungleichung (2.2.1), wenn $\Gamma_K(x^*) = 0$ gilt.*

Damit ist die Variationsungleichung (2.2.1) äquivalent zu der Gleichung

$$\Pi_{K-x^*}^V(-\nabla f(x^*)) = 0.$$

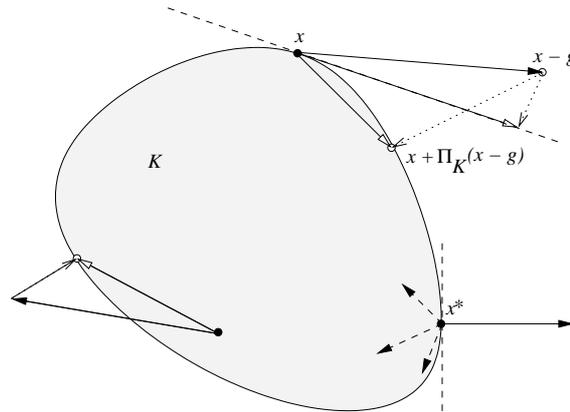


Abbildung 2.2.1: Bestapproximation und Tangentialprojektion des negativen Gradienten, Kritizität von x^*

2.2.2 Verallgemeinerte Abstiegsverfahren

Mit Blick auf das verallgemeinerte Zentrallemma 1.5.2 lässt sich mit der Festlegung $\gamma^k = \Gamma_K(x^k)$ für die in dem Lemma auftretende Folge $\{\gamma^k\}$ eine Konvergenztheorie für *nichtmonotone* konvex restringierte Verfahren aufbauen. Dazu führen wir den Begriff der kritischen und verallgemeinert minimierenden Folge bezüglich der konvex restringierten Minimierungsaufgabe (Min_K) ein.

2.2.4 Definition (verallgemeinert minimierende Folgen bzgl. (Min_K))

Es sei $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ differenzierbar und die Menge $K \subseteq \mathbb{R}^n$ nicht leer, abgeschlossen und konvex. Eine Folge $\{x^k\} \subset K$ heißt dann schwach kritisch bezüglich (Min_K) , falls

$$\liminf_{k \rightarrow \infty} \Gamma_K(x^k) = 0$$

gilt. Falls stärker

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \Gamma_K(x^k) = 0$$

gilt, so heißt $\{x^k\}$ kritisch bezüglich (Min_K) . Ist die Folge der Zielfunktionswerte $\{f(x^k)\}$ M -monoton, so heißt $\{x^k\}$ verallgemeinert (schwach) minimierend bezüglich (Min_K) , falls die Folge (schwach) kritisch bezüglich (Min_K) ist.

Unter Berücksichtigung der Restriktion erhält man aus dem Verfahren (vStMin) des Algorithmus 1.3.1 das im folgenden Algorithmus dargestellte verallgemeinerte Strahlminimierungsverfahren auf konvexen Mengen.

2.2.5 Algorithmus (vStMin_K)

wähle $x^0 \in K$, $0 < \delta < 1$, $M \in \mathbb{N}_0$

setze $m^{-1} = -1$

für $k = 0, 1, \dots$

falls $\Gamma_K(x^k) = 0$, stop

wähle m^k mit $0 \leq m^k \leq \max\{m^{k-1} + 1, M\}$

setze $F^k = \max_{0 \leq j \leq m^k} f^{k-j}$

wähle $d^k \in K - x^k$ mit $-\langle g^k, d^k \rangle > 0$

bestimme Schrittweite $\alpha^k \geq 0$ mit $\alpha^k d^k \in K - x^k$ und

$$f(x^k + \alpha^k d^k) \leq F^k + \delta \alpha^k \langle g^k, d^k \rangle \quad (2.2.5)$$

wähle x^{k+1} mit

$$f(x^{k+1}) \leq f(x^k + \alpha^k d^k)$$

Offenbar ist wegen (2.2.4) die Richtung $d^k = \Pi_{K-x^k}(-g^k)$ eine zulässige Abstiegsrichtung mit

$$\langle -g^k, d^k \rangle \geq \Gamma_K(x^k)^2.$$

In dem Algorithmus bietet sich bei dieser Wahl von d^k die Beschränkung der Schrittweite durch $\alpha^k \leq 1$ an, da dann $x^k + \alpha^k d^k$ in K liegt. In Analogie zu den Konvergenzaussagen des unrestringierten Strahlminimierungsverfahren in Satz 1.3.2 lässt sich der folgende Satz für das konvex restringierte Verfahren formulieren, indem die Folge $\|g(x^k)\|$ durch $\Gamma_K(x^k)$ ersetzt wird. Da es sich wiederum um einen Sonderfall des im folgenden Abschnitt diskutierten Verfahrens mit Raumzerlegung handelt, kann hier auf den Beweis verzichtet werden.

2.2.6 Satz Sei $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ differenzierbar und auf der konvexen und abgeschlossenen Menge K nach unten beschränkt. Die nicht abbrechende Folge $\{x^k\}$ sei von Algorithmus 2.2.5 erzeugt. Weiter gebe es \mathcal{F} -Funktionen φ^1 und φ^2 , derart dass

für $k \in \mathbb{N}_0$ die Abschätzungen

$$\begin{aligned} -\langle g^k, d^k \rangle &\geq \varphi^1(\Gamma_K(x^k)) \\ \alpha^k &\geq \varphi^2(\Gamma_K(x^k)) \end{aligned}$$

für alle Iterierten gelten. Dann ist die Folge $\{x^k\}$ verallgemeinert schwach minimierend bezüglich (Min_K) .

Für die übrigen Aussagen sei zudem vorausgesetzt, dass $\bar{\alpha} > 0$ und \mathcal{F}^* -Funktionen ψ^1, ψ^2 existieren, so dass die Ungleichungen

$$\alpha^k \leq \bar{\alpha} \tag{2.2.6}$$

$$\|d^k\| \leq \psi^1(\Gamma_K(x^k)) \tag{2.2.7}$$

$$\|x^{k+1} - x^k\| \leq \psi^2(\alpha^k \|d^k\|) \tag{2.2.8}$$

für alle $k \in \mathbb{N}_0$ erfüllt sind. Dann gelten die folgenden Aussagen.

- (i) Die Iterationsfolge $\{x^k\}$ ist verallgemeinert minimierend bezüglich (Min_K) .
- (ii) Kein Häufungspunkt von $\{x^k\}$ ist lokales Maximum von f .
- (iii) Die Zielfunktionswertfolge $\{f^k\}$ konvergiert.
- (iv) Die Folge $\{x^k\}$ konvergiert, falls es eine die Folge enthaltende, abgeschlossene Menge gibt, die keinen Häufungspunkt von $S_K = \{x \in K : \Gamma_K(x) = 0\}$ enthält.

In direkter Verallgemeinerung von [38] sind in [10] zwei nicht monotone Abstiegsverfahren für das konvex restringierte Problem in Verbindung mit einer speziellen Schrittweitenstrategie nach Barzilai und Borwein, [2, 77], diskutiert worden. Die Barzilai–Borwein–Methode spielt nur insofern eine Rolle, als sie einen Startwert für den Schrittweitenalgorithmus liefert, der durch Verfahrensparameter innerhalb eines festen Intervalls liegend abgesichert ist. Das zweite dort angegebene Verfahren lässt sich unmittelbar als Spezialisierung des Algorithmus 2.2.5 einordnen, und zwar mit der Wahl der Korrekturrichtung gemäß $d^k = \Pi_{K-x^k}(-g^k)$. Das erste Verfahren ändert jedoch während der Schrittweitenwahl nach Armijo die Korrekturrichtung, indem zur Schrittweite α die Stelle $\hat{x} = x^k + \Pi_{K-x^k}(-\alpha g^k)$ als Kandidat für x^{k+1}

bezüglich der verallgemeinerten Abstiegsbedingung

$$f(\hat{x}) \leq F^k + \delta \langle g^k, \hat{x} - x^k \rangle$$

überprüft wird. In [10] sind auch umfangreiche Testergebnisse zu den nichtmonotonen Verfahren angegeben.

2.2.3 Raumzerlegungsverfahren

Spezielle Raumzerlegungsansätze konvex restringierter Minimierungsaufgaben sind von Solodov in [89] unter dem Konzept *parallel variable distribution* und von Tai in [92] untersucht worden. In dem allgemeinen Rahmen des hier vorgestellten Raumzerlegungsbegriffs wurden konvex restringierte Minimierungsprobleme offenbar noch nicht diskutiert.

Für eine Raumzerlegung $\mathcal{R} = \{(W_i, P_i, R_i) : i = 1, \dots, p\}$ des Translationsraumes V wird mit

$$Y_i^{\mathcal{R}}(x) = \{w \in W_i : P_i w \in K - x\}$$

die Menge der zulässigen Änderungen an der Stelle $x \in K$ in W_i definiert, in dem Sinne dass

$$x + P_i d_i \in K \quad \forall d_i \in Y_i^{\mathcal{R}}(x)$$

gilt. Die Menge $Y_i^{\mathcal{R}}(x) \subseteq W_i$ ist als Urbildmenge von $K - x$ unter einer linearen Abbildung abgeschlossen und konvex. Als „lokales“ Kritizitätsmaß lässt sich die Abbildung

$$\Gamma_K^{\mathcal{R},i}(x) := \left\| \Pi_{Y_i^{\mathcal{R}}(x)}^{W_i} (P_i' \nabla f(x)) \right\|_{W_i}$$

für $x \in K$ definieren. Zur Diskussion steht dann der folgende Algorithmus.

2.2.7 Algorithmus (vStMinRz_K)

! additiv, für p Prozessoren

wähle $x^0 \in K$ und $\beta_1 > 0$ mit $\sum_{i=1}^p \beta_i = 1$ und $\delta_i \in (0, 1)$ für $i = 1, \dots, p$

setze $m^{-1} = -1$

für $k = 0, 1, \dots$

falls $\Gamma_K(x^k) = 0$, stop

wähle m^k mit $0 \leq m^k \leq \min\{m^{k-1} + 1, M\}$

setze $F^k = \max_{0 \leq j \leq m^k} f(x^{k-j})$

wähle Raumzerlegung $\mathcal{R}^k = \{(W_i^k, P_i^k, R_i^k) : i = 1, \dots, p\}$ von V

für $i = 1, \dots, p$

! parallel

berechne $g_i^k = (P_i^k)' g^k$

berechne Abstiegsrichtung $d_i^k \in Y_i^{\mathcal{R}^k}(x^k)$ mit $-\langle g_i^k, d_i^k \rangle \geq 0$

berechne Schrittweite $\alpha_i^k \in (0, 1]$ mit

$$f(x^k + \alpha_i^k P_i^k d_i^k) \leq F^k + \delta_i \alpha_i^k \langle g_i^k, d_i^k \rangle \quad (2.2.9)$$

setze $x^{i,k} = x^k + \alpha_i^k P_i^k d_i^k$

bestimme $x^{k+1} \in K$ mit

$$f(x^{k+1}) \leq \sum_{i=1}^p \beta_i f(x^{i,k})$$

Gegenüber den unrestringierten Verfahren tritt im Fall der konvex restringierten eine weitere Bedingung an die Raumzerlegungen hinzu. Wie die Abbildung 2.2.3 veranschaulichen soll, ist es möglich, dass keine zulässige Abstiegsrichtung in den Teilräumen existiert, $\Gamma_K^{\mathcal{R},i}(x^k) = 0$ für $i = 1, \dots, p$, obwohl die Stationaritätsbedingung nicht erfüllt ist, $\Gamma_K(x) \neq 0$. Diese Situation kann nicht eintreten, wenn die

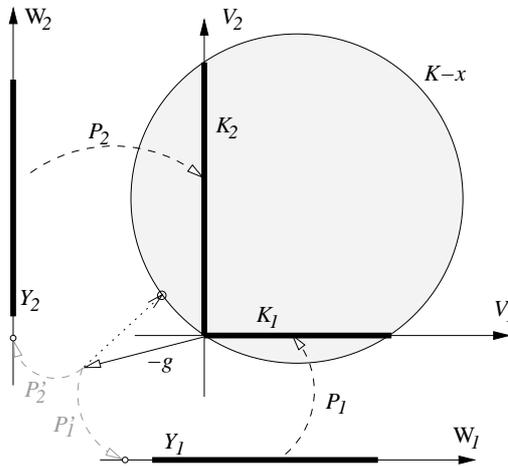


Abbildung 2.2.2: Situation mit Kritizität bzgl. K_i aber nicht bzgl. $K - x$

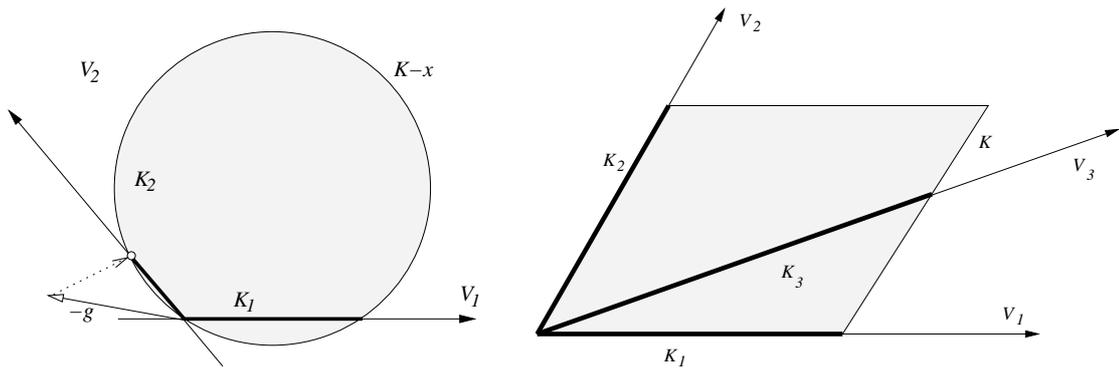


Abbildung 2.2.3: Situationen mit „erfüllter“ Bedingung (2.2.11)

Inklusion

$$K - x^k \subseteq \sum_{i=1}^p K_i^k$$

mit $K_i^k = P_i Y_i^{\mathcal{R}^k}(x^k)$ gilt.

2.2.8 Lemma Sei $K \subset \mathbb{R}^n$ abgeschlossen und konvex und \mathcal{R} eine Raumzerlegung von V . Gilt dann mit $K_i^* = P_i Y_i^{\mathcal{R}}(x^*)$ die Inklusion

$$K - x^* \subseteq \sum_{i=1}^p K_i^*$$

für ein $x^* \in K$, so ist $\Gamma_K(x^*) = 0$ äquivalent zu $\Gamma_K^{\mathcal{R},i}(x^*) = 0$ für $i = 1, \dots, p$.

Beweis

Nach Korollar 2.2.3 ist $\Gamma_K(x^*) = 0$ äquivalent zu

$$\langle -\nabla f(x^*), \xi \rangle \leq 0 \quad \forall \xi \in K - x^*.$$

Wegen $K_i^* \subseteq K - x^*$ folgt daraus

$$\langle -P_i' \nabla f(x^*), \eta_i \rangle = \langle -\nabla f(x^*), P_i \eta_i \rangle \leq 0 \quad \forall \eta_i \in Y_i^{\mathcal{R}}(x^*) \quad (i = 1, \dots, p), \quad (2.2.10)$$

da $P_i \eta_i \in K_i^* \subseteq K - x^*$. Damit gilt $\Gamma_K^{\mathcal{R},i}(x^*) = 0$. Gilt umgekehrt (2.2.10) in Äquivalenz zu $\Gamma_K^{\mathcal{R},i}(x^*) = 0$ für $i = 1, \dots, p$, so ergibt sich für jedes $\xi \in K - x^*$, das sich voraussetzungsgemäß als $\xi = \sum_{i=1}^p P_i \eta_i$ mit $\eta_i \in Y_i^{\mathcal{R}}(x^*)$ darstellen lässt, unmittelbar

$$\langle -\nabla f(x^*), \xi \rangle = \langle -\nabla f(x^*), \sum_{i=1}^p P_i \eta_i \rangle = \sum_{i=1}^p \langle -P_i' \nabla f(x^*), \eta_i \rangle \leq 0$$

und damit $\Gamma_K(x^*) = 0$. □

Diese Situation verallgemeinert die Diskussion in [92]. Dort wird mit einer festen Raumzerlegung $V = \sum_{i=1}^p V_i$ verlangt, dass sich die konvexe Menge K in der Form

$$K = \sum_{i=1}^p K_i$$

mit abgeschlossenen konvexen Mengen $K_i \subseteq V_i$ darstellen lässt, wie es in der rechten Grafik in Abbildung 2.2.3 mit $K = K_1 + K_2$ abgebildet ist. Das Verfahren in [89] hingegen lässt sich wegen der durch die *forget-me-not*-Terme erzeugten Überlappungen als ein Raumzerlegungsverfahren interpretieren, bei dem in jedem Iterationsschritt eine angepasste Raumzerlegung für den auf K projizierten Gradienten $\Pi_{K-x^k}(-\nabla f(x^k))$ mit der Eigenschaft

$$\Pi_{K-x^k}(-\nabla f(x^k)) \in \sum_{i=1}^p K_i^k$$

konstruiert wird. In der linken Grafik der Abbildung 2.2.3 ist eine nicht überlappende, angepasste Zerlegung angedeutet.

2.2.9 Satz Sei f stetig differenzierbar und auf der von $x^0 \in K$ erzeugten Niveaumenge $X_0 = \{x \in K : f(x) \leq f(x^0)\}$ nach unten beschränkt. Die Folge $\{x^k\}$ sei eine durch den Algorithmus in 2.2.7 erzeugte und nicht abbrechende Iterationsfolge. Es gebe eine \mathcal{F} -Funktion ω , so dass jede Raumzerlegung $\mathcal{R}^k = \{(W_i^k, P_i^k, R_i^k) : i = 1, \dots, p\}$ die Abschätzung

$$\sum_{i=1}^p \left\| \Pi_{Y_i^{\mathcal{R}^k}(x^k)}^{W_i^k} \left(- (P_i^k)' \nabla f(x^k) \right) \right\| \geq \omega(\|\Pi_{K-x^k}^V(-\nabla f(x^k))\|) \quad (2.2.11)$$

in x^k erfüllt. Ferner gebe es \mathcal{F} -Funktionen φ_i^1 und φ_i^2 , derart dass in jedem Schritt die Abstiegsrichtung in den Teilräumen d_i^k und Schrittweiten α_i^k die Ungleichungen

$$-\langle g_i^k, d_i^k \rangle \geq \varphi_i^1(\Gamma_K^{\mathcal{R}^k, i}(x^k)) \quad (2.2.12a)$$

$$\alpha_i^k \geq \varphi_i^2(\Gamma_K^{\mathcal{R}^k, i}(x^k)) \quad (2.2.12b)$$

für $i = 1, \dots, p$ erfüllen. Dann ist die Folge $\{x^k\}$ verallgemeinert schwach minimierend bezüglich (Min_K) .

Beweis

Analog zum Beweis von Satz 1.4.10 gilt

$$f(x^{k+1}) \leq F^k + \sum_{i=1}^p \beta_i \delta_i \alpha_i^k \langle g_i^k, d_i^k \rangle,$$

woraus in Fortsetzung der Analogie aus (2.2.12) die Existenz von \mathcal{F} -Funktionen φ_i mit

$$\begin{aligned} F^k - f(x^{k+1}) &\geq - \sum_{i=1}^p \beta_i \delta_i \alpha_i^k \langle g_i^k, d_i^k \rangle \\ &\geq \sum_{i=1}^p \beta_i \delta_i \varphi_i^2(\Gamma_K^{\mathcal{R}^k, i}(x^k)) \varphi_i^1(\Gamma_K^{\mathcal{R}^k, i}(x^k)) = \sum_{i=1}^p \varphi_i(\Gamma_K^{\mathcal{R}^k, i}(x^k)) \end{aligned}$$

folgt. Wegen der Bedingung (2.2.11) gibt es nun in analoger Weise zum Beweis von Lemma 1.4.4 nach Bemerkung 1.4.5 eine \mathcal{F} -Funktion φ mit

$$\sum_{i=1}^p \varphi_i(\Gamma_K^{\mathcal{R}^k, i}(x^k)) \geq \varphi(\Gamma_K(x^k))$$

Damit ist die Voraussetzung des verallgemeinerten Zentrallemmas 1.5.2 mit $\gamma^k = \Gamma_K^{\mathcal{R}^k, i}(x^k)$ erfüllt, und es gilt $\liminf_{k \rightarrow \infty} \Gamma_K^{\mathcal{R}^k, i}(x^k)$, woraus die Behauptung folgt. \square

Mit einer Verallgemeinerung der Bedingung (1.4.4) lässt sich die Konvergenztheorie wie im unrestringierten Fall fortsetzen.

2.2.10 Satz *Es gelten die Voraussetzungen von Satz 2.2.9. Es gebe zusätzlich eine positive Konstante C , so dass*

$$\sum_{i=1}^p \left\| \Pi_{Y_i^{\mathcal{R}^k}(x^k)}^{W_i^k} \left(- (P_i^k)' \nabla f(x^k) \right) \right\| \leq C \left\| \Pi_{K-x^k}^V(-\nabla f(x^k)) \right\| \quad (2.2.13)$$

gleichmäßig für alle Raumzerlegungen $\mathcal{R}^k = \{(W_i^k, P_i^k, R_i^k) : i = 1, \dots, p\}$ in x^k erfüllt ist. Desweiteren sei die Iterationsfolge $\{x^k\}$ beschränkt, und es gebe $\bar{\alpha} > 0$ und \mathcal{F}^* -Funktionen ψ und $\psi_i^1, \psi_i^2, i = 1, \dots, p$, mit denen die Ungleichungen

$$\alpha_i^k \leq \bar{\alpha} \quad (2.2.14a)$$

$$\|d_i^k\| \leq \psi_i^1(\Gamma_K^{\mathcal{R}^k, i}(x^k)) \quad (2.2.14b)$$

$$\|x^{k+1} - x^k\| \leq \psi \left(\max_{0 \leq i \leq p} \psi_i^2(\alpha_i^k \|d_i^k\|) \right) \quad (2.2.14c)$$

für alle $k \in \mathbb{N}_0$ und $i \in \{1, \dots, p\}$ erfüllt sind. Dann gelten die folgenden Aussagen.

- (i) Die Iterationsfolge $\{x^k\}$ ist verallgemeinert minimierend.

- (ii) Kein Häufungspunkt von $\{x^k\}$ ist lokales Maximum von f .
- (iii) Die Zielfunktionswertfolge $\{f(x^k)\}$ konvergiert.
- (iv) Die Folge $\{x^k\}$ konvergiert, falls es eine die Folge enthaltende, abgeschlossene Menge gibt, die keinen Häufungspunkt von $S_K = \{x \in \mathbb{R}^n : \Gamma_K(x) = 0\}$ enthält.

Beweis

Ähnlich wie im Beweis zu Satz 1.4.11 gilt die Abschätzung

$$\begin{aligned} \|x^{k+1} - x^k\| &\leq \psi\left(\max_{0 \leq i \leq p} \psi_i^2(\alpha_i^k \|d_i^k\|)\right) \leq \psi\left(\max_{0 \leq i \leq p} \psi_i^2(\bar{\alpha} \psi_i^1(\Gamma_K^{\mathcal{F}^k, i}(x^k)))\right) \\ &\leq \psi\left(\max_{0 \leq i \leq p} \psi_i^2(\bar{\alpha} \psi_i^1(C\Gamma_K(x^k)))\right) \leq \Psi(\Gamma_K(x^k)) \end{aligned}$$

mit einer geeigneten \mathcal{F} -Funktion Ψ . Die ersten drei Aussagen folgen dann mit Punkt (vi) und (v) des Lemmas 1.5.2. Die letzte (iv) folgt mit dem Korollar 1.2.13, da $\Gamma_K(x)$ wegen Aussage (i) des Projektionssatzes 2.2.1 stetig ist. \square

Abschließend werden anhand eines Beispiels die Bedingungen (2.2.11) und (2.2.13) diskutiert.

2.2.11 Beispiel Für den Raum V sei eine Raumzerlegung gegeben, derart dass V als direkte Summe

$$V = V_1 \oplus \cdots \oplus V_p$$

der Unterräume $V_i = W_i \subseteq V$ dargestellt werden kann. Die Einbettungen der Raumzerlegung werden dann mit $P_i = I_{V_i}$ festgelegt, während die Restriktion $R_i : V \rightarrow V_i$ das Element $v \in V$ mit der eindeutigen Darstellung

$$v = \sum_{j=1}^p v_j \quad \text{mit} \quad v_j \in V_j, \quad j = 1, \dots, p,$$

auf v_i abbildet. Die nicht leeren Mengen $K_i \subseteq V_i$ seien abgeschlossen und konvex und enthalten das Nullelement von V . Dann ist

$$K = \sum_{i=1}^p K_i \subseteq V$$

abgeschlossen und konvex und es gilt für jedes $v \in K$ mit $v = \sum_{i=1}^p v_i$ und $v_i \in K_i$

$$K - v = \sum_{i=1}^p K_i - v_i;$$

d. h. die verschobene Menge $K - v$ hat eine zu K analoge Darstellung.

Aus den Variationsungleichungen

$$\langle v - \Pi_K(v), w - \Pi_K(v) \rangle \leq 0 \quad \forall w \in K \quad (2.2.15a)$$

$$\langle v - \Pi_{K_i}(v), w_i - \Pi_{K_i}(v) \rangle \leq 0 \quad \forall w_i \in K_i \quad (i = 1, \dots, p) \quad (2.2.15b)$$

(mit $\Pi_K = \Pi_K^V$ und $\Pi_{K_i} = \Pi_{K_i}^V$) erhält man mit $w = \sum_{i \neq j} R_i \Pi_K(v) + \Pi_{K_j}(v)$ und $w_i = R_i \Pi_K(v)$ die Ungleichungen

$$\langle v - \Pi_K(v), \Pi_{K_i}(v) - R_i \Pi_K(v) \rangle \leq 0$$

$$\langle v - \Pi_{K_i}(v), R_i \Pi_K(v) - \Pi_{K_i}(v) \rangle \leq 0$$

für $i = 1, \dots, p$, woraus sich wegen $\Pi_K(v) = \sum_{j=1}^p R_j \Pi_K(v)$ nach Summation des Ungleichungspaars die Abschätzung

$$\begin{aligned} \|\Pi_{K_i}(v) - R_i \Pi_K(v)\|^2 &\leq \left\langle \sum_{j \neq i} R_j \Pi_K(v), \Pi_{K_i}(v) - R_i \Pi_K(v) \right\rangle \\ &\leq \sum_{j \neq i} \|R_j \Pi_K(v)\| \|\Pi_{K_i}(v) - R_i \Pi_K(v)\| \quad (2.2.16) \end{aligned}$$

und daraus

$$\|\Pi_{K_i}(v)\| \leq \sum_{j=1}^p \|R_j \Pi_K(v)\| \quad \forall v \in V$$

ergibt. D. h. (2.2.13) ist mit $C = p$ erfüllt. Außerdem folgt im Fall orthogonaler Unterräume V_i ($V_i \perp V_j$ für $i \neq j$, also $\langle v_i, v_j \rangle = 0$ für alle $v_i \in V_i$ und $v_j \in V_j$) in der obigen Abschätzung

$$\left\langle \sum_{j \neq i} R_j \Pi_K(v), \Pi_{K_i}(v) - R_i \Pi_K(v) \right\rangle = 0$$

und somit $\Pi_{K_i}(v) = R_i \Pi_K(v)$; in diesem Falle gilt dann bereits (2.2.11).

Gilt für ein $v \in V$, dass die $\Pi_{K_i}(v)$ für $i = 1, \dots, p$ verschwinden, folgt aus (2.2.15a)

$$\langle v, w_i \rangle \leq 0 \quad \forall w_i \in K_i, \quad i = 1, \dots, p, \quad \text{und damit} \quad \langle v, w \rangle \leq 0 \quad \forall w \in K.$$

Damit ist $\Pi_K(v) = 0$, was schließlich die Äquivalenz lokaler und globaler Kritizität bedeutet.

In bekannter Weise sei der Winkel $\theta_{ij} \in [0, \frac{\pi}{2}]$ zwischen den Räumen V_i und V_j durch

$$\cos(\theta_{ij}) = \max\{\langle v_i, v_j \rangle : v_i \in V_i, v_j \in V_j, \|v_i\| = \|v_j\| = 1\}$$

für $i, j \in \{1, \dots, p\}$ definiert. Offenbar ist $\theta_{ij} = \theta_{ji}$, $\cos(\theta_{ii}) = 1$ und $\theta_{ii} = 0$. Damit erhält man aus der linken Ungleichung in (2.2.16)

$$\|\Pi_{K_i}(v) - R_i \Pi_K(v)\| \leq \sum_{j \neq i} \cos(\theta_{ij}) \|R_j \Pi_K(v)\|$$

für $i = 1, \dots, p$ und mit Anwendung der Dreiecksungleichung („nach links“) und Summation über i

$$\sum_{i=1}^p \|\Pi_{K_i}(v)\| \geq \sum_{i=1}^p \left(1 - \sum_{j \neq i} \cos(\theta_{ij}) \right) \|R_i \Pi_K(v)\|.$$

Dies bedeutet, dass auch (2.2.11) mit

$$\omega(t) = \min_{i=1, \dots, p} \left\{ 1 - \sum_{j \neq i} \cos(\theta_{ij}) \right\} t$$

erfüllt ist, falls die Räume V_i „hinreichend orthogonal“ zueinander stehen, im Sinne von

$$1 - \sum_{j \neq i} \cos(\theta_{ij}) > 0$$

für $i = 1, \dots, p$. □

2.3 Einige Grundlagen nichtlinearer Optimierung

Nonlinear Programming. *That is, (P) is a finite dimensional optimization problem whose feasible set is defined by a finite number of equality and inequality type constraints. [11]*

In diesem Abschnitt werden lediglich die Bezeichnungen und Grundlagen, die zur Darstellung und zum Verständnis der weiteren Diskussion zur nichtlinearen Optimierungsaufgabe notwendig sind, eingeführt. Für eine umfassende Darstellung der bekannten Aussagen sei auf Standardmonografien zur nichtlinearen Optimierung wie [3, 90, 8] verwiesen.

2.3.1 Aufgabenstellung und Bezeichnungen

Die Aufgabenstellung in ihrer allgemeinen Form hat die Gestalt

$$x^* = \operatorname{argmin}_{x \in X} f(x) \tag{NLO}$$

mit $X = \{x \in \mathbb{R}^n : c_{\mathbb{G}}(x) = 0, c_{\mathbb{U}}(x) \leq 0\}$.

Das Zielfunktional $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ und die Restriktionsfunktion $c_i : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, $i \in \mathbb{I} = \mathbb{G} \cup \mathbb{U}$ werden als stetig differenzierbar oder, falls notwendig, stillschweigend als zweimal stetig differenzierbar vorausgesetzt. Dabei sei

$$\mathbb{G} = \{1, \dots, n_{\mathbb{G}}\}$$

mit $n_{\mathbb{G}} < n$ die Indexmenge der Gleichungsrestriktionen $c_i(x) = 0$ und

$$\mathbb{U} = \{n_{\mathbb{G}} + 1, \dots, n_{\mathbb{I}}\}$$

der Ungleichheitsrestriktionen $c_i(x) \leq 0$. Die Restriktion c_i heißt aktiv in x , falls $c_i(x) = 0$ gilt. Die Indexmenge

$$\mathbb{U}_{akt}(x) = \{i \in \mathbb{U} : c_i(x) = 0\}$$

umfasst die Indizes der in x aktiven Ungleichungsrestriktionen. Die Jacobimatrizen der Restriktionsfunktionen werden mit

$$A(x) = \nabla c(x) = (\nabla c_1(x), \dots, \nabla c_{n_I}(x)), \quad A_G(x) = \nabla c_G(x) \quad \text{und} \quad A_U(x) = \nabla c_U(x)$$

bezeichnet.

Die Stelle $x^* \in X$ ist eine *lokale Lösung* von (NLO), falls es eine offene Umgebung U von x^* gibt mit

$$x^* = \underset{X \cap U}{\operatorname{argmin}} f(x).$$

Die Lagrangefunktion $\ell : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^{n_I} \rightarrow \mathbb{R}$ zur nichtlinearen Optimierungsaufgabe (NLO)

$$\ell(x, \lambda) := f(x) + \langle \lambda, c(x) \rangle = f(x) + \langle \lambda_G, c_G(x) \rangle + \langle \lambda_U, c_U(x) \rangle$$

spielt in der Theorie restringierter Optimierungsaufgaben und im Folgenden eine wichtige Rolle. Der Lagrangeparameter λ wird auch als *duale Variable* der nichtlinearen Optimierungsaufgabe betrachtet, im Gegensatz zu der *primalen Variablen* x . Mit

$$\nabla \ell = \nabla_x \ell$$

wird der Gradient und entsprechend mit $\nabla^2 \ell = \nabla_{xx} \ell$ die Hessematrix bezüglich der primalen Variablen bezeichnet.

2.3.2 Optimalitätskriterien

Notwendig dafür, dass x^* eine lokale Lösung von (NLO) ist, sind die Fritz–John–Bedingungen; diese garantieren im lokalen Lösungspunkt die Existenz von $\mu_0 \in \mathbb{R}$

und $\mu \in \mathbb{R}^{n_1}$, die dem System der Fritz–John–Bedingungen

$$\begin{aligned} \mu_0 \nabla f(x^*) + (A_{\mathbb{G}}(x^*)) \mu_{\mathbb{G}} + (A_{\mathbb{U}}(x^*)) \mu_{\mathbb{U}} &= 0 \\ \mu_0 &\geq 0 \\ \mu_{\mathbb{U}} &\geq 0 \\ \mu_i c_i(x^*) &= 0, \quad \forall i \in \mathbb{U} \\ c_{\mathbb{G}}(x^*) &= 0 \\ c_{\mathbb{U}}(x^*) &\leq 0 \\ (\mu_0, \mu) &\neq 0 \end{aligned}$$

genügen. Der Fall $\mu_0 = 0$ ist jedoch insofern bedeutungslos, als er lediglich die lineare Abhängigkeit der in x^* aktiven Restriktionen feststellt, ohne einen Bezug zum Abstiegsverhalten des Zielfunktional herzustellen zu können. Unter Voraussetzungen an die Nebenbedingungen c_i in x^* , den sogenannten Restriktionsqualifikationen (*constrained qualifications*), kann $\mu_0 \neq 0$ sichergestellt werden, was mit $\lambda = \frac{1}{\mu_0} \mu$ den Übergang zu den Karush–Kuhn–Tucker–Bedingungen (im Folgenden als KKT–Bedingungen bezeichnet)

$$\nabla f(x^*) + A_{\mathbb{G}}(x^*) \lambda_{\mathbb{G}} + A_{\mathbb{U}}(x^*) \lambda_{\mathbb{U}} = 0 \tag{2.3.1a}$$

$$\lambda_{\mathbb{U}} \geq 0 \tag{2.3.1b}$$

$$\lambda_i c_i(x^*) = 0, \quad \forall i \in \mathbb{U} \tag{2.3.1c}$$

$$c_{\mathbb{G}}(x^*) = 0 \tag{2.3.1d}$$

$$c_{\mathbb{U}}(x^*) \leq 0 \tag{2.3.1e}$$

$$\lambda \neq 0 \tag{2.3.1f}$$

gestattet. Die Stelle $x^* \in \mathbb{R}^n$ heißt *KKT–Punkt*, falls es ein $\lambda^* \in \mathbb{R}^{n_1}$ gibt, so dass (x^*, λ^*) den KKT–Bedingungen genügt. Die Lagrangefunktion erlaubt es, die häufig als eigentliche KKT–Bedingung bezeichnete Gleichung (2.3.1a) in der Form $\nabla \ell(x^*, \lambda) = 0$ darzustellen.

Während die KKT–Bedingungen (2.3.1) eine notwendige Bedingung für die Optimalität von x^* darstellen, soweit an dieser Stelle eine Restriktionsqualifikation erfüllt ist, liefert der folgende Satz ein hinreichendes Kriterium dafür, dass der KKT–Punkt x^* mit Lagrangeparameter λ^* eine lokale, isolierte Minimumstelle von (NLO) ist.

Dazu wird der Kegel

$$\hat{\mathcal{K}}_{lin}(x^*) := \{z \in \mathbb{R}^n : \langle \nabla c_i(x^*), z \rangle \leq 0 \ \forall i \in \mathbb{U}_{akt}(x^*)\} \cap \{z \in \mathbb{R}^n : \langle \nabla c_i(x^*), z \rangle = 0 \ \forall i \in \mathbb{G} \cup \hat{\mathbb{U}}_{akt}(x^*)\}$$

benötigt, wobei die Indexmenge

$$\hat{\mathbb{U}}_{akt}(x^*) = \{i \in \mathbb{U}_{akt}(x^*) : \lambda_i^* > 0\}$$

die Indizes der sogenannten stark aktiven Ungleichungsrestriktionen umfasst. Falls keine Ungleichungsrestriktionen vorhanden sind, $\mathbb{U} = \emptyset$, ist der Kegel durch

$$\hat{\mathcal{K}}_{lin}(x^*) = \{z \in \mathbb{R}^n : \langle \nabla c_i(x^*), z \rangle = 0 \ \forall i \in \mathbb{G}\}$$

gegeben.

2.3.1 Satz ([8, prop. 3.2.1], [3, theorem 4.4.2]) *Es seien $x^* \in X$ und $\lambda^* \in \mathbb{R}^m$ derart, dass die KKT-Bedingung (2.3.1) erfüllt ist. Weiterhin gelte mit einer positiven Konstante α die Ungleichung*

$$\langle (\nabla^2 \ell(x^*, \lambda^*)) z, z \rangle \geq \alpha \langle z, z \rangle, \quad \forall z \in \hat{\mathcal{K}}_{lin}(x^*). \quad (2.3.2)$$

Dann ist x^ eine streng isolierte, lokale Minimumstelle von (NLO).*

2.3.3 Restriktionsqualifikationen

Die schwächste Restriktionsqualifikation, die für die Existenz der Lagrangeparameter in der KKT-Bedingung einer lokalen Minimumstelle x^* hinreichend ist, ist die *Abadie-Bedingung*

$$\mathcal{K}_{tng}(x^*) = \mathcal{K}_{lin}(x^*),$$

wobei der *Tangentialkegel* von X in $x^* \in X$ durch

$$\mathcal{K}_{tng}(x^*) = \left\{ s \in \mathbb{R}^n : \exists \{x^k\} \subseteq X \setminus \{x^*\}, \alpha \geq 0 \quad \text{mit} \quad s = \alpha \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{x^k - x^*}{\|x^k - x^*\|} \right\}$$

und der Kegel der in x^* linearisierten Nebenbedingungen durch

$$\mathcal{K}_{lin}(x^*) = \{s \in \mathbb{R}^n : \langle \nabla c_i, s \rangle = 0 \text{ für } i \in \mathbb{G}, \langle \nabla c_i, s \rangle \leq 0 \text{ für } i \in \mathbb{U}_{akt}\}$$

gegeben ist. Bertsekas nennt in [8] Stellen, die der Abadie-Bedingung genügen, *quasiregulär*. Die Abadie-Bedingung ist nur schwer überprüfbar.

2.3.2 Definition (Mangasarian–Fromowitz–Bedingung)

Die Mangasarian–Fromowitz–Restriktionsqualifikation ist in $x^* \in X$ erfüllt, falls es einen Vektor $z \in \mathbb{R}^n$ gibt, so dass

$$\langle \nabla c_i(x^*), z \rangle < 0 \quad (\forall i \in \mathbb{U}_{akt}(x^*)) \quad \text{und} \quad \langle \nabla c_i(x^*), z \rangle = 0 \quad (\forall i \in \mathbb{G})$$

gelten und zudem $\text{rang}(\nabla c_{\mathbb{G}}(x^*)) = n_{\mathbb{G}}$ gilt.

In einem KKT–Punkt, in dem die Mangasarian–Fromowitz–Bedingung erfüllt ist, ist der Lagrangeparameter nicht notwendig eindeutig bestimmt. Jedoch ist die Mangasarian–Fromowitz–Bedingung äquivalent dazu, dass die Menge der Lagrangeparameter nicht leer (Existenz) und beschränkt ist, [33].

Mit die stärkste und leicht überprüfbare Restriktionsqualifikation ist die Regularitätsbedingung.

2.3.3 Definition (Regularitätsbedingung) Ein Punkt $x^* \in X$ heißt regulär, falls die Gradienten der in x^* aktiven Nebenbedingungen $\{\nabla c_i(x^*) : i \in \mathbb{G} \cup \mathbb{U}_{akt}(x^*)\}$ linear unabhängig sind.

In einem regulären KKT–Punkt ist der Lagrangeparameter eindeutig bestimmt.

2.4 Raumzerlegungen in modifizierten Straftermverfahren

[...] it seems that the only sensible way to distribute variables for problems with inseparable constraints is to convert them to unconstrained problems or to problems with separable constraints. [26]

Die Untersuchung von Raumzerlegungsstrategien für allgemeine nichtlineare Optimierungsaufgaben gestaltet sich schwierig und ist in der Literatur offenbar nicht sehr breit diskutiert worden. Sofern die Restriktionen keine separable Struktur aufweisen, erscheint es aussichtslos, allgemeingültige Zerlegungsstrategien zu entwickeln, in denen Teilprobleme konstruiert werden, in die jeweils nur ein Teil der Restriktionen eingehen. Diese Ansätze beschränken sich auf speziell strukturierte Problemstellungen, [25, 26]. Der einzige *allgemein* praktikable Zugang für parallelisierbare Verfahren, sind offenbar Lösungsstrategien, die (im Wesentlichen) unrestringierte Ersatzprobleme mit Hilfe geeigneter Bewertungsfunktionen erzeugen, [26, 80, 68]; nach Abschnitt 2.2 sind auch konvex restringierte Ersatzprobleme parallelisierbar.

Über Straftermmethoden (*penalty methods*) steht ein Zugang zur Verfügung, Methoden unrestringierter Verfahren auf restringierte Probleme anzuwenden. Es ist jedoch bekannt, dass reine Straftermverfahren wegen des unbeschränkt wachsenden Strafparameters zu schlecht konditionierten Problemen führen. Mit den erweiterten Lagrangeverfahren, die als modifizierte Straftermverfahren aufgefasst werden können, kann dieser Umstand jedoch umgangen werden. Die erweiterten Lagrangeverfahren, die in der angelsächsischen Literatur als *multiplier methods* oder auch *augmented Lagrangian methods* bekannt sind, gehen auf die Ende der sechziger Jahre voneinander unabhängig entstandenen Arbeiten von Hestenes, [47], und Powell, [75], zurück. Unter anderem stellten Rockafellar und Bertsekas weitere umfangreiche Untersuchungen hierzu an, [4, 5, 6]. Die Monografie [7] gehört zu den Standardreferenzen der Verfahrensklasse. In der französischen Schule wurde die Verfahrensidee in Bereichen der theoretischen Mechanik (Elastizitätstheorie, Fluidmechanik) untersucht, [29, 36]. Ito und Kunisch entwickelten eine Theorie der Methode in Hilbert- und Banachräumen, um diese auf Parameteridentifikationsprobleme partieller Differentialgleichungen anzuwenden, [49, 51, 50, 52].

Die in Kapitel 3 interessierenden Aufgabenstellungen enthalten als Ungleichungsre-

striktionen Intervallbedingungen, die einen konvexen Zulässigkeitsbereich erzeugen, d. h.

$$X_{\mathbb{U}} = \{x \in \mathbb{R}^n : c_{\mathbb{U}}(x) \leq 0\}$$

ist konvex, und die Verfahren sind bezüglich dieser leicht einzuhaltenden Nebenbedingungen zulässig, $\{x^k\} \subset X_{\mathbb{U}}$, so dass auf durch $X_{\mathbb{U}}$ restringierte Optimierungsaufgaben Raumzerlegungsverfahren aus Abschnitt 2.2 anwendbar sind.

Im Gegensatz dazu stellen die Gleichheitsrestriktionen als die wesentliche Nebenbedingung aufwendiger zu lösende Systeme dar, wie sie bei der Diskretisierung partieller Differentialgleichungen entstehen. Um die Darstellung zu vereinfachen, wird daher das rein gleichungsrestringierte Problem

$$x^* = \underset{c(x)=0}{\operatorname{argmin}} f(x) \quad (NLO=)$$

mit $c : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$, $m < n$, untersucht. D. h. in der bisherigen Notation sind $\mathbb{U} = \emptyset$, $\mathbb{G} = \mathbb{I}$ und $m = n_{\mathbb{G}}$. Das KKT-System für das nur gleichungsrestringierte Optimierungsproblem vereinfacht sich gegenüber (2.3.1) zu

$$\nabla f(x^*) + A(x^*)\lambda^* = 0 \quad (2.4.1a)$$

$$c(x^*) = 0. \quad (2.4.1b)$$

2.4.1 Straftermverfahren

Mit einer stetigen Funktion $\sigma : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}_0^+$, die die Eigenschaften

$$\sigma(0) = 0 \quad \text{und} \quad \sigma(t) > 0 \quad \text{für} \quad t \neq 0$$

besitzt, lässt sich die Straffunktion

$$x \mapsto \sum_{i=1}^m \sigma(c_i(x))$$

definieren. In der modifizierten Zielfunktion

$$f_{\rho}(x) = f(x) + \rho \sum_{i=1}^m \sigma(c_i(x))$$

wird der Strafterm über den Strafparameter $\rho \geq 0$ gewichtet. Es ist bekannt, dass mit einer immer höheren Wichtung des Strafterms in der freien Minimierungsaufgabe

$$x_\rho^* = \operatorname{argmin}_{x \in \mathbb{R}^n} f_\rho(x)$$

unter Voraussetzungen eine beliebig genaue Approximation einer Lösung x^* von (NLO=) erhalten werden kann.

2.4.1 Aussage ([3], Satz 9.2.2) Seien f , c und σ stetig. Dann gilt

$$\inf \{f(x) : c(x) = 0\} = \sup \{f_\rho(x_\rho^*) : \rho \geq 0\} = \lim_{\rho \rightarrow \infty} f_\rho(x_\rho^*).$$

Außerdem ist jeder Häufungspunkt von $\{x_\rho^*\}$ eine Lösung des Ausgangsproblems (NLO=) und es gilt $\lim_{\rho \rightarrow \infty} \rho \sigma(\|c(x_\rho^*)\|) = 0$.

Damit ergibt sich die einfache algorithmische Idee des Straftermverfahrens.

2.4.2 Algorithmus (Straftermverfahren)

Wähle Startwert x^0 , $\rho^0 > 0$, $\alpha > 1$

für $k = 0, 1, \dots$

Bestimme numerisch mit Startwert x^k die nächste Iterierte

$$x^{k+1} \approx \operatorname{argmin}_{x \in \mathbb{R}^n} f_{\rho^k}(x) \tag{2.4.2}$$

setze $\rho^{k+1} = \alpha \rho^k$

bis ein Abbruchkriterium erfüllt ist

Für die unrestringierte, numerische Minimierung (2.4.2) lässt sich ein Raumzerlegungsverfahren aus Kapitel 1 einsetzen.

Bei exakter Minimierung und differenzierbaren Funktionen f , c und σ gilt für die Iterierten

$$0 = \nabla f_{\rho^k}(x^{k+1}) = \nabla f(x^{k+1}) + \rho^k \sum_{i=1}^m \sigma'(c_i(x^{k+1})) \nabla c_i(x^{k+1}). \tag{2.4.3}$$

Für einen Häufungspunkt x^* als Grenzwert von $\{x^{k_j}\}$ folgt daraus

$$0 = \nabla f(x^*) + \sum_{i=1}^m \lambda_i^* \nabla c_i(x^*) = \nabla f(x^*) + A(x^*) \lambda^*$$

mit $\lambda_i^* = \lim_{j \rightarrow \infty} \rho^{k_j-1} \sigma'(c_i(x^{k_j}))$. Dies bedeutet, dass man bei großem ρ^k mit $\rho^k \sigma'(c_i(x^{k+1}))$ gute Schätzwerte für den Lagrangeparameter λ_i^* erhalten kann.

Es ergibt sich eine zu (NLO=) im Sinne gleicher Lösungsmengen äquivalente Aufgabenstellung, wenn das Zielfunktional f durch die Lagrangefunktion ℓ ersetzt wird,

$$x^* = \operatorname{argmin}_{c(x)=0} \ell(x, \lambda),$$

und der Lagrangeparameter λ zunächst beliebig, aber fest ist. Denn es gilt $\ell(x, \lambda) = f(x)$ für x aus dem Zulässigkeitsbereich $\{y \in \mathbb{R}^n : c(y) = 0\}$.

Im Weiteren beschränken wir uns auf den Standardfall $\sigma(t) = \frac{1}{2}t^2$, um die Darstellung zu vereinfachen. Die mit einem Strafterm versehene *erweiterte Lagrangefunktion* lautet dann

$$\ell_\rho(x, \lambda) = \ell(x, \lambda) + \frac{\rho}{2} \|c(x)\|^2 = f(x) + \langle \lambda, c(x) \rangle + \frac{\rho}{2} \|c(x)\|^2,$$

was auch als Lagrangefunktion zur restringierten Optimierungsaufgabe

$$x^* = \operatorname{argmin}_{c(x)=0} f_\rho(x)$$

aufgefasst werden kann. In Modifikation von Aussage 2.4.1 lässt sich für ein „leicht veränderliches λ “ die folgende Aussage nach Proposition 2.1 in [7] treffen.

2.4.3 Aussage ([7], Proposition 2.1) Seien f und c stetig, $\{\lambda^k\} \subset \mathbb{R}^m$ beschränkt und $\{\rho^k\} \subset \mathbb{R}^+$ streng monoton wachsend, und

$$x^{k+1} = \operatorname{argmin}_{x \in \mathbb{R}^n} \ell_{\rho^k}(x, \lambda^k)$$

sei globale Minimumstelle von $\ell_{\rho^k}(x, \lambda^k)$. Dann ist jeder Häufungspunkt von $\{x^k\}$

globale Minimumstelle von (NLO=) und für jede konvergente Teilfolge $\{x^{k_j}\}$ gilt

$$\lim_{j \rightarrow \infty} \rho^{k_j-1} \|c(x^{k_j})\|^2 = 0$$

Wiederholt man die Diskussion um (2.4.3) zur Bestimmung des zu einem Häufungspunkt x^* gehörenden Lagrangeparameters λ^* , erhält man

$$\lambda^* = \lim_{j \rightarrow \infty} (\lambda^{k_j} + \rho^{k_j-1} c(x^{k_j})) = \lim_{j \rightarrow \infty} \lambda^{k_j} + \lim_{j \rightarrow \infty} \rho^{k_j-1} c(x^{k_j}), \quad (2.4.4)$$

da über ein Kompaktheitsargument die Konvergenz der Teilfolge $\{\lambda^{k_j}\}$ angenommen werden kann. Durch Abschätzungen von Rayleighkoeffizienten der Hessematrix

$$\nabla^2 \ell_\rho(x^*, \lambda^*) = \nabla^2 f(x^*) + \sum_{i=1}^m \lambda_i^* \nabla^2 c_i(x^*) + \rho A(x^*) A(x^*)'$$

auf den Räumen $\text{bild}(A(x^*))$ und $\text{kern}(A(x^*))' = (\text{bild } A(x^*))^\perp$ lässt sich wie in [7, Abschnit 2.1] zeigen, dass die Kondition der Matrix mit wachsendem ρ beliebig groß wird, was zu numerischen Schwierigkeiten, wie z. B. vorzeitiger Verfahrensabbruch, führt.

Durch eine geeignete Aufdatierungsstrategie der Lagrangeparameterfolge kann die bei den Straftermverfahren theoretisch notwendige Unbeschränktheit der Strafparameterfolge vermieden werden.

2.4.2 Erweiterte Lagrangeverfahren

Ausgangspunkt der nun diskutierten Verfahren ist die erweiterte Lagrangefunktion

$$\ell_\rho(x, \lambda) = f(x) + \langle \lambda, c(x) \rangle + \frac{\rho}{2} \|c(x)\|^2.$$

Die erweiterten Lagrangeverfahren zeichnen sich gegenüber den Straftermverfahren durch eine einbezogene Aufdatierungsstrategie für den Lagrangeparameter aus. Das

Iterationsprinzip der Verfahrensklasse lautet

$$x^{k+1} = \operatorname{argmin}_{x \in \mathbb{R}^n} \ell_{\rho^k}(x, \lambda^k) \quad (2.4.5a)$$

$$\lambda^{k+1} = \lambda^k + \rho^k c(x^{k+1}), \quad (2.4.5b)$$

wobei die Überlegungen zu (2.4.4) als Motivation für die Aufdatierung des Lagrangeparameters dienen kann. Die Iteration lässt sich als Gradientenverfahren zur Maximierung der dualen Optimierungsaufgabe in der Umgebung einer lokalen Lösung auffassen, vgl. [7, Abschnitt 2.3].

Die Verfahrensanalyse zur lokalen Konvergenz um ein lokales Minimum x^* steht zum einen unter der Annahme, dass x^* regulär ist, d. h.

Voraussetzung (V1)

$$\operatorname{rang}(A(x^*)) = m$$

gilt, so dass der zugehörige Lagrangeparameter λ^* eindeutig bestimmt ist. Darüber hinaus wird mit Blick auf Satz 2.3.1 verlangt, dass die Hessematrix der Lagrangefunktion im lokalen Lösungspunkt (x^*, λ^*) der

Voraussetzung (V2)

$$\langle \nabla^2 \ell_0(x^*, \lambda^*) z, z \rangle > 0 \quad \forall z \in \operatorname{kern}(A(x^*)')$$

genügt, die hinreichend dafür ist, dass x^* eine lokal isolierte Minimumstelle von $(NLO=)$ ist. Eine wesentliche Folge der beiden Annahmen ist, dass die Hessematrix $\nabla^2 \ell_\rho(x^*, \lambda^*)$ des erweiterten Lagrangefunktionals bei hinreichend großem ρ im Lösungspunkt (x^*, λ^*) positiv definit ist.

2.4.4 Aussage ([7], Lemma 1.25) *Unter den Annahmen (V1) und (V2) gibt es ein $\underline{\rho} \geq 0$, so dass $\nabla^2 \ell_\rho(x^*, \lambda^*) = \nabla^2 \ell_0(x^*, \lambda^*) + \rho A(x^*) A(x^*)'$ positiv definit für jedes $\rho \geq \underline{\rho}$ ist.*

Dies bedeutet, dass für hinreichend große Strafparameter ρ in einer Umgebung von (x^*, λ^*) die erweiterte Lagrangefunktion sogar gleichmäßig konvex ist, Satz A.2.3. Darüber hinaus ist dann x^* die eindeutig bestimmte (lokale) Minimumstelle von $\ell_\rho(\cdot, \lambda^*)$; d. h. $\ell_\rho(\cdot, \lambda^*)$ ist eine exakte Bewertungsfunktion. Dabei heißt eine Bewer-

tungsfunktionen exakt, wenn ihre Minimumstelle gerade die zulässige Lösung des eigentlich zu lösenden restringierten Problems ist, also

$$\min_{c(x)=0} f(x) = \operatorname{argmin}_{x \in \mathbb{R}^n} \ell_\rho(x, \lambda^*).$$

Das folgende Beispiel veranschaulicht im einfachen Fall eines durch eine lineare Gleichung restringierten Problems mit quadratischem Zielfunktional das Verfahren und sein Konvergenzverhalten, dessen allgemeine Konvergenztheorie anschließend dargestellt wird.

2.4.5 Beispiel Das Zielfunktional sei durch $f(x) = \frac{1}{2}x'Bx + b'x$ mit symmetrischem $B \in \mathbb{R}^{n \times n}$ sowie $b \in \mathbb{R}^n$ und die Restriktion durch $c(x) = A'x - d$ mit $A \in \mathbb{R}^{n \times m}$ sowie $d \in \mathbb{R}^m$ gegeben, so dass die Aufgabe

$$x^* = \operatorname{argmin}_{A'x=d} \left(\frac{1}{2}x'Bx + b'x \right)$$

lautet. Die Matrix B sei auf dem Kern von A' positiv definit. Dann gibt es nach Aussage 2.4.4 ein $\rho > 0$, so dass $H_\rho = B + \rho AA'$ positiv definit ist. Als „erweitertes“ KKT-System bestehend aus der Bedingung $\nabla_x \ell_\rho(x, \lambda) = 0$ des Lagrangefunktionals

$$\ell_\rho(x, \lambda) = \frac{1}{2}x'Bx + b'x + \lambda'(A'x - c) + \frac{\rho}{2}\|A'x - c\|^2$$

und der Restriktionsbedingung ergibt sich das lineare Sattelpunktproblem

$$\begin{bmatrix} H_\rho & A \\ A' & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x^* \\ \lambda^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -b + \rho Ad \\ d \end{bmatrix},$$

woraus durch blockweise Elimination

$$\lambda^* = -(A'H_\rho^{-1}A)^{-1}A'H_\rho^{-1}b + (\rho I_m - (A'H_\rho^{-1}A)^{-1})d$$

und dann

$$\begin{aligned} x^* &= H_\rho^{-1}(-b + \rho Ad - A\lambda^*) \\ &= (-H_\rho^{-1} + H_\rho^{-1}A(A'H_\rho^{-1}A)^{-1}A'H_\rho^{-1})b + H_\rho^{-1}A(A'H_\rho^{-1}A)^{-1}d \end{aligned}$$

folgt. Der Iterationsschritt des erweiterten Lagrangeverfahrens stellt sich in der Form

$$\begin{aligned} H_\rho x^{k+1} &= -A\lambda^k + \rho Ad - b \\ \lambda^{k+1} &= \lambda^k + \rho(A'x^{k+1} - d) = (I_m - \rho A' H_\rho^{-1} A)\lambda^k + e \end{aligned}$$

mit $e = (I_m - \rho A' H_\rho^{-1} A)d + \rho A' H_\rho^{-1} b$ dar. Damit ist offenbar die Bedingung an den Spektralradius der symmetrischen Matrix $I_m - \rho A' H_\rho^{-1} A$

$$\text{sprd}(I_m - \rho A' H_\rho^{-1} A) = \|I_m - \rho A' H_\rho^{-1} A\| < 1$$

hinreichend und notwendig für die Konvergenz des Verfahrens bei konstantem Strafparameter ρ und beliebiger Wahl des Startwertes. Wie sich zeigen lässt, gilt

$$\lim_{\rho \nearrow \infty} \rho A' H_\rho^{-1} A = \lim_{\rho \nearrow \infty} A' \left(\frac{1}{\rho} B + A A' \right)^{-1} A = I_m,$$

so dass die Konvergenzbedingung für hinreichend großes ρ erfüllbar ist. □

Aufbauend auf der lokalen Konvexität in einer Umgebung der Optimalstelle lassen sich im allgemeinen Fall mit dem Satz der impliziten Funktionen, angewendet auf das System

$$\begin{aligned} \nabla \ell_\rho(x, \lambda^* + \rho \tau) = \nabla f(x) + A(x) \hat{\lambda} &= 0 \\ c(x) + \frac{1}{\rho} (\lambda^* + \rho \tau - \hat{\lambda}) &= 0 \end{aligned}$$

mit τ und $\frac{1}{\rho}$ als unabhängige Variablen, die folgenden Aussagen treffen.

2.4.6 Aussage ([7], Proposition 2.4) *Es gelten die Voraussetzungen (V1) und (V2) und es sei $\nabla^2 \ell_\rho(x^*, \lambda^*)$ positiv definit für $\rho \geq \underline{\rho}$. Dann gibt es positive Konstanten δ , ε und L derart, dass mit der Menge*

$$D = \{(\lambda, \rho) \in \mathbb{R}^m \times \mathbb{R} : |\lambda - \lambda^*| < \delta, \underline{\rho} \leq \rho\}$$

und einer ε -Umgebung U_ε^* von x^* die nachstehenden Aussagen gelten.

(i) Für alle $(\lambda, \rho) \in D$ hat das Optimierungsproblem

$$x(\lambda, \rho) = \operatorname{argmin}_{x \in U_\varepsilon^*} \ell_\rho(x, \lambda)$$

eine eindeutige Lösung. Die Funktion $x(\cdot, \cdot)$ ist stetig differenzierbar im Innern von D , und für $(\lambda, \rho) \in D$ gilt

$$\|x(\lambda, \rho) - x^*\| \leq L \frac{\|\lambda - \lambda^*\|}{\rho}. \quad (2.4.6)$$

(ii) Für alle $(\lambda, \rho) \in D$ gilt

$$\|\hat{\lambda}(\lambda, \rho) - \lambda^*\| \leq L \frac{\|\lambda - \lambda^*\|}{\rho} \quad (2.4.7)$$

mit

$$\hat{\lambda}(\lambda, \rho) = \lambda + \rho c(x(\lambda, \rho)). \quad (2.4.8)$$

(iii) Für alle $(\lambda, \rho) \in D$ ist die Hessematrix $\nabla^2 \ell_\rho(x(\lambda, \rho), \lambda)$ positiv definit und die Jacobimatrix $A(x(\lambda, \rho))$ hat Vollrang, $\operatorname{rang}(A(x(\lambda, \rho))) = m$.

Aussage 2.4.6 zeigt, dass der Iterationsschritt (2.4.5) in einer Umgebung des Lösungspunktes bei exakter Minimierung wohldefiniert ist. Nach einer exakten Berechnung von x^{k+1} gilt

$$0 = \nabla \ell_{\rho^k}(x^{k+1}, \lambda^k) = \nabla \ell_0(x^{k+1}, \lambda^k) + \rho^k A(x^{k+1})c(x^{k+1}) = \nabla \ell_0(x^{k+1}, \lambda^{k+1}),$$

so dass sich die neue Iterierte wegen der Konvexität gemäß

$$x^{k+1} = \operatorname{argmin}_{\substack{c(x)=c(x^{k+1}) \\ x \in U_\varepsilon^*}} \ell_0(x, \lambda^{k+1})$$

interpretieren lässt. Der Ansatz, über eine gestörte Nebenbedingung $c(x) = u$ eine exakte Bewertungsfunktion zu erzeugen, gehörte bereits zum Hintergrund der Arbeit [75]. Die Primalfunktion (*primal function*)

$$p(u) = \min\{f(x) : c(x) = u, x \in U_\varepsilon^*\}$$

spielt in der Darstellung der Konvergenztheorie in [7] eine bedeutende Rolle, da das Konvergenzverhalten durch das Spektrum von

$$\nabla^2 p(0) = \left(A(x^*) (\nabla^2 \ell_\rho(x^*, \lambda^*))^{-1} A(x^*)' \right)^{-1} - \rho I_m$$

bestimmt wird. Es sei darauf hingewiesen, dass $\nabla^2 p(0)$ trotz obiger Darstellung nicht von ρ abhängt. Es gilt nach [7] zunächst

$$\nabla^2 \ell_\rho(x^*, \lambda^*) \succ 0 \quad \Leftrightarrow \quad \nabla^2 p(0) + \rho I_m \succ 0 \quad (2.4.9)$$

($A \succ 0$ bezeichnet positive Definitheit, siehe S. 2), so dass für Positivität und Konvexität

$$\rho > \max \left\{ -\omega : \omega \in \text{spek}(\nabla^2 p(0)) \right\}$$

gelten muss. Konvergenz sichert aber erst $\rho \geq \hat{\rho}$, wobei $\hat{\rho}$ durch

$$\nabla^2 p(0) + \frac{1}{2} \hat{\rho} I_m \succ 0 \quad \text{bzw.} \quad \hat{\rho} > \max \left\{ -2\omega : \omega \in \text{spek}(\nabla^2 p(0)) \right\} \quad (2.4.10)$$

charakterisiert ist, gemäß der folgenden Aussage.

2.4.7 Aussage ([7], **Proposition 2.7**) *Es gelten (V1), (V2) und (2.4.10), δ sei wie in Aussage 2.4.6 und $\{\rho^k\}$ sei monoton wachsend mit $\hat{\rho} \leq \rho^k$. Dann gibt es eine positive Konstante $\tilde{\delta} \leq \delta$, so dass für $\frac{\|\lambda^0 - \lambda^*\|}{\rho^0} < \tilde{\delta}$ die Iteration*

$$\begin{aligned} x^{k+1} &= x(\lambda^k, \rho^k) \\ \lambda^{k+1} &= \lambda^k + \rho^k c(x^{k+1}) \end{aligned}$$

für jedes $k \in \mathbb{N}_0$ wohldefiniert ist, und es gelten

$$\lim_{k \rightarrow \infty} x^k = x^* \quad \text{und} \quad \lim_{k \rightarrow \infty} \lambda^k = \lambda^*.$$

Ist $\rho^* = \limsup_{k \rightarrow \infty} \rho^k < \infty$ und $\lambda^k \neq \lambda^*$, so gilt weiter

$$\limsup_{k \rightarrow \infty} \frac{\|\lambda^{k+1} - \lambda^*\|}{\|\lambda^k - \lambda^*\|} \leq \max \left\{ \left| \frac{\omega}{\omega + \rho^*} \right| : \omega \in \text{spek}(\nabla^2 p(0)) \right\},$$

und falls $\rho^* = \infty$ und $\lambda^k \neq \lambda^*$ für jedes k , dann ist

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\|\lambda^{k+1} - \lambda^*\|}{\|\lambda^k - \lambda^*\|} = 0.$$

Problematisch ist, dass in der Regel keine Aussagen über das Spektrum von $\nabla^2 p(0)$ gegeben sind. Es ist daher naheliegend, eine Parameterwahlstrategie in Abhängigkeit eines Zulässigkeitsmaßes $\|c(x)\|$ wie im folgenden Algorithmus einzuführen.

2.4.8 Algorithmus (eLgV)

Wähle $\lambda^0 \in \mathbb{R}^m$ sowie positive Parameter ρ^0 , $\alpha > 1$ und $\beta < 1$

für $k = 0, 1, \dots$

berechne

$$x^{k+1} \approx \operatorname{argmin}_{x \in \mathbb{R}^n} \ell_{\rho^k}(x, \lambda^k) \quad (2.4.12)$$

setze $\lambda^{k+1} = \lambda^k + \rho^k c(x^{k+1})$

$$\text{setze } \rho^{k+1} = \begin{cases} \alpha \rho^k & \text{falls } \|c(x^{k+1})\| > \beta \|c(x^k)\| \\ \rho^k & \text{falls } \|c(x^{k+1})\| \leq \beta \|c(x^k)\| \end{cases}$$

Formal wird für den erweiterten Lagrangealgorithmus kein Startwert x^0 benötigt. Tatsächlich wird jedes numerische Verfahren zur Lösung der Minimierung (2.4.12) einen solchen verlangen, und das Iterationsverhalten wird möglicherweise entscheidend von dieser Wahl beeinflusst. Als Startwert zur Berechnung von x^{k+1} durch ein Minimierungsverfahren wird naheliegend x^k herangezogen. Die Konvergenz des Verfahrens gegen die lokale Lösung (x^*, λ^*) unter den Voraussetzungen (V1) und (V2) ist nur gesichert, wenn (x^0, λ^0) im strikt konvexen Bereich der erweiterten Lagrangefunktion um (x^*, λ^*) für $\rho^k \geq \hat{\rho}$ liegt.

2.4.3 Eine Konvergenzaussage ohne exakte Minimierung

Die im vorangehenden Abschnitt vorgestellte Theorie erweiterter Lagrangeverfahren beruht entscheidend auf der exakten Minimierung (2.4.5a). Diese gestattet es zusammen mit der strikten Konvexität für einen hinreichend großen Strafparameter

ρ durch Anwendung des Satzes der impliziten Funktionen auf das zugehörige KKT-System die Konvergenztheorie zu entwickeln. In [7] findet sich noch die Diskussion asymptotisch exakter Minimierungsverfahren, welche die für den Fall der exakten Minimierung entwickelte Methodik weiter führt. Die in diesem Abschnitt interessierende Fragestellung lautet dagegen, welche Konsequenzen sich ergeben, wenn in dem freien Minimierungsschritt (2.4.5a) des erweiterten Lagrangeverfahrens lediglich eine Abstiegsforderung der Gestalt

$$\ell_{\rho^k}(x^k, \lambda^k) - \ell_{\rho^k}(x^{k+1}, \lambda^k) \geq \varphi(\|\nabla \ell_{\rho^k}(x^k, \lambda^k)\|) \quad (2.4.13)$$

mit einer \mathcal{F} -Funktion φ verlangt wird, wie sie im ersten Kapitel für freie Minimierungsprobleme ausführlich untersucht worden ist. Die Fragestellung ist aus numerischer Sicht interessant, da sich zahlreiche reale Minimierungsverfahren durch eine solche Eigenschaft charakterisieren lassen.

2.4.9 Satz *Das Zielfunktional f sei in \mathbb{R}^n nach unten beschränkt, sowie f und c stetig differenzierbar. Der Abstieg im Lagrangefunktional bei der Berechnung von x^{k+1} im erweiterten Lagrangeverfahren (2.4.5) genüge für jedes $k \in \mathbb{N}_0$ mit einer \mathcal{F} -Funktion φ der Beziehung (2.4.13), während der Lagrangeparameter verfahrensgemäß nach (2.4.5b) aufdatiert wird. Die Strafparameter ρ^k seien durch $0 < \underline{\rho} \leq \rho^k \leq \bar{\rho}$ beschränkt, und es gebe eine positive Konstante $C > 0$, so dass die Restriktion in x^k durch*

$$\|c(x^k)\| \leq \frac{C}{k} \quad (2.4.14)$$

beschränkt ist. Dann bleibt die Folge $\{\langle \lambda^k, c(x^k) \rangle\}$ beschränkt, und es gilt

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \|\nabla \ell_{\rho^k}(x^k, \lambda^k)\| = 0.$$

Dann ist auch jeder Häufungspunkt von $\{(x^k, \lambda^k)\}$ ein KKT-Punkt von (NLO=).

Beweis

Im Beweis wird die Notation

$$\rho^{k+\frac{1}{2}} = \frac{\rho^k + \rho^{k+1}}{2}, \quad \ell^k = \ell_{\rho^k}(x^k, \lambda^k) \quad \hat{\ell}^k = \ell_{\rho^k}(x^{k+1}, \lambda^k) \quad \text{und} \quad \underline{f} = \inf_{x \in \mathbb{R}^n} f(x)$$

verwendet.

Unter den Voraussetzungen ist $\{\ell^k\}$ nach unten beschränkt, wie die Abschätzung von $\ell^k = f(x^k) + \langle \lambda^k, c(x^k) \rangle + \frac{\rho^k}{2} \|c(x^k)\|^2$ mit $\lambda^k = \lambda^0 + \sum_{j=0}^{k-1} \rho^j c(x^{j+1})$ und (2.4.14)

durch

$$\begin{aligned}
 f(x^k) + \langle \lambda^k, c(x^k) \rangle + \frac{\rho^k}{2} \|c(x^k)\|^2 \\
 &= f(x^k) + \left\langle \lambda^0 + \sum_{j=0}^{k-1} \rho^j c(x^{j+1}), c(x^k) \right\rangle + \frac{\rho^k}{2} \|c(x^k)\|^2 \\
 &\geq \underline{f} - \frac{C\|\lambda^0\|}{k} - \frac{C^2\bar{\rho}}{k} \sum_{j=0}^{k-1} \frac{1}{j+1} \\
 &\geq \underline{f} - C\|\lambda^0\| - C^2\bar{\rho} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{(j+1)^2} = \text{const} > -\infty
 \end{aligned}$$

zeigt. Es gilt wegen

$$\ell_{\rho+\sigma}(x, \lambda + \mu) = \ell_{\rho}(x, \lambda) + \langle \mu, c(x) \rangle + \frac{\sigma}{2} \|c(x)\|^2$$

der folgende Zusammenhang zwischen $\hat{\ell}^k$ und ℓ^{k+1} :

$$\begin{aligned}
 \hat{\ell}^k &= \ell_{\rho^k}(x^{k+1}, \lambda^k) = \ell_{\rho^{k+1} + (\rho^k - \rho^{k+1})}(x^{k+1}, \lambda^{k+1} - \rho^k c(x^{k+1})) = \\
 &\ell^{k+1} - \langle \rho^k c(x^{k+1}), c(x^{k+1}) \rangle + \frac{\rho^k - \rho^{k+1}}{2} \|c(x^{k+1})\|^2 = \ell^{k+1} - \rho^{k+\frac{1}{2}} \|c(x^{k+1})\|^2.
 \end{aligned}$$

Dieser lässt sich rekursiv anwenden, was zu

$$\begin{aligned}
 \ell^1 - \ell^{k+1} + \sum_{j=1}^k \rho^{j+\frac{1}{2}} \|c^{j+1}\|^2 &= \sum_{j=1}^k \left(\ell^j - \ell^{j+1} + \rho^{j+\frac{1}{2}} \|c^{j+1}\|^2 \right) \\
 &= \sum_{j=1}^k \left(\ell^j - \hat{\ell}^j \right) \geq \sum_{j=1}^k \varphi(\|\nabla \ell^j\|) \quad (2.4.15)
 \end{aligned}$$

führt. Die linke Seite ist wegen der nach Bedingung (2.4.14) und der angenommenen Beschränktheit der Strafparameter konvergierenden Summe und der gezeigten Beschränktheit von ℓ^{k+1} nach oben begrenzt. Damit konvergiert die Summe auf der rechten Seite. Dies hat wiederum $\lim_{k \rightarrow \infty} \varphi(\|\nabla \ell^k\|) = 0$ zur Folge. Da offenbar $\lim_{k \rightarrow \infty} c(x^k) = 0$ gilt, ist jeder Häufungspunkt von $\{(x^k, \lambda^k)\}$ zulässig und dann auch KKT-Punkt von (NLO=). \square

2.4.10 Bemerkung Die Voraussetzungen in Satz 2.4.9 an $\{\rho^k\}$ und $\{c(x^k)\}$ lassen sich verallgemeinern. Statt der geforderten beidseitigen Beschränktheit von $\{\rho^k\}$ gebe es Konstanten $\gamma \in (0, 1]$ und $\Gamma > 1$, so dass $\gamma\rho^j \leq \rho^k \leq \Gamma\rho^{k-1}$ für $j \leq k$ gilt. Die Bedingung besagt, dass ein einmal erreichtes Niveau des Strafparameters bis auf einen gewissen Prozentsatz nicht mehr unterschritten werden kann. Desweiteren gebe es eine monoton fallende, summierbare Folge $\{a^k\}$ mit $\rho^k \|c(x^{k+1})\|^2 \leq a^k$. Dann gilt

$$\frac{2}{1+\Gamma} \sum_{k=0}^{\infty} \rho^{k+\frac{1}{2}} \|c(x^{k+1})\|^2 \leq \sum_{k=0}^{\infty} \rho^k \|c(x^{k+1})\|^2 \leq \sum_{k=0}^{\infty} a^k < \infty \quad (2.4.16)$$

und

$$\begin{aligned} \|c(x^{k+1})\|^2 \sum_{j=0}^k \rho^j &\leq (k+1) \frac{\rho^k}{\gamma} \|c(x^{k+1})\|^2 \leq \\ &\frac{1}{\gamma} (k+1) a^k \leq \frac{1}{\gamma} \sum_{j=0}^k a^j \leq \frac{1}{\gamma} \sum_{j=0}^{\infty} a^j < \infty, \end{aligned}$$

womit sich

$$\left| \sum_{j=0}^k \langle \rho^j c(x^{j+1}), c(x^{k+1}) \rangle \right| \leq \sqrt{\sum_{j=0}^k \rho^j \|c(x^{j+1})\|^2} \sqrt{\|c(x^{k+1})\|^2 \sum_{j=0}^k \rho^j} \leq \frac{1}{\sqrt{\gamma}} \sum_{j=0}^{\infty} a^j$$

abschätzen lässt. Damit gilt die erste Ungleichung im Beweis von Satz 2.4.9, der sich unter den allgemeineren Voraussetzungen nun analog fortsetzen lässt. \square

Die Lagrangeparameterfolge

$$\lambda^k = \lambda^0 + \sum_{j=0}^{k-1} \rho^j c(x^{j+1})$$

in Satz 2.4.9 ist nicht notwendig beschränkt. Aus den Voraussetzungen kann lediglich die Beschränktheit von $\{\langle \lambda^k, c(x^k) \rangle\}$ gefolgert werden.

Die aus numerischer Sicht sinnvolle Bedingung (2.4.13) an den Abstieg im Lagrangefunktional wird durch die Voraussetzungen (2.4.14) oder (2.4.16) an die Verbesse-

zung der Zulässigkeit getrübt. Dahinter verbirgt sich jedoch die Tatsache, dass der Zulässigkeit eine gegenüber der Optimalität dominierende Rolle zukommt und ein numerisches Verfahren diesem Sachverhalt Rechnung zu tragen hat. Auch in anderen Verfahren der nichtlinearen Optimierung ist es notwendig, vgl. etwa [18, Abschnitt 15.5], das Optimierungsverfahren durch eine *restoration procedure* zu unterbrechen, mit dem Ziel die Zulässigkeit unabhängig von der Optimalität zu verbessern. Beim exakten Lagrangeverfahren des vorangehenden Abschnittes gilt

$$\begin{aligned}\nabla \ell_{\rho^{k+1}}(x^{k+1}, \lambda^{k+1}) &= \nabla \ell_0(x^{k+1}, \lambda^{k+1}) + \rho^{k+1} A(x^{k+1}) c(x^{k+1}) \\ &= \nabla \ell_{\rho^k}(x^{k+1}, \lambda^k) + \rho^{k+1} A(x^{k+1}) c(x^{k+1}) = \rho^{k+1} A(x^{k+1}) c(x^{k+1}).\end{aligned}$$

Der Gradient von $\ell_{\rho^{k+1}}(x, \lambda^{k+1})$ ist an der Stelle x^{k+1} genau der Gradient des Straftermes $\rho^{k+1} \|c(x)\|^2$ an der Stelle x^{k+1} , während die Gradienten der beiden anderen Summanden des erweiterten Lagrangefunktionalen sich gegenseitig aufheben. Dies führt unter der lokalen Konvexitätsannahme dazu, dass die Minimierung sich vor allem auf den Strafterm auswirkt und zur Verbesserung der Zulässigkeit führt. Folgt man der Diskussion in [7, Abschnitt 2.2.5] mit der Annahme, dass die Restriktionsfunktion Lipschitz-stetig mit der Lipschitzkonstanten α ist, so gilt mit dem Mittelwertsatz sowie (2.4.6) und (2.4.7) aus Aussage 2.4.6 einerseits

$$\|c(x^{k+1})\| = \|c(x^{k+1}) - c(x^*)\| \leq \alpha \|x^{k+1} - x^*\| \leq \frac{\alpha L}{\rho^k} \|\lambda^k - \lambda^*\|$$

und andererseits

$$\|c(x^k)\| = \frac{\|\lambda^k - \lambda^{k-1}\|}{\rho^{k-1}} \geq \frac{\|\lambda^{k-1} - \lambda^*\|}{\rho^{k-1}} - \frac{\|\lambda^k - \lambda^*\|}{\rho^{k-1}} \geq \left(\frac{1}{L} - \frac{1}{\rho^{k-1}}\right) \|\lambda^k - \lambda^*\|,$$

was gemeinsam (im Fall $\rho^{k-1} > L$) zu der Abschätzung

$$\|c(x^{k+1})\| \leq \frac{\alpha L}{\rho^k \left(\frac{1}{L} - \frac{1}{\rho^{k-1}}\right)} \|c(x^k)\| \quad (2.4.17)$$

führt. Wendet man die Parameterwahlstrategie für ρ^k des Algorithmus 2.4.8 an, folgt daraus, dass fast immer

$$\|c(x^{k+1})\| \leq \beta \|c(x^k)\|$$

gilt oder dass der Faktor in (2.4.17) kleiner oder gleich β wird, mit β aus Algorithmus 2.4.8. Dann bleibt die Folge $\{\rho^k\}$ beschränkt und die Summen

$$\rho^0 \sum_{k=0}^{\infty} \|c(x^k)\| \leq \sum_{k=0}^{\infty} \rho^k \|c(x^k)\| < \infty \quad \text{und} \quad \rho^0 \sum_{k=0}^{\infty} \|c(x^k)\|^2 \leq \sum_{k=0}^{\infty} \rho^k \|c(x^k)\|^2 < \infty$$

konvergieren. Außerdem ist die Beschränktheit der Lagrangeparameterfolge wegen

$$\|\lambda^k\|^2 \leq \|\lambda^0\|^2 + \sum_{j=1}^{\infty} (\rho^{j-1})^2 \|c(x^j)\|^2 < \infty$$

gewährleistet.

Satz 2.4.9 lässt sich unmittelbar auf die Optimierungsaufgabe

$$x^* = \underset{\substack{c(x)=0 \\ x \in K}}{\operatorname{argmin}} f(x)$$

mit einer abgeschlossenen und konvexen Mengen $K \subseteq \mathbb{R}^n$ und nicht leerem Zulässigkeitsbereich $\{x \in K : c(x) = 0\}$ übertragen, wenn die Abstiegsbedingung 2.4.13 durch

$$\ell_{\rho^k}(x^k, \lambda^k) - \ell_{\rho^k}(x^{k+1}, \lambda^k) \geq \varphi(\|\Pi_{K-x^k} \nabla \ell_{\rho^k}(x^k, \lambda^k)\|)$$

ersetzt wird und die Iterationsfolge $\{x^k\}$ in K liegt. Hierbei ist $\Pi_{K-x^k} : \mathbb{R}^n \rightarrow K$ wieder wie in Abschnitt 2.2 die Projektion auf die abgeschlossene und konvexe Menge $K - x^k \subset \mathbb{R}^n$.

2.4.4 Erweiterte Lagrangeverfahren mit Raumzerlegung

Die im erweiterten Lagrangeverfahren auftretenden unrestringierten Minimierungsverfahren können gemäß dem ersten Kapitel beliebig genau mit Raumzerlegungsverfahren gelöst werden. Es soll jedoch untersucht werden, unter welchen Voraussetzungen ein konvergentes Verfahren entsteht, wenn nur ein Schritt des Raumzerlegungsverfahrens berechnet wird, um dann unmittelbar mit der aus den Teilraumkorrekturen gebildeten globalen Iterierten den Lagrangeparameter aufzudatieren. Diskutiert wird dazu das im folgenden Algorithmus dargestellte parallel ausführbare Verfahren.

2.4.11 Algorithmus (eLgVRz)

wähle eine Raumzerlegung $\{(W_i, P_i, R_i) : i = 1, \dots, p\}$,
 $\beta_i > 0$ ($i = 1, \dots, p$) mit $\sum_{i=1}^p \beta_i = 1$ und $\bar{\gamma} > 0$

wähle $x^0 \in \mathbb{R}^n$, $\lambda^0 \in \mathbb{R}^m$, $\rho^0 > 0$

für $k = 0, 1, \dots$

für $i = 1, \dots, p$

berechne $d_i^k \approx \operatorname{argmin}_{d_i \in W_i} \ell_{\rho^k}(x^k + P_i d_i, \lambda^k)$

setze $x^{i,k} = x^k + P_i d_i^k$

bestimme $\alpha_i^k \geq 0$ und setze $x^{k+1} = x^k + \sum_{i=1}^p \alpha_i^k P_i d_i^k$ mit

$$\ell_{\rho^k}(x^{k+1}, \lambda^k) \leq \sum_{i=1}^p \beta_i \ell_{\rho^k}(x^{i,k}, \lambda^k) \quad (2.4.18)$$

wähle $\gamma^k \in (0, \bar{\gamma}]$ und setze $\lambda^{k+1} = \lambda^k + \gamma^k \rho^k c(x^{k+1})$

wähle $\rho^{k+1} \geq \rho^k$

Neben der Berechnung der primalen Iterierten x^k nach dem Raumzerlegungsverfahren unterscheidet sich der Algorithmus durch die Faktoren $\gamma^k \leq \bar{\gamma}$ auch in einer gegenüber Algorithmus 2.4.8 relaxierten Aufdatierung der dualen Variablen λ^k . In den Anwendungsfällen des letzten Kapitels werden auch im Synchronisationsschritt zur Bildung von x^{k+1} aus den Teilraumkorrekturen d_i^k die Schrittweitenparameter α_i^k und γ^k typischer Weise als Dämpfung, d. h. aus $(0, 1) \subset \mathbb{R}^+$ gewählt, falls keine Modifikation der Strategie des besten Teilraumabstiegs zum Zuge kommt. Die folgende Untersuchung zeigt die lokale Konvergenz des Verfahrens bei exakter Teilraumoptimierung und geeigneter Wahl der Verfahrensparameter.

Das Verfahren mit exakter Teilraumoptimierung

Unter den Annahmen (V1) und (V2) ist die Lagrangefunktion für einen hinreichend großen Strafparameter in einer Umgebung einer lokalen Lösung streng konvex. In

diesem Fall ist die Unterraumkorrektur d_i^k im Algorithmus eindeutig bestimmt. Diese lässt sich dann durch den funktionalen Zusammenhang $d_i^k = \mathcal{D}_\rho^{(i)}(x^k, \lambda^k)$ darstellen, wobei die Abbildung $\mathcal{D}_\rho^{(i)} : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \rightarrow W_i$ eindeutig durch

$$P_i' \nabla \ell_\rho(x + P_i \mathcal{D}_\rho^{(i)}(x, \lambda), \lambda) = 0 \quad (2.4.19)$$

implizit bestimmt ist. Damit kann mit den Operatoren

$$\mathcal{X}_\rho^\alpha(x, \lambda) = x + \sum_{i=1}^p \alpha_i P_i \mathcal{D}_\rho^{(i)}(x, \lambda) \quad (2.4.20a)$$

$(\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_p) \in (\mathbb{R}^+)^p)$ und

$$\mathcal{L}_\rho^{\alpha, \gamma}(x, \lambda) = \lambda + \gamma \rho c(\mathcal{X}_\rho^\alpha(x, \lambda)) \quad (2.4.20b)$$

mit $\gamma > 0$ das Iterationsverfahren durch

$$x^{k+1} = \mathcal{X}_\rho(x^k, \lambda^k) \quad \text{und} \quad \lambda^{k+1} = \mathcal{L}_\rho(x^k, \lambda^k)$$

beschrieben werden. Darüber hinaus wird

$$\mathcal{X}_\rho^{(i)}(x, \lambda) = x + P_i \mathcal{D}_\rho^{(i)}(x, \lambda)$$

zur Darstellung des Verfahrens benötigt. Für den numerisch interessanten Fall von Zerlegungen in Koordinatenräume ist es auch sinnvoll, die aus der Theorie der Mehrfachzerlegungen stammenden diagonalen Wichtungsmatrizen $E_i \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $i = 1, \dots, p$, mit $E_i \geq 0$ und $\sum_{i=1}^p E_i = I_n$ einzuführen und dann

$$\mathcal{X}_\rho^{\alpha, E}(x, \lambda) = x + \sum_{i=1}^p \alpha_i E_i P_i \mathcal{D}_\rho^{(i)}(x, \lambda)$$

als Iterator für die primale Variable zu betrachten. Die Idee besteht darin, die Vektorkomponenten, die mehreren Unterräumen angehören, durch eine Konvexkombination der beitragenden Teilräume aufzudatieren, um eine Übergewichtung gegenüber Komponenten die nur einem Raum angehören zu vermeiden. In diesem Zusammenhang ist dann eine Bedingung $\sum_{i=1}^p E_i P_i R_i = I_n$ bei $R_i = (P_i' P_i)^{-1} P_i'$ angebracht. Wie die Anwendungsfälle in Kapitel 3 zeigen, kann diese Modifikation

numerisch vorteilhaft sein.

Ein wesentlicher struktureller Unterschied, der bei dem Verfahren mit Raumzerlegung gegenüber dem ursprünglichen erweiterten Lagrangeverfahren auftritt, ist, dass die Iterierte x^{k+1} nicht mehr nur von λ^k sondern auch von x^k explizit abhängt. Mit der Variablen $q = (x, \lambda)$ und dem Iterationsoperator

$$q \mapsto \mathcal{Q}_\rho^{\alpha, \gamma}(q) = (\mathcal{X}_\rho^\alpha(q), \mathcal{L}_\rho^{\alpha, \gamma}(q))$$

lässt sich das Verfahren durch die Iteration

$$q^{k+1} = \mathcal{Q}_\rho^{\alpha, \gamma}(q^k)$$

darstellen, wenn von festen Schrittweiten α und γ ausgegangen wird. Die Vorbereitungen für eine lokale Konvergenzuntersuchung des Verfahrens in dieser Form geschehen in Hinblick auf den bekannten Konvergenzsatz für Fixpunktiterationen, [72, theorem 10.1.3].

2.4.12 Aussage (Ostrowski) Die Abbildung $\phi : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ sei differenzierbar und besitze den Fixpunkt $x^* \in \mathbb{R}^n$, $\phi(x^*) = x^*$. Gilt dann $\text{sprd}(\partial\phi(x^*)) < 1$, so gibt es eine positive Konstante ε , derart dass die Iteration $x^{k+1} = \phi(x^k)$ für jeden Startwert x^0 mit $\|x^0 - x^*\| \leq \varepsilon$ gegen x^* konvergiert.

Der eingeschlagene Weg vernachlässigt die Abstiegsbedingung (2.4.18) und befasst sich letztlich mit einem Iterationsverfahren zur Lösung des nichtlinearen Sattelpunktproblems der KKT-Bedingungen (2.4.1), wie es in der in Abschnitt 2.4.2 vorgestellte Theorie zum erweiterten Lagrangeverfahren mit exakter Minimierung ohne Raumzerlegung ebenfalls geschieht.

Um Satz 2.4.12 anwenden zu können, ist die Berechnung der Jacobimatrix von $\mathcal{Q}_\rho^{\alpha, \gamma}$ in einem Fixpunkt $q^* = (x^*, \lambda^*)$

$$\partial \mathcal{Q}_\rho^{\alpha, \gamma}(q^*) = \begin{bmatrix} \partial_x \mathcal{X}_\rho^\alpha(x^*, \lambda^*) & \partial_\lambda \mathcal{X}_\rho^\alpha(x^*, \lambda^*) \\ \partial_x \mathcal{L}_\rho^{\alpha, \gamma}(x^*, \lambda^*) & \partial_\lambda \mathcal{L}_\rho^{\alpha, \gamma}(x^*, \lambda^*) \end{bmatrix} \quad (2.4.21)$$

notwendig.

2.4.13 Lemma Sei $q^* = (x^*, \lambda^*)$ lokale Lösung von (NLO=), in der die Voraus-

setzungen (V1) und (V2) gelten. Es sei weiterhin $\underline{\rho}$ wie in Aussage 2.4.4, und es gelte $\rho \geq \underline{\rho}$. Dann sind für eine gegebene Raumzerlegung die Abbildungen $\mathcal{D}_\rho^{(i)}$ für $i = 1, \dots, p$ in einer Umgebung U von q^* durch (2.4.19) eindeutig bestimmt und es gelten die nachstehenden Darstellungen der Ableitungsoperatoren.

$$\begin{aligned}\partial_x \mathcal{D}_\rho^{(i)}(x^*, \lambda^*) &= - \left(P_i' \nabla^2 \ell_\rho(x^*, \lambda^*) P_i \right)^{-1} P_i' \nabla^2 \ell_\rho(x^*, \lambda^*) \\ \partial_\lambda \mathcal{D}_\rho^{(i)}(x^*, \lambda^*) &= - \left(P_i' \nabla^2 \ell_\rho(x^*, \lambda^*) P_i \right)^{-1} P_i' \nabla c(x^*, \lambda^*) \\ \partial_x \mathcal{X}_\rho^\alpha(x^*, \lambda^*) &= I_n + \sum_{i=1}^p \alpha_i P_i \partial_x \mathcal{D}_\rho^{(i)}(x^*, \lambda^*) \\ \partial_\lambda \mathcal{X}_\rho^\alpha(x^*, \lambda^*) &= \sum_{i=1}^p \alpha_i P_i \partial_\lambda \mathcal{D}_\rho^{(i)}(x^*, \lambda^*) \\ \partial_x \mathcal{L}_\rho^{\alpha, \gamma}(x^*, \lambda^*) &= \gamma \rho (\nabla c(x^*))' \partial_x \mathcal{X}_\rho^\alpha(x^*, \lambda^*) \\ \partial_\lambda \mathcal{L}_\rho^{\alpha, \gamma}(x^*, \lambda^*) &= I_m + \gamma \rho \nabla c(x^*)' \partial_\lambda \mathcal{X}_\rho^\alpha(x^*, \lambda^*)\end{aligned}$$

Außerdem ist q^* einziger Fixpunkt von $\mathcal{Q}_\rho^{\alpha, \gamma}$ in U .

Beweis

Es gibt eine offene Umgebung U von q^* , in der das Lagrangefunktional $(x, \lambda) \mapsto \ell_\rho(x, \lambda)$ strikt konvex ist. Dann sind auch die Abbildungen $d \mapsto \ell_\rho(x + P_i d, \lambda)$ strikt konvex. Die Darstellung der Ableitungen von $\mathcal{D}_\rho^{(i)}(q^*)$ ist mit $\mathcal{D}_\rho^{(i)}(q^*) = 0$ eine direkte Folge des Satzes A.3.2. der impliziten Funktionen. Die Matrizen $P_i' \nabla^2 \ell_\rho(x^*, \lambda^*) P_i$ sind wegen Aussage 1.4.6 positiv definit und damit invertierbar.

Wegen $\mathcal{D}_\rho^{(i)}(q^*) = 0$ und $c(x^*) = 0$ ist q^* Fixpunkt. Gilt umgekehrt für $\bar{q} \in U$ jedoch $\mathcal{D}_\rho^{(i)}(\bar{q}) = 0$, so folgt

$$P_i' \nabla \ell_\rho(\bar{q}) = 0 \quad \text{für } i = 1, \dots, p,$$

und damit $\nabla \ell_\rho(\bar{q}) = 0$. Wegen der strikten Konvexität von ℓ_ρ in U ist dann aber $\bar{q} = q^*$. \square

Mit den Bezeichnungen

$$\begin{aligned}H &= \nabla^2 \ell_\rho(x^*, \lambda^*) & A &= \nabla c(x^*) \\ H^{-P_i} &= P_i \left(P_i' H P_i \right)^{-1} P_i' & H^\sharp &= \sum_{i=1}^p \alpha_i H^{-P_i}\end{aligned}$$

wird die Darstellung von $\partial \mathcal{Q}_\rho^{\alpha, \gamma}(q^*)$ vereinfacht. Es sei darauf hingewiesen, dass H und damit auch H^\sharp abhängig von ρ ist, worauf ggf. durch die Indizierung H_ρ aufmerksam gemacht wird. Nach Satz 2.4.12 genügt es nun zu zeigen, dass der Spektralradius der Jacobimatrix des Iterationsoperators im Fixpunkt

$$Q = \partial \mathcal{Q}_\rho^{\alpha, \gamma}(q^*) = \begin{bmatrix} I_n - H^\sharp H & -H^\sharp A \\ \gamma \rho A' (I - H^\sharp H) & I_m - \gamma \rho A' H^\sharp A \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Q_{11} & Q_{12} \\ Q_{21} & Q_{22} \end{bmatrix}$$

kleiner als eins ist.

2.4.14 Lemma Für eine Raumzerlegung $\{(W_i, P_i, R_i) : i = 1, \dots, p\}$ von \mathbb{R}^n und unter den Voraussetzungen (V1) und (V2) sowie $\rho \geq \underline{\rho}$, $\alpha_i > 0$ und $\gamma > 0$ gelten die folgenden Aussagen.

- (i) H^\sharp ist positiv definit.
- (ii) Es gilt $(s - 1)\lambda_s = s\rho A' x_s$, falls $(x_s, \lambda_s) \in \text{kern}(Q - sI)$, für jedes $s \in \mathbb{C}$.
- (iii) Es gilt $1 \notin \text{spek}(Q)$.
- (iv) Es gelte

$$\text{sprd}(I_n - H^\sharp H) < 1 \tag{2.4.23}$$

und

$$\text{spek}(M_\rho^\gamma(s)) \subset \mathcal{K}_1 := \{z \in \mathbb{C} : |1 - z| < 1\} \tag{2.4.24}$$

für jedes

$$s \in \mathcal{S} := \{z \in \mathbb{C} : |z| \geq 1\},$$

wobei die Matrix $M_\rho^\gamma(s) \in \mathbb{R}^{m \times m}$ durch

$$M_\rho^\gamma(s) := \gamma \rho A' \left(\frac{s-1}{s} (H_\rho^\sharp)^{-1} + \frac{1}{s} H_\rho \right)^{-1} A$$

gegeben ist. Dann gilt $\text{sprd}(Q) < 1$.

Beweis

Da H unter den Voraussetzungen positiv definit ist, gilt (i) nach Behauptung (ii)

in Aussage 1.4.6 auch für H^\sharp .

Für $q_s = (x_s, \lambda_s)$, $s \in \mathbb{C}$, gelte $(Q - sI)q_s = 0$, d. h. q_s ist Eigenvektor von Q zum Eigenwert s , falls $q_s \neq 0$. Setzt man die Identitäten $Q_{21} = \rho A Q_{11}$, $(Q_{11} - s)x_s = -Q_{12}\lambda_s$ und $Q_{22} = I_m + \gamma \rho A' Q_{12}$ in $0 = Q_{21}x_s + (Q_{22} - s)\lambda_s$ ein, erhält man aus

$$\begin{aligned} 0 &= \rho A' Q_{11} x_s + (1 - s)\lambda_s + \gamma \rho A' Q_{12} \lambda_2 \\ &= \rho A' Q_{11} x_s + (1 - s)\lambda_s - \rho A' (Q_{11} - s)x_s = s \rho A' x_s + (1 - s)\lambda_s \end{aligned}$$

die zweite Behauptung $(s - 1)\lambda_s = s \rho A' x_s$.

Für $s = 1$ folgt aus der soeben bewiesenen Aussage (ii), dass $A' x_1 = 0$ gilt. Aus

$$0 = (Q_{11} - I)x_1 + Q_{12}\lambda_1 = -H^\sharp H x_1 - H^\sharp A \lambda_1 \quad (2.4.25)$$

folgt $0 = A' x_1 = -A' H^{-1} A \lambda_1$ und damit $\lambda_1 = 0$, da $A' H^{-1} A$ unter den Voraussetzungen regulär ist. Mit Aussage (i) ist $H^\sharp H$ regulär, so dass aus (2.4.25) schließlich $x_1 = 0$ folgt. Dies bedeutet $\ker(Q - I) = 0$ und $1 \notin \text{spek}(Q)$.

Die blockweise LU-Zerlegung von $Q - sI$ bei $s \notin \text{spek}(Q_{11})$ führt zu

$$\begin{bmatrix} Q_{11} - sI_n & Q_{12} \\ Q_{21} & Q_{22} - sI_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I_n & 0 \\ Q_{21}(Q_{11} - sI_n)^{-1} & I_m \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Q_{11} - sI_n & Q_{12} \\ 0 & \tilde{Q}_{22}(s) \end{bmatrix}$$

mit

$$\begin{aligned} \tilde{Q}_{22}(s) &= (Q_{22} - sI_m) - Q_{21}(Q_{11} - sI_n)^{-1} Q_{12} \\ &= (1 - s)I_m - \gamma \rho A' H^\sharp A + \gamma \rho A' (I - H^\sharp H)((1 - s)I_n - H^\sharp H)^{-1} H^\sharp A \\ &= (1 - s)I_m - \gamma \rho A' H^\sharp A + \gamma \rho A' (I + s((1 - s)I_n - H^\sharp H)^{-1}) H^\sharp A \\ &= (1 - s)I_m - \gamma \rho A' \left(I_m - \frac{1}{s}(I_m - H^\sharp H) \right)^{-1} H^\sharp A \\ &= (1 - s)I_m - M_\rho^\gamma(s) \end{aligned}$$

Für $s \in \mathcal{S}$ gilt $s \notin \text{spek}(Q_{11})$, da $\text{sprd}(Q_{11}) < 1$ vorausgesetzt ist. Da in diesem Fall auch $\text{sprd}\left(\frac{1}{s}(I_m - H^\sharp H)\right) < 1$ erfüllt ist, existiert die Inverse von

$$\left(\frac{s-1}{s} (H^\sharp)^{-1} + \frac{1}{s} H \right) = (H^\sharp)^{-1} \left(I_n - \frac{1}{s}(I_n - H^\sharp H) \right)$$

mit

$$\left(\frac{s-1}{s} (H^\sharp)^{-1} + \frac{1}{s} H \right)^{-1} = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{s^j} (I_m - H^\sharp H)^j H^\sharp,$$

womit $M_\rho^\gamma(s)$ wohldefiniert ist. Wegen (2.4.24) lässt sich jeder Eigenwert ω von $M_\rho^\gamma(s)$ in der Form $\omega = 1 + \mu$ mit einem $|\mu| < 1$ darstellen. Dann ist $-(s-1+\omega) = -(s+\mu)$ Eigenwert von $\tilde{Q}_{22}(s)$. Es gilt jedoch $s+\mu \neq 0$, falls $|s| \geq 1$ erfüllt ist. Damit ist $\tilde{Q}_{22}(s)$ regulär, woraus aus der obigen LU-Zerlegung die Regularität von $Q - sI$ folgt. Dies bedeutet $s \notin \text{spek}(Q)$ für alle s mit $|s| \geq 1$ und damit $\text{sprd}(Q) < 1$. \square

2.4.15 Bemerkung 1. In den Aussagen (ii) bis (iv) des vorangehenden Lemmas ist es nicht wesentlich, dass H^\sharp positiv definit ist, soweit nur die Regularität gegeben ist. In den Anwendungsfällen des letzten Kapitels treten Modifikationen des Verfahrens auf, die die Positiv-Definitheit von H^\sharp nicht mehr garantieren. Im Folgenden kann auf diese Eigenschaft jedoch nicht ohne Weiteres verzichtet werden.

2. Die Bedingung in (2.4.24) an das Spektrum von $M_\rho^\gamma(s)$ stellt in gewisser Weise eine Verallgemeinerung der Konvergenzbedingung (2.4.10) für das Verfahren ohne Raumzerlegung dar. Denn wendet man diese Spektralbedingung für die triviale Zerlegung mit $p = 1$, $V = V_1 = W_1$ und $P_1 = R_1 = I_n$ sowie den Verfahrensparametern $\alpha_1 = 1$ und $\gamma = 1$ an, so erhält man die Standardvariante des erweiterten Lagrangeverfahrens und es ist $H^\sharp = H^{-1}$ und $M_\rho^1(s) = \rho A' H^{-1} A = \rho (\nabla^2 p(0) + \rho I_m)^{-1}$. Damit übersetzt sich (2.4.24) in die Bedingung

$$\left| 1 - \frac{\rho}{\omega + \rho} \right| < 1 \quad \forall \omega \in \text{spek}(\nabla^2 p(0))$$

an das Spektrum der Hessematrix der Primalfunktion. Dies bedeutet aber genau

$$\rho > \max \{ -2\omega : \omega \in \text{spek}(\nabla^2 p(0)) \},$$

was der Konvergenzbedingung (2.4.10) entspricht.

\square

Entscheidend für das Konvergenzverhalten des Verfahrens sind nach Lemma 2.4.14 die Bedingungen (2.4.23) sowie, wie noch zu erläutern ist,

$$\operatorname{spek}(M_\rho^1(s)) \subset \mathbb{C}^+ := \{z \in \mathbb{C} : \Re(z) > 0\} \quad \text{für } s \in \mathcal{S} \quad (2.4.26)$$

an die Raumzerlegung, wobei $\Re(z)$ der Realteil von z und \mathbb{C}^+ die positive komplexe Halbebene ist.

Die Bildung von H^\sharp für $\alpha_i = 1$ hat mit

$$H^\sharp = \sum_{i=1}^p P_i \left(P_i' H P_i \right)^{-1} P_i'$$

eine ähnliche Struktur wie die eines Vorkonditionierers, der durch die Anwendung eines additiven Schwarz–Gebietszerlegungsverfahrens für elliptische Differentialgleichungen entsteht, [45, Abschnitt 11], [85, Abschnitt 13.3.3]. Allerdings ist die dort durch eine Gebietszerlegung induzierte Raumzerlegung eingeschränkter als die hier verwendete „allgemeine“ Raumzerlegung; damit ist die Diskussion der Dämpfung α_i in [45] zur Erfüllung der Bedingung (2.4.23) für den allgemeinen Fall nicht direkt übertragbar, jedoch relevant für die Anwendungen in Kapitel 3. Allerdings ist in

$$H^{\frac{1}{2}}(I - H^\sharp H)H^{-\frac{1}{2}} = I - H^{\frac{1}{2}}H^\sharp H^{\frac{1}{2}}$$

der Summand $H^{\frac{1}{2}}H^\sharp H^{\frac{1}{2}}$ positiv definit für $\alpha_i > 0$, so dass

$$I - H^{\frac{1}{2}}H^\sharp H^{\frac{1}{2}} \prec I$$

folgt. Für hinreichend kleine α_i gilt auch $H^{\frac{1}{2}}H^\sharp H^{\frac{1}{2}} \prec I$. Daraus ergibt sich

$$\operatorname{sprd}(I - H^\sharp H) = \operatorname{sprd}(I - H^{\frac{1}{2}}H^\sharp H^{\frac{1}{2}}) < 1.$$

Damit ist die Bedingung (2.4.23) immer erfüllbar.

Zur Diskussion von (2.4.26) sei das Mengensystem ineinander geschachtelter Kreise $\{\mathcal{K}_R : R > 0\}$ durch

$$\mathcal{K}_R := \{z \in \mathbb{C} : |R - z| < R\}$$

definiert, Abbildung 2.4.1. Offenbar gilt $\mathcal{K}_r \subseteq \mathcal{K}_R = R\mathcal{K}_1$ für $r \leq R$. Die positive

komplexe Halbebene lässt sich gemäß

$$\mathbb{C}^+ = \bigcup_{R>0} \mathcal{K}_R$$

darstellen; denn $z \in \mathbb{C}^+$ liegt in \mathcal{K}_R , falls

$$R > \frac{|z|^2}{2\Re(z)} \quad (2.4.27)$$

gilt. Erfüllt dann $M_\rho^1(\cdot)$ die Eigenschaft (2.4.26), so gibt es für jedes $s \in \mathcal{S}$ ein

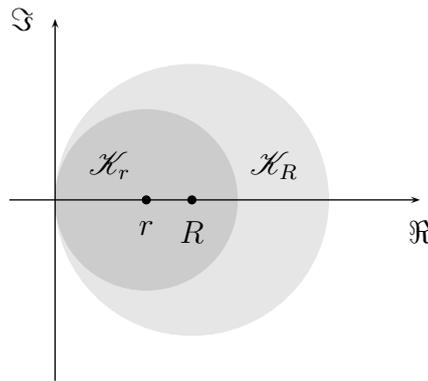


Abbildung 2.4.1: $\mathcal{K}_r \subset \mathcal{K}_R$ für $0 < r < R$

$R_s > 0$ mit $\text{spek}(M_\rho^1(s)) \subset \mathcal{K}_{R_s}$. Tatsächlich kann R_s für jedes $s \in \mathcal{S}$ gleich gewählt werden, wie nun gezeigt wird.

Es ist $\lim_{|s| \rightarrow \infty} M_\rho^1(s) = \rho A' H_\rho^\sharp A$. Damit ist sowohl die Abbildung

$$z \mapsto \sigma_1(z) = \begin{cases} \text{sprd}(M_\rho^1(\frac{1}{z})), & \text{falls } z \neq 0 \\ \text{sprd}(\rho A' H_\rho^\sharp A), & \text{falls } z = 0 \end{cases}$$

als auch

$$z \mapsto \sigma_2(z) = \begin{cases} \min\{\Re(\zeta) : \zeta \in \text{spek}(M_\rho^1(\frac{1}{z}))\}, & \text{falls } z \neq 0 \\ \min\{\Re(\zeta) : \zeta \in \text{spek}(\rho A' H_\rho^\sharp A)\}, & \text{falls } z = 0 \end{cases}$$

stetig auf dem Einheitskreis

$$\mathcal{E}_1 := \{z \in \mathbb{C} : |z| \leq 1\},$$

da „die Eigenwerte stetig von der Matrix abhängen“¹. Damit nehmen sie auf diesem Kompaktum die Extremalwerte

$$R_{max} = \max\{\sigma_1(z) : z \in \mathcal{E}_1\} < \infty \quad \text{bzw.} \quad \Re_{min} = \min\{\sigma_2(z) : z \in \mathcal{E}_1\}$$

an. Wegen (2.4.26) und $\text{spek}(\rho A' H^\sharp A) \subset \mathbb{C}^+$ ist $\Re_{min} > 0$. Mit (2.4.27) gibt es dann ein $R \in \mathbb{R}^+$, so dass

$$\text{spek}(M_\rho^1(s)) \subset \mathcal{K}_R \quad \forall s \in \mathcal{S}$$

gilt. Damit wird durch $\gamma \in (0, \frac{1}{R}]$ die Bedingung (2.4.24) an $M_\rho^\gamma(\cdot)$ erfüllt, da der Zusammenhang $M_\rho^\gamma(s) = \gamma M_\rho^1(s)$ gegeben ist. Das folgende Lemma fasst diese Diskussion zusammen.

2.4.16 Lemma *Es gelten die Voraussetzungen des Lemmas 2.4.14, und $M_\rho^1(\cdot)$ genüge (2.4.26). Dann gibt es ein $\bar{\gamma} > 0$, so dass*

$$\text{spek}(M_\rho^\gamma(s)) \subset \mathcal{K}_1$$

für $\gamma \in (0, \bar{\gamma}]$ gilt.

Die Bedingung (2.4.26) an $M_\rho^\gamma(\cdot)$ scheint für eine konkrete Situation zunächst kaum überprüfbar zu sein. Die Matrix $M_\rho^\gamma(s)$ ist für $s \notin \mathbb{R}$ nicht einmal notwendig normal. Tatsächlich liegt jedoch genügend Struktur vor, um mit Hilfe des Begriffs des Wertebereichs von Matrizen zeigen zu können, dass (2.4.26) erfüllt ist, falls nur (2.4.23) gegeben ist. Die nächste Aussage liefert dafür die notwendige Beweistechnik und beruht teilweise auf [22]. Hier bezeichnet B^* die transponierte und elementweise konjugierte Matrix einer komplexen Matrix B . Ihr Wertebereich $\mathcal{W}(B)$, *numerical range* oder *field of values*, und ihr „Winkelbereich“ $\tilde{\mathcal{W}}(B)$, *angular field*, im

¹Diese Aussage aus der „Folklore“ der numerischen linearen Algebra wird für den allgemeinen Fall meist mit dem Verweis auf die stetige Abhängigkeit der Nullstellen komplexer Polynome von deren Koeffizienten behauptet, [56, 48]. Die letzte Aussage lässt sich mit Hilfe des Satzes von Rouché, [83, S. 225], aus dem Umfeld des Residuensatzes der Funktionentheorie herleiten. Mit erheblich größerem Aufwand erhält man im Rahmen der Störungstheorie, etwa [84, Abschnitt III.1], stärkere Aussagen als die bloße Stetigkeit.

quadratischen Fall $B \in \mathbb{C}^{n \times n}$ ist durch

$$\mathcal{W}(B) := \{v^* B v : v \in \mathbb{C}^n, \|v\| = 1\} \subseteq \tilde{\mathcal{W}}(B) := \{v^* B v : v \in \mathbb{C}^n, v \neq 0\}$$

gegeben. Es gilt offenbar

$$\text{spek}(B) \subseteq \mathcal{W}(B)$$

für beliebige quadratische Matrizen.

2.4.17 Aussage Sei $B \in \mathbb{C}^{n \times n}$ hermitesch, $B = B^*$, mit $\text{sprd}(B) = \|B\| < 1$. Weiterhin besitze die Matrix $D \in \mathbb{C}^{n \times m}$, $m \leq n$, Vollrang. Dann gilt für jedes $z \in \mathcal{E}_1$ die Inklusion

$$\text{spek}(D^*(I - zB)^{-1}D) \subseteq \mathcal{W}(D^*(I - zB)^{-1}D) \subset \mathbb{C}^+. \quad (2.4.28)$$

Es gibt sogar ein $R > 0$ mit

$$\mathcal{W}(D^*(I - zB)^{-1}D) \subseteq \mathcal{K}_R \quad (2.4.29)$$

für jedes $z \in \mathcal{E}_1$.

Beweis

Es genügt zum Beweis der ersten Behauptung zu zeigen, dass $\tilde{\mathcal{W}}(I - zB)$ in \mathbb{C}^+ liegt. Denn dann gilt dies ebenso für $(I - zB)^* = (I - z^*B)$ und damit auch für $(I - zB)^{-1}$ und schließlich $D^*(I - zB)^{-1}D$, woraus dann die Behauptung folgt.

Für $v \in \mathbb{C}^n \setminus \{0\}$ gilt unter den Voraussetzungen $|v^* B v| < v^* v$ mit der Folge

$$\Re(v^*(I - zB)v) \geq v^* v - |z| |v^* B v| > 0 \quad \forall z \in \mathcal{E}_1.$$

Also liegt der Wertebereich von $I - zB$ tatsächlich in \mathbb{C}^+ .

Mit der Aussage A.3.4 sind die Funktionen

$$\omega_1(z) := \max\{|v^* D^*(I - zB)^{-1} D v| : \|v\| = 1\}$$

und

$$\omega_2(z) := \min\{\Re(v^*D^*(I - zB)^{-1}Dv) : \|v\| = 1\} > 0$$

stetig auf \mathcal{E}_1 . Nun folgt wegen $\min_{z \in \mathcal{E}_1} \omega_2(z) > 0$ nach (2.4.27) die Existenz von $R \in \mathbb{R}^+$ mit der geforderten Eigenschaft. \square

Damit lässt sich die wesentliche Aussage der hier entwickelten Konvergenztheorie formulieren.

2.4.18 Satz *Es gelten die Voraussetzungen des Lemmas 2.4.14. Weiterhin sei*

$$\text{sprd}(I_n - H^\sharp H) < 1.$$

Dann gibt es ein $\bar{\gamma} > 0$, so dass

$$\text{sprd}(\partial Q_\rho^{\alpha, \gamma}(x^*, \lambda^*)) < 1$$

für $\gamma \in (0, \bar{\gamma}]$ gilt.

Beweis

Wegen der Lemmata 2.4.14, Aussage (iv), und 2.4.16 ist nur die Gültigkeit der Bedingung (2.4.26) an $M_\rho^1(\cdot)$ unter den gegebenen Voraussetzungen zu verifizieren. Wendet man Aussage 2.4.17 auf $M_\rho^1(s) = D^*(I - \frac{1}{s}B)^{-1}D$ mit

$$B = I_n - (H^\sharp)^{\frac{1}{2}}H(H^\sharp)^{\frac{1}{2}} \quad \text{und} \quad D = (\rho H^\sharp)^{\frac{1}{2}}A$$

an, ist (2.4.26) in der Tat erfüllt. \square

2.4.19 Bemerkung Der Satz beinhaltet für das Verfahren ohne Raumzerlegung die Aussage, dass das Verfahren für $\rho \geq \underline{\rho}$ bei einer mit γ gedämpften Aufdatierung des Lagrangeparameters konvergieren kann, während nach Aussage 2.4.7 und der vorangehenden Diskussion für $\gamma = 1$ die Konvergenzbedingung $\rho \geq \hat{\rho}$ lautet. \square

Zur Realisierungen des Verfahrens sind für $\bar{\gamma}$ Abschätzungen von unten oder Heu-

ristiken für solche wünschenswert. Dazu sollen die folgenden Überlegungen einen ersten Beitrag leisten.

Die Bedingung $\text{spek}(M_\rho^\gamma(s)) \subset \mathcal{K}_1$ ist gleichbedeutend mit

$$\text{spek}(I_m - M_\rho^\gamma(s)) \subset \overset{\circ}{\mathcal{E}}_1 \quad \forall s \in \mathcal{S},$$

wobei $\overset{\circ}{\mathcal{E}}_1 = \{z \in \mathbb{C} : |z| < 1\}$ das Innere des Einheitskreises bezeichnet. Hinreichend für die Bedingung ist, dass der Wertebereich von $I_m - M_\rho^\gamma(s)$ für $s \in \mathcal{S}$ in $\overset{\circ}{\mathcal{E}}_1$ liegt,

$$\mathcal{W}(I_m - M_\rho^\gamma(s)) \subset \overset{\circ}{\mathcal{E}}_1 \quad \forall s \in \mathcal{S},$$

was wegen des zweiten Teils der Aussage 2.4.17 stets erfüllbar ist. Dies bedeutet wiederum

$$|1 - v^* M_\rho^\gamma(s) v| < 1 \quad (2.4.30)$$

für $v \in \mathbb{C}^m$ mit $\|v\| = 1$. Nun sei $\{w_i : i = 1, \dots, n\}$ eine orthonormale Basis des \mathbb{C}^n aus Eigenvektoren von $I_n - (H^\#)^{\frac{1}{2}} H (H^\#)^{\frac{1}{2}}$ zum Spektrum

$$\text{spek}(I_n - (H^\#)^{\frac{1}{2}} H (H^\#)^{\frac{1}{2}}) = \{\omega_i : i = 1, \dots, n\} \subset (-1, 1) \subset \mathbb{R},$$

bezüglich welcher sich der Vektor $((\rho H^\#)^{\frac{1}{2}} A)v \in \mathbb{C}^n$ in der Gestalt

$$((\rho H^\#)^{\frac{1}{2}} A)v = \sum_{i=1}^n \nu_i(v) w_i$$

mit eindeutig bestimmten Koeffizienten $\nu_i(v) \in \mathbb{C}$ darstellen lässt. Damit ergibt sich

$$\begin{aligned} v^* M_\rho^\gamma(s) v &= \gamma v^* A' (\rho H^\#)^{\frac{1}{2}} \left(I_n - \frac{1}{s} (I_n - (H^\#)^{\frac{1}{2}} H (H^\#)^{\frac{1}{2}}) \right)^{-1} (\rho H^\#)^{\frac{1}{2}} A v \\ &= \gamma \sum_{i=1}^n \nu_i(v)^* w_i^* \left[\sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{s^j} (I_n - (H^\#)^{\frac{1}{2}} H (H^\#)^{\frac{1}{2}})^j \right] \sum_{l=1}^n \nu_l(v) w_l \\ &= \gamma \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{i=1}^n \sum_{l=1}^n \nu_i(v)^* \nu_l(v) \frac{\omega_l^j}{s^j} w_i^* w_l = \gamma \sum_{i=1}^n |\nu_i(v)|^2 \frac{s}{s - \omega_i} \end{aligned}$$

mit

$$\sum_{i=1}^n |\nu_i(v)|^2 \leq \|\rho A' H^\# A\| \quad \text{für } \|v\| = 1.$$

Um mit dem entstandenen Ausdruck arbeiten zu können, werden die nächsten beiden Aussagen formuliert.

2.4.20 Aussage Seien $z_i \in \mathbb{C}$, $i=1, \dots, n$. Dann ist

$$\left| 1 - \sum_{i=1}^n z_i \right| < 1 \quad (2.4.31)$$

äquivalent zu

$$\sum_{i=1}^n \Re(z_i) > \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n z_i z_j^*.$$

Hinreichend für (2.4.31) ist

$$(i) \quad \Re(z_i) > \frac{n}{2} |z_i|^2 \quad \text{für } i = 1, \dots, n$$

oder

$$(ii) \quad \Re(z_i) > \frac{1}{2} \Re\left(\sum_{j=1}^n z_i z_j^*\right) \quad \text{für } i = 1, \dots, n.$$

Beweis

Die behauptete Äquivalenz folgt aus der Äquivalenz von (2.4.31) mit

$$\left(1 - \sum_{i=1}^n z_i\right) \left(1 - \sum_{i=1}^n z_i^*\right) = \left|1 - \sum_{i=1}^n z_i\right|^2 < 1.$$

Damit ergibt sich (i) aus der Abschätzung

$$\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n z_i z_j^* \leq n \sum_{i=1}^n |z_i|^2$$

und (ii) ist wegen

$$\sum_{i=1}^n \Re\left(\sum_{j=1}^n z_i z_j^*\right) = \Re\left(\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n z_i z_j^*\right) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \Re(z_i z_j^*)$$

offensichtlich. □

2.4.21 Aussage Sei $\omega \in (-1, 1) \subset \mathbb{R}$, $\omega \neq 0$. Dann gelten die folgenden Aussagen über den Ausdruck $\frac{s}{s-\omega}$.

- (i) $\Re\left(\frac{s}{s-\omega}\right) = \frac{|s|^2 - \omega \Re(s)}{|s-\omega|^2} > 0$ für $s \in \mathcal{S}$
- (ii) $\Im\left(\frac{s}{s-\omega}\right) = \frac{-\omega \Im(s)}{|s-\omega|^2}$
- (iii) $\max_{s \in \mathcal{S}} \left| \frac{s}{s-\omega} \right| = \frac{1}{1-|\omega|}$, $\operatorname{argmax}_{s \in \mathcal{S}} \left| \frac{s}{s-\omega} \right| = \frac{\omega}{|\omega|}$
- (iv) $\max_{s \in \mathcal{S}} \left| \Re\left(\frac{s}{s-\omega}\right) \right| = \frac{1}{1-|\omega|}$, $\operatorname{argmax}_{s \in \mathcal{S}} \left| \Re\left(\frac{s}{s-\omega}\right) \right| = \frac{\omega}{|\omega|}$
- (v) $\max_{s \in \mathcal{S}} \left| \Im\left(\frac{s}{s-\omega}\right) \right| = \frac{\frac{1}{2}|\omega|}{1-|\omega|}$, für $s^* = \operatorname{argmax}_{s \in \mathcal{S}} \left| \Im\left(\frac{s}{s-\omega}\right) \right|$ gilt $\Re(s^*) = \frac{\omega}{|\omega|}$ und $|\Im(s^*)| = 1 - |\omega|$
- (vi) $\min_{s \in \mathcal{S}} \frac{|s| - |\omega|}{|s-\omega|} = \frac{1-|\omega|}{1+|\omega|}$

Bis auf die Aussagen über Maximumstellen gelten alle Aussagen auch für $\omega = 0$.

Beweis

Offensichtlich sind (i) und (ii). Die Aussagen (iv) und (v) werden nicht weiter benötigt und nicht bewiesen.

Zum Beweis von (iii) lässt sich für $r \geq 1$ zunächst

$$\operatorname{argmin}_{|s|=r} |s - \omega| = \frac{\omega}{|\omega|} r \quad \text{mit} \quad \min_{|s|=r} |s - \omega| = r - |\omega|$$

feststellen, Abbildung 2.4.2. Daraus folgt unmittelbar

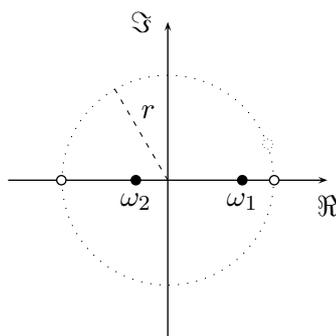


Abbildung 2.4.2: $\operatorname{argmin}_{|s|=r} |s - \omega| = \frac{\omega}{|\omega|} r$ für $\omega \neq 0$

$$\max_{|s|=r} \left| \frac{s}{s-\omega} \right| = \frac{r}{r-|\omega|} = \frac{1}{1-\frac{|\omega|}{r}} \leq \frac{1}{1-|\omega|} = \max_{|s|=1} \left| \frac{s}{s-\omega} \right|,$$

woraus sich wegen $\mathcal{S} = \bigcup_{r \geq 1} \{z \in \mathbb{C} : |z| = r\}$ die Behauptung ergibt.

Zum Beweis von (vi) gilt mit der gleichen Beweisidee für $r \geq 1$

$$\min_{|s|=r} \frac{|s| - |\omega|}{|s - \omega|} = \frac{r - |\omega|}{r + |\omega|} = \frac{1 - \frac{|\omega|}{r}}{1 + \frac{|\omega|}{r}} \geq \frac{1 - |\omega|}{1 + |\omega|} = \min_{|s|=1} \frac{|s| - |\omega|}{|s - \omega|},$$

woraus in analoger Weise die Behauptung folgt. \square

Der Punkt (i) der Aussage 2.4.20 führt mit $z_i = \gamma |\nu_i(v)|^2 \frac{s}{s - \omega_i}$ und Aussage 2.4.21 zu dem System von Ungleichungen

$$\left(1 - \frac{n}{2} \gamma |\nu_i(v)|^2\right) |s|^2 > \omega_i \Re(s) \quad \forall s \in \mathcal{S}, \forall v \in \{w \in \mathbb{C}^m : \|w\| = 1\},$$

$i = 1, \dots, n$, als hinreichende Bedingung für (2.4.30). Dieses ist für

$$\gamma < \frac{1}{n} \frac{2(1 - \text{sprd}(1 - H^\sharp H))}{\|\rho A^\sharp H^\sharp A\|}$$

erfüllt. Mit dem zweiten Punkt der Aussage 2.4.20 erhält man

$$\frac{|s|^2 - \omega_i \Re(s)}{|s - \omega_i|^2} > \frac{\gamma}{2} \sum_{j=1}^n |\nu_j(v)|^2 \Re\left(\frac{|s|^2}{(s - \omega_i)(s^* - \omega_j)}\right) \quad \forall s \in \mathcal{S}, \|v\| = 1,$$

$i = 1, \dots, n$, als hinreichende Bedingung für (2.4.30). Wegen der nach Aussage 2.4.21 für $s \in \mathcal{S}$ geltenden Abschätzungen

$$\Re\left(\frac{|s|^2}{(s - \omega_i)(s^* - \omega_j)}\right) \leq \frac{1}{1 - \text{sprd}(I_n - H^\sharp H)} \left|\frac{s}{s - \omega_i}\right|$$

und

$$\frac{\frac{|s|^2 - \omega_i \Re(s)}{|s - \omega_i|^2}}{\left|\frac{s}{s - \omega_i}\right|} = \frac{|s| - \omega_i \frac{\Re(s)}{|s|}}{|s - \omega_i|} \geq \frac{|s| - |\omega_i|}{|s - \omega_i|} \geq \frac{1 - |\omega_i|}{1 + |\omega_i|} \geq \frac{1 - \text{sprd}(I_n - H^\sharp H)}{1 + \text{sprd}(I_n - H^\sharp H)}$$

ist die Ungleichung

$$\frac{1 - \text{sprd}(I - H^\sharp H)}{1 + \text{sprd}(I - H^\sharp H)} > \frac{\gamma}{2} \sum_{i=1}^n |\nu_j(v)|^2 \frac{1}{1 - \text{sprd}(I - H^\sharp H)}$$

und daher

$$\gamma < \frac{1 - \text{sprd}(I - H^\sharp H)}{1 + \text{sprd}(I - H^\sharp H)} \frac{2(1 - \text{sprd}(I - H^\sharp H))}{\|\rho A' H^\sharp A\|}$$

dafür hinreichend. Damit gilt die folgende Verschärfung von Satz 2.4.18.

2.4.22 Satz *Es gelten die Voraussetzungen des Lemmas 2.4.14.*

Weiterhin sei $\text{sprd}(I_n - H^\sharp H) < 1$. Dann gilt $\text{sprd}(\partial \mathcal{Q}_\rho^{\alpha, \gamma}(x^*, \lambda^*)) < 1$ für

$$\gamma < \max \left\{ \frac{1}{n}, \frac{1 - \text{sprd}(I - H^\sharp H)}{1 + \text{sprd}(I - H^\sharp H)} \right\} \frac{2(1 - \text{sprd}(I - H^\sharp H))}{\|\rho A' H^\sharp A\|}.$$

Für das Verfahren ohne Raumzerlegung lässt sich aus dem Satz schließen, dass für einen hinreichend großen Strafparameter ρ der Parameter γ nahe bei 2 wählbar ist, da in diesem Fall $H^\sharp = H^{-1}$ gilt und $\rho A' H_\rho^{-1} A = A' (AA' + \frac{1}{\rho} H_0)^{-1} A \approx I_m$ gezeigt werden kann.

In den Abschätzungen nimmt der wesentliche Term $|\frac{s}{s-\omega}|$ Extremalwerte für $s = \pm 1$ an. Dies könnte als Motivation dienen, auf der Basis der Bedingungen

$$\mathcal{W}(M_\rho^\gamma(1)) = \mathcal{W}\left(I_m - \gamma \rho A' H^{-1} A\right) \subset \overset{\circ}{\mathcal{E}}_1$$

und

$$\mathcal{W}(M_\rho^\gamma(-1)) = \mathcal{W}\left(I_m - \gamma \rho A' \left(2(H^\sharp)^{-1} - H\right)^{-1} A\right) \subset \overset{\circ}{\mathcal{E}}_1$$

Heuristiken für γ zu entwickeln. Dabei bedeutet die erstgenannte Bedingung nichts anderes als die Konvergenz des erweiterten Lagrangeverfahrens ohne Raumzerlegung mit einer gedämpften Aufdatierung des Lagrangeparameters gemäß $\lambda^{k+1} = \lambda^k + \gamma \rho^k c(x^{k+1})$.

2.4.23 Bemerkung An dieser Stelle wird nicht näher auf eine multiplikative Variante des eLgVRz bei der Aufdatierung der primalen Variablen eingegangen. Bei dieser wird mit $x^{0,k} = x^k$ über die Teilschritte

$$y_i^k = \underset{y_i \in W_i}{\text{argmin}} \ell_\rho(x^{i-1,k} + P_i y_i, \lambda^k)$$

$$x^{i,k} = x^{i-1,k} + P_i y_i^k$$

die nächste primale Iterierte als $x^{k+1} = x^{p,k}$ gebildet. Die Jacobimatrix des zugehörigen Iterationsoperators hat die Form $Q = Q_1 \cdots Q_p$ mit

$$Q_i = \begin{pmatrix} I_n - H^{-P_i} H & -H^{-P_i} A \\ \rho A' (I_n - H^{-P_i} H) & I_m - \gamma \rho A' H^{-P_i} A \end{pmatrix}.$$

Denkbar ist daneben eine Variante, bei der nach jeder Teilraumoptimierung auch eine Aufdatierung der dualen Variablen vorgenommen wird, also

$$\begin{aligned} y_i^k &= \operatorname{argmin}_{y_i \in W_i} \ell_\rho(x^{i-1,k} + P_i y_i, \lambda^{i-1,k}) \\ x^{i,k} &= x^{i-1,k} + P_i y_i^k \\ \lambda^{i,k} &= \lambda^{i-1,k} + \gamma \rho c(x^{i,k}) \end{aligned}$$

und $x^{k+1} = x^{p,k}$ sowie $\lambda^{k+1} = \lambda^{p,k}$. □

Das Verfahren ohne exakte Teilraumoptimierung

Wie beim Verfahren ohne Raumzerlegung interessieren auch für Algorithmus 2.4.11 Konvergenzaussagen, die nicht von einer unrealistischen exakten Durchführung der Teilraumoptimierungen ausgehen. Denn diese sind meist nur mit hohem Aufwand und bestenfalls annähernd erreichbar und lohnen sich insbesondere am Anfang der Iteration nicht. Es lässt sich im Wesentlichen die Diskussion um Satz 2.4.9 auf die gegebene Situation übertragen, da die Bedingung (2.4.13)

$$\ell_{\rho^k}(x^k, \lambda^k) - \ell_{\rho^k}(x^{k+1}, \lambda^k) \geq \varphi(\|\nabla \ell_{\rho^k}(x^k, \lambda^k)\|)$$

auch im Fall der Raumzerlegung eine geeignete, numerisch realisierbare Voraussetzung an das Verfahren ohne exakte Minimierung ist, wie es u. a. in Bemerkung 1.4.8 des ersten Kapitels dargestellt wurde.

2.4.24 Satz *Das Zielfunktional f sei in \mathbb{R}^n nach unten beschränkt, und die nicht abbrechende Iterationsfolge $\{(x^k, \lambda^k)\}$ sei von Algorithmus 2.4.11 erzeugt. Der Abstieg im Lagrangefunktional bei der Berechnung von x^{k+1} genüge mit einer \mathcal{F} -*

Funktion φ der Beziehung

$$\ell_{\rho^k}(x^k, \lambda^k) - \ell_{\rho^k}(x^{k+1}, \lambda^k) \geq \varphi(\|\nabla \ell_{\rho^k}(x^k, \lambda^k)\|).$$

Die Strafparameter ρ^k seien durch $0 < \underline{\rho} \leq \rho^k \leq \bar{\rho}$ beschränkt, und es gebe eine positive Konstante $C > 0$, so dass die Restriktion in x^k durch

$$\|c(x^k)\| \leq \frac{C}{k} \tag{2.4.32}$$

beschränkt ist. Dann bleibt die Folge $\{(\lambda^k, c(x^k))\}$ beschränkt, und es gilt

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \|\nabla \ell_{\rho^k}(x^k, \lambda^k)\| = 0.$$

Dann ist auch jeder Häufungspunkt von $\{(x^k, \lambda^k)\}$ ein KKT-Punkt von (NLO=).

In dieser Formulierung besteht der einzige Unterschied zur Situation unter Satz 2.4.9 in der modifizierten Aufdatierung der Lagrangeparameter

$$\lambda^{k+1} = \lambda^k + \gamma^k \rho^k c(x^{k+1}) \quad \text{bzw.} \quad \lambda^{k+1} = \lambda^0 + \sum_{j=0}^k \gamma^j \rho^j c(x^{j+1})$$

Der Beweis lässt sich mit dieser Anpassung analog durchführen, da die $\gamma^j > 0$ durch $\bar{\gamma}$ beschränkt sind; insbesondere gilt die wesentliche Ungleichung (2.4.15) mit der Festlegung $\rho^{j+\frac{1}{2}} = (\gamma^j - \frac{1}{2})\rho^{j+1} + \frac{1}{2}\rho^j$. Unbefriedigend bleibt jedoch, dass die Funktion der Parameter α_i^k und γ^k nicht deutlich wird. Dazu wäre die Bedingung (2.4.32) in Abhängigkeit dieser Schrittweitenparameter zu untersuchen. Tatsächlich zeigen Rechnungen in den Anwendungsfällen des folgenden Kapitels die Notwendigkeit dieser Dämpfungen.

3 Anwendungen

Operations research analysts, engineers, managers and planners are traditionally confronted by problems that need solving. [3]

3.1 Parameteridentifikation

Bei der Modellierung naturwissenschaftlicher und technischer Prozesse kommt der Identifikation der Modellparameter eine wichtige Rolle zu. Ein (letztlich diskretisiertes) Modell bestimme den Modellzustand u durch eine Gleichung

$$c(u, a) = 0$$

in Abhängigkeit eines Parametersatzes a . Das Modell stellt in der Regel einen funktionalen Zusammenhang zwischen Parameter a und den durch $c(u[a], a) = 0$ implizit gegebenen Modellzustand $u[a]$ her. Sowohl die Dimension in u wie in a kann durch die Diskretisierung außerordentlich groß werden, wenn es sich um verteilte, d. h. raum- und ggf. auch zeitabhängige Parameter handelt. Falls der Parametersatz für ein konkretes System nicht bekannt oder durch Messungen direkt zugänglich ist, ist dieser indirekt anhand einer \hat{u} Messung des Modellzustandes (bzw. einer daraus abgeleiteten Größe) zu bestimmen. Für die sachgemäße Lösung dieses Problems ist in den unterschiedlichen wissenschaftlichen und technischen Disziplinen eine Vielzahl von Methoden entwickelt worden, die sowohl Eigenschaften des Modells und Anspruch an dessen Genauigkeit als auch die in der jeweiligen Situation typische Datenlage zu berücksichtigen haben. Im Fall indirekter Verfahren, [97], geschieht dies durch die Minimierung eines Fehlerfunktionals $E_\eta(u, a)$, das für das sogenannte

output-least-squares-Verfahren, [1], durch

$$E_\eta(u, a) = \|u - \hat{u}\|^2 + \eta R(a)$$

gegeben ist. Das Funktional setzt sich aus dem Quadratmittelfehler zwischen Modellzustand und Messwert sowie einem Regularisierungsterm zusammen. Die Regularisierung ist notwendig, da es sich bei Parameteridentifikationsproblemen um inverse und damit häufig um schlecht gestellte Probleme handelt. Dies bedeutet, dass eine der Hadamardschen Bedingungen für wohlgestellte Aufgaben

- Existenz einer Lösung,
- Eindeutigkeit der Lösung und
- stetige Abhängigkeit der Lösung von den Eingangsdaten

verletzt ist. Nur wenn die Wohlgestelltheit gegeben ist, ist eine numerische (approximative) Berechnung sinnvoll. Diese Problematik wird an dieser Stelle nicht vertieft und es sei auf die diesbezüglich umfangreiche Literatur verwiesen, [1, 23, 46]. Dies gilt insbesondere für die Wahl des Regularisierungsparameters, der hier als geeignet gegebener, fester Wert angenommen wird.

Die Identifikationsaufgabe lässt sich nun in der Gestalt des Optimierungsproblems

$$a_\eta^* = \operatorname{argmin}_{a \in \mathcal{A}} E_\eta(u[a], a)$$

oder

$$(u_\eta^*, a_\eta^*) = \operatorname{argmin}_{\substack{c(u,a)=0 \\ a \in \mathcal{A}}} E_\eta(u, a)$$

formulieren, wobei \mathcal{A} einen physikalisch und mathematisch sinnvollen Parameterbereich darstellt. Obwohl die obigen Optimierungsaufgaben bezüglich des Parameters in gewisser Weise äquivalent sind, verbergen sich hinter den Formulierungen grundsätzlich verschiedene numerische Zugänge. Auf der einen Seite steht ein nur durch \mathcal{A} , das etwa durch numerisch einfach zu erfüllende Intervallbedingungen gegeben ist, restringiertes Optimierungsproblem geringerer Dimension mit aufwendig zu berechnendem Zielfunktional und Gradienten; dies erfordert u. a. eine häufige und aufwendige Berechnung des Modellzustandes $u[a]$. Dem gegenüber steht ein einfaches Zielfunktional in einem gleichungsrestringierten Problem höherer Dimension,

dessen Nebenbedingung während der Iteration so zu sagen *en passant* zumindest näherungsweise gelöst wird. Der letztgenannte Zugang steht für die Anwendung des erweiterten Lagrangeverfahrens mit Raumzerlegung im Folgenden zur Diskussion.

Die Diskretisierung durch partielle Differentialgleichungen gegebener Modelle mit verteilten Parametern, [43, 13, 12], führt zu hochdimensionalen Modellgleichungen und Optimierungsaufgaben. Die für Differentialgleichungen entwickelten Gebietszerlegungsverfahren, [96, 76, 95], führen in natürlicher Weise zu Raumzerlegungen für die im zweiten Kapitel vorgestellten Optimierungsmethoden. Dieser Zugang scheint erst ansatzweise diskutiert worden zu sein, [59, 60, 24], und wird hier verfolgt.

Das erweiterte Lagrangeverfahren zur Bestimmung von Parametern in partiellen Differentialgleichungen ist insbesondere von Ito und Kunisch durch die Übertragung des Verfahrens in Hilberträume untersucht worden, [49, 51, 50, 58, 69, 70]. Der Zugang, erst das Verfahren in „unendlichdimensionalen Räumen“ anzusetzen und dieses anschließend zu diskretisieren, wird an dieser Stelle jedoch nicht gewählt. Hier interessiert das durch die Diskretisierung des Modells und des Zielfunktionals entstehende hochdimensionale Optimierungsproblem dessen ursprüngliche Geometrie die Raumzerlegung motiviert.

3.2 Identifikation elliptischer Modelle

Die auf einem Gebiet Ω mit Rand Γ gegebene lineare elliptische Differentialgleichung

$$\begin{aligned} -\nabla(a\nabla u) &= f && \text{auf } \Omega \\ u &= 0 && \text{auf } \Gamma \end{aligned} \tag{3.2.1}$$

ist ein häufig auftretender Modelltyp, insbesondere bei stationären Wärmeleitungs- und Transportvorgängen in porösen Medien, [86, 57, 97]. Das Medium wird als isotrop angenommen, was einen skalarwertigen Parameter a zur Folge hat.

Zu einem „Messwert“ \hat{u} aus $L_2(\Omega)$ ist bei gegebener Quelldichte $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ der verteilte Parameter $a : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ derart zu bestimmen, dass die zu diesem Parameter gehörende Modellantwort u dem Messwert möglichst gut entspricht. Dazu wird das konvexe Zielfunktional $E_\eta : H_0^1(\Omega) \times H^1(\Omega) \rightarrow \mathbb{R}$, das sich aus dem L_2 -Fehler des

Modellfehlers und der H^1 -Seminorm des Parameters gemäß

$$E_\eta(u, a) = \frac{1}{2} \int_\Omega (u(x) - \hat{u}(x))^2 dx + \frac{\eta}{2} \int_\Omega \|\nabla a(x)\|^2 dx$$

zusammensetzt, unter der Nebenbedingung (3.2.1) minimiert. Für die funktional-analytischen Hintergründe sei auf [1, 50] verwiesen.

3.2.1 Der eindimensionale Fall $\Omega \subset \mathbb{R}$

Diskretisierung

Die Diskretisierung der Identifikationsaufgabe des Modells in einer Raumdimension auf dem Gebiet $\Omega = (0, 1) \subset \mathbb{R}$

$$\begin{aligned} -(au')' &= f \quad \text{auf } \Omega \\ u(0) &= u(1) = 0 \end{aligned}$$

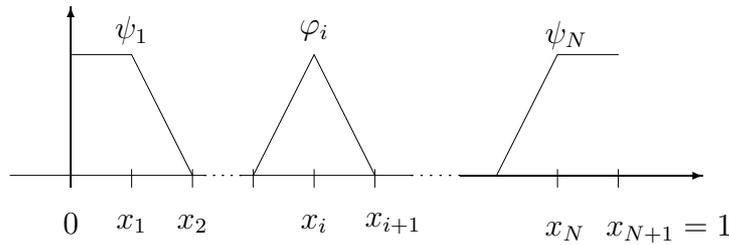
wird durch den Übergang zu linearen Finite-Elemente Räumen bei der variationellen Formulierung (mit schwachen Ableitungen)

$$\int_0^1 au'v' = \int_0^1 fv \quad \forall v \in H_0^1(\Omega),$$

durch die $u \in H_0^1(\Omega)$ für gegebenes $a \in L_\infty(\Omega)$ eindeutig bestimmt ist, erzielt. Zu einem äquidistanten Gitter $\omega = \{x_i = ih : i = 0, \dots, N + 1\}$ der Maschenweite $h = \frac{1}{N+1}$ werden die bezüglich ω stückweise linearen, stetigen Hütchenfunktionen durch

$$\varphi_i(x_j) = \begin{cases} 1 & \text{für } i = j \\ 0 & \text{für } i \neq j \end{cases} \quad i, j \in \{0, \dots, N + 1\}$$

definiert. Außerdem seien $\psi_1 = \varphi_0 + \varphi_1$ und $\psi_N = \varphi_N + \varphi_{N+1}$ die zum Rand konstanten Fortsetzungen von φ_1 bzw. φ_N , wie in der folgenden Skizze zu sehen.



Mit den Projektionen auf die FE-Räume

$$u_\omega = \sum_{i=1}^N u_i \varphi_i, \quad f_\omega = \sum_{i=0}^{N+1} f_i \varphi_i \quad \text{und} \quad a_\omega = a_1 \psi_1 + \sum_{i=2}^{N-1} a_i \varphi_i + a_N \psi_N,$$

wobei $u_i = u(x_i)$ usw. bezeichnet, erhält man das diskrete Problem

$$\int_0^1 a_\omega u'_\omega v'_\omega = \int_0^1 f_\omega v_\omega \quad \forall v_\omega \in \text{spann}\{\varphi_i : i = 1, \dots, N\} \subset H_0^1(\Omega),$$

und schließlich aus

$$\int_0^1 a_\omega u'_\omega \varphi'_i = \int_0^1 f_\omega \varphi'_i \quad i = 1, \dots, N$$

das Gleichungssystem

$$\begin{aligned} \frac{3a_1 + a_2}{2} u_1 - \frac{a_1 + a_2}{2} u_2 &= h^2 \frac{f_0 + 2f_1 + f_2}{4} \\ -\frac{a_i + a_{i-1}}{2} u_{i-1} + \frac{a_{i+1} + 2a_i + a_{i-1}}{2} u_i - \frac{a_{i+1} + a_i}{2} u_{i+1} &= h^2 \frac{f_{i-1} + 2f_i + f_{i+1}}{4} \end{aligned}$$

für $i = 2, \dots, N - 1$ und

$$-\frac{a_{N-1} + a_N}{2} u_{N-1} + \frac{a_{N-1} + 3a_N}{2} u_N = h^2 \frac{f_{N-1} + 2f_N + f_{N+1}}{4},$$

das in Matrixschreibweise die Gestalt $\mathbf{A}\mathbf{u} = h^2\mathbf{f}$ hat. Die Systemmatrix lässt sich mit den Matrizen

$$\mathbf{A}_1 = \begin{pmatrix} \frac{3}{2} & -1 \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ & & \mathbf{0} \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \mathbf{A}_N = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & & \\ & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ & -1 & \frac{3}{2} \end{pmatrix}$$

sowie

$$\mathbf{A}_i = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & & & & \\ & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & & \\ & -\frac{1}{2} & 1 & -\frac{1}{2} & \\ & & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \\ & & & & \mathbf{0} \end{pmatrix} \leftarrow i \quad \text{für } i = 2, \dots, N-1$$

\uparrow
 i

in der Form $\mathbf{A} = \sum_{i=1}^N a_i \mathbf{A}_i$ darstellen, während

$$\mathbf{u} = \begin{pmatrix} u_1 \\ \vdots \\ u_N \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \mathbf{f} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} f_0 + 2f_1 + f_2 \\ \vdots \\ f_{N-1} + 2f_N + f_{N+1} \end{pmatrix} \quad \text{ist.}$$

Das Zielfunktional

$$E_\eta(u, a) = \frac{1}{2} \int_0^1 (u - \hat{u})^2 + \frac{\eta}{2} \int_0^1 (a')^2$$

werde durch

$$E_\eta(\mathbf{u}, \mathbf{a}) = \frac{h}{2} \|\mathbf{u} - \hat{\mathbf{u}}\|^2 + \frac{\eta}{2h} \|\mathbf{D}\mathbf{a}\|^2$$

diskretisiert. Hierbei ist $\mathbf{D} \in \mathbb{R}^{(N-1) \times N}$ der Differenzenoperator

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} -1 & 1 & & & \\ & -1 & 1 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & & \ddots \end{pmatrix}, \quad \text{der } \mathbf{a} \text{ auf } \mathbf{D}\mathbf{a} = \begin{pmatrix} a_2 - a_1 \\ \vdots \\ a_N - a_{N-1} \end{pmatrix} \quad \text{abbildet.}$$

Im Unterschied zu $E_\eta(\mathbf{u}, \mathbf{a})$ ist in dieser Notation

$$E_\eta(u_\omega, a_\omega) = \frac{h}{2} \left(\frac{2}{3} \|\mathbf{u} - \hat{\mathbf{u}}\|^2 + \frac{1}{3} \sum_{i=1}^{N-1} (u_i - \hat{u}_i)(u_{i+1} - \hat{u}_{i+1}) \right) + \frac{\eta}{2h} \|\mathbf{D}\mathbf{a}\|^2,$$

falls $\hat{u} = \hat{u}_\omega$. Das „algebraisierte“ Optimierungsproblem lautet in der gewählten Diskretisierung

$$(\mathbf{u}_\eta^*, \mathbf{a}_\eta^*) = \underset{\mathbf{c}(\mathbf{u}, \mathbf{a})=0}{\operatorname{argmin}} \left(\frac{h}{2} \|\mathbf{u} - \hat{\mathbf{u}}\|^2 + \frac{\eta}{2h} \|\mathbf{D}\mathbf{a}\|^2 \right)$$

mit der durch

$$\mathbf{c}(\mathbf{u}, \mathbf{a}) = \mathbf{f} - \frac{1}{h^2} \sum_{i=1}^N a_i \mathbf{A}_i \mathbf{u}$$

gegebenen Restriktionsfunktion $\mathbf{c} : \mathbb{R}^N \times \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}^N$.

Um „unphysikalische“ Zustände und Parameter zu vermeiden, wie $a_i \leq 0$, werden zusätzliche Intervallnebedingungen $\underline{\mathbf{a}} \leq \mathbf{a} \leq \bar{\mathbf{a}}$ und $\underline{\mathbf{u}} \leq \mathbf{u} \leq \bar{\mathbf{u}}$ aufgestellt, die jedoch nicht in das Lagrangefunktional aufgenommen sondern als einfach zu erfüllende Nebenbedingungen explizit behandelt werden. Mit der Bezeichnung

$$K = \{(\mathbf{u}, \mathbf{a}) \in \mathbb{R}^N \times \mathbb{R}^N : \underline{\mathbf{a}} \leq \mathbf{a} \leq \bar{\mathbf{a}}, \underline{\mathbf{u}} \leq \mathbf{u} \leq \bar{\mathbf{u}}\}$$

des zulässigen Intervalls ergibt sich als Identifikationsaufgabe das Optimierungsproblem

$$(\mathbf{u}_\eta^*, \mathbf{a}_\eta^*) = \underset{\substack{\mathbf{c}(\mathbf{u}, \mathbf{a})=0 \\ (\mathbf{u}, \mathbf{a}) \in K}}{\operatorname{argmin}} \left(\frac{h}{2} \|\mathbf{u} - \hat{\mathbf{u}}\|^2 + \frac{\eta}{2h} \|\mathbf{D}\mathbf{a}\|^2 \right). \quad (3.2.2)$$

Die Aufgabe enthält jeweils N Freiheitsgrade für den Modellzustand und für den verteilten Parameter. In den meisten Anwendungsfällen wird der Parameter durch eine wesentlich geringere Zahl an Freiheitsgraden als der Modellzustand repräsentiert werden, was durch ein gröberes Diskretisierungsgitter für den Parameter erreicht werden kann. Dies sollte sich auch positiv auf die Kondition des Problems auswirken. Es sei darauf hingewiesen, dass für die hier beschriebene Diskretisierung $a \in H^1(\Omega)$ und damit die Stetigkeit des Parameters verlangt wird, denn es ist $H^1(\Omega) \subseteq C(\Omega)$ für $\Omega \subset \mathbb{R}$, [13, theorem 1.4.6]. Bei der in praktischen Fällen häufig anzutreffenden Diskretisierung mit stückweise konstanten Parametern ist an den Unstetigkeitsstellen die Gültigkeit der Transmissionsbedingungen, d. h. die Stetigkeit des Zustandes u und des Flusses $-au'$, zu beachten, [16].

Der Gradient und die Hessematrix des Zielfunktional lassen sich unmittelbar mit

$$\nabla E_\eta(\mathbf{u}, \mathbf{a}) = \begin{pmatrix} h(\mathbf{u} - \hat{\mathbf{u}}) \\ \frac{\eta}{h} \mathbf{D}' \mathbf{D} \mathbf{a} \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \nabla^2 E_\eta(\mathbf{u}, \mathbf{a}) = \begin{pmatrix} h \mathbf{I}_N & \\ & \frac{\eta}{h} \mathbf{D}' \mathbf{D} \end{pmatrix}$$

angeben, während sich für die Restriktion \mathbf{c} die Darstellungen

$$\nabla \mathbf{c}(\mathbf{u}, \mathbf{a}) = -\frac{1}{h^2} \begin{pmatrix} \mathbf{A}' \\ \mathbf{u}' \mathbf{A}'_1 \\ \vdots \\ \mathbf{u}' \mathbf{A}'_N \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \partial_{a_i} \partial_{u_j} c_k(\mathbf{u}, \mathbf{a}) = -\frac{1}{h^2} \mathbf{e}'_k \mathbf{A}_i \mathbf{e}_j$$

mit den Einheitsvektoren $\mathbf{e}_j = (0, \dots, 0, \overset{j}{1}, 0, \dots, 0)'$ ergeben. Die Hessematrix $\nabla^2 \mathbf{c}_k(\mathbf{u}, \mathbf{a})$ hat offenbar die Struktur

$$\nabla^2 \mathbf{c}_k(\mathbf{u}, \mathbf{a}) = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{B}_k \\ \mathbf{B}_k & \mathbf{0} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{(N+N) \times (N+N)}$$

mit $\mathbf{B}_k(i, j) = -\frac{1}{h^2} \mathbf{e}'_k \mathbf{A}_i \mathbf{e}_j$ bzw. $\mathbf{B}_k(i, :) = -\frac{1}{h^2} \mathbf{A}_i(k, :)$ ¹. Weil $\mathbf{A}_i(k, :)$ eine Nullzeile ist, falls $|i - k| > 1$ gilt, und da die Beziehungen $\mathbf{A}_k(k - 1, :) = \mathbf{A}_{k-1}(k, :)$ sowie $\mathbf{A}_k(k + 1, :) = \mathbf{A}_{k+1}(k, :)$ gelten, ist $\mathbf{B}_k = -\frac{1}{h^2} \mathbf{A}_k$ und schließlich

$$\nabla^2 \mathbf{c}_k(\mathbf{u}, \mathbf{a}) = -\frac{1}{h^2} \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{A}_k \\ \mathbf{A}_k & 0 \end{pmatrix}.$$

Das Lagrangefunktional wird mit

$$\ell_\rho(\mathbf{u}, \mathbf{a}, \boldsymbol{\lambda}) = \frac{1}{h} E_\eta(\mathbf{u}, \mathbf{a}) + \langle \boldsymbol{\lambda}, \mathbf{c}(\mathbf{u}, \mathbf{a}) \rangle + \frac{\rho}{2} \|\mathbf{c}(\mathbf{u}, \mathbf{a})\|^2 \quad (3.2.3)$$

angesetzt. Die Skalierung des Zielfunktional mit $\frac{1}{h}$ vermeidet einen Skalierungseffekt in Abhängigkeit von der Feinheit der Diskretisierung sowohl in $\boldsymbol{\lambda}$ wie im Verfahrensparameter ρ . Dies gilt auch für die gewählte Skalierung der Nebenbedingung \mathbf{c} , die einen Einfluss auf ρ und γ hat. Das KKT-System zu (3.2.2) nimmt damit die

¹MATLAB-Notation

folgende Form an.

$$\begin{aligned} \mathbf{u} - \hat{\mathbf{u}} - \frac{1}{h^2} \mathbf{A} \boldsymbol{\lambda} &= 0 \\ \frac{\eta}{h^2} \mathbf{D}' \mathbf{D} \mathbf{a} - \frac{1}{h^2} \begin{pmatrix} \mathbf{u}' \mathbf{A}_1 \boldsymbol{\lambda} \\ \vdots \\ \mathbf{u}' \mathbf{A}_N \boldsymbol{\lambda} \end{pmatrix} &= 0 \\ \mathbf{f} - \frac{1}{h^2} \mathbf{A} \mathbf{u} &= 0 \end{aligned}$$

Die Hessematrix des erweiterten Lagrangefunktional (3.2.3) hat unter Beachtung der Symmetrie der Matrizen \mathbf{A}_i die Gestalt

$$\begin{aligned} \mathbf{H} = & \begin{pmatrix} \mathbf{I}_N & -\frac{1}{h^2} \sum_{i=1}^N \tilde{\lambda}_i \mathbf{A}_i \\ -\frac{1}{h^2} \sum_{i=1}^N \tilde{\lambda}_i \mathbf{A}_i & \frac{\eta}{h^2} \mathbf{D}' \mathbf{D} \end{pmatrix} \\ & + \frac{\rho}{h^4} \begin{pmatrix} \mathbf{A}^2 & \mathbf{A} \mathbf{A}_1 \mathbf{u} & \dots & \mathbf{A} \mathbf{A}_N \mathbf{u} \\ \mathbf{u}' \mathbf{A}_1 \mathbf{A} & \mathbf{u}' \mathbf{A}_1 \mathbf{A}_1 \mathbf{u} & \dots & \mathbf{u}' \mathbf{A}_1 \mathbf{A}_N \mathbf{u} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \mathbf{u}' \mathbf{A}_N \mathbf{A} & \mathbf{u}' \mathbf{A}_N \mathbf{A}_1 \mathbf{u} & \dots & \mathbf{u}' \mathbf{A}_N \mathbf{A}_N \mathbf{u} \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

wobei $\tilde{\boldsymbol{\lambda}} = \boldsymbol{\lambda} + \rho \mathbf{c}(\mathbf{u}, \mathbf{a})$ ist.

Es bleibt, die Voraussetzungen (V1) und (V2) des erweiterten Lagrangeverfahrens von S. 80 zu diskutieren. Für einen positiven Regularisierungsparameter η gilt

$$\begin{aligned} \text{kern}(\nabla^2 E_\eta(\mathbf{u}, \mathbf{a})) &= \text{spann} \left\{ \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{e} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{2N} \right\} \\ &\subseteq \left\{ \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{b} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{2N} : \mathbf{b} \in \mathbb{R}^N \right\} = \text{kern}(\nabla^2 E_0(\mathbf{u}, \mathbf{a})) \end{aligned}$$

mit dem „Einsvektor“ $\mathbf{e} = \sum_{i=1}^N \mathbf{e}_i$, da die diskrete Ableitung $\frac{1}{h} \mathbf{D} \mathbf{a}$ genau dann verschwindet, wenn die Einträge von \mathbf{a} konstant sind.

Wir setzen $\mathbf{f} \neq 0$ voraus und nehmen an, dass für eine Minimumstelle $(\mathbf{u}^*, \mathbf{a}^*)$ von (3.2.2) die Bedingung $\mathbf{a}^* > 0$ erfüllt ist. Dann ist $\mathbf{A}^* = \sum_{i=1}^N a_i^* \mathbf{A}_i$ regulär und $\mathbf{u}^* = (\mathbf{A}^*)^{-1} \mathbf{f} \neq 0$. Offenbar ist die Voraussetzung (V1) des vollen Ranges von

$\nabla \mathbf{c}(\mathbf{u}^*, \mathbf{a}^*)$ aus Abschnitt 2.4.2 mit der Regularität von \mathbf{A}^* für $\eta \geq 0$ erfüllt. Für $0 \neq (\mathbf{u}, \mathbf{a}) \in \text{kern}(\nabla \mathbf{c}(\mathbf{u}^*, \mathbf{a}^*)) \cap \text{kern}(\nabla^2 E_\eta \mathbf{c}(\mathbf{u}^*, \mathbf{a}^*))$ gilt sowohl

$$\mathbf{A}^* \mathbf{u} + \sum_{i=1}^N a_i \mathbf{A}_i \mathbf{u}^* = 0$$

wie $\mathbf{u} = 0$ und somit $\sum_{i=1}^N a_i \mathbf{A}_i \mathbf{u}^* = 0$. Tritt in \mathbf{a} kein Vorzeichenwechsel auf ($a_i > 0$ oder $a_i < 0$ für alle $i = 1, \dots, N$), so ist $\sum_{i=1}^N a_i \mathbf{A}_i$ regulär mit der Folge $\mathbf{u}^* = 0$ im Widerspruch zur obigen Überlegung. Für $\eta > 0$ ist $a_i = a_j \neq 0$ für $i, j \in \{1, \dots, N\}$ erfüllt, so dass tatsächlich kein Vorzeichenwechsel auftritt und auch Voraussetzung (V2) gegeben ist.

Es wird hier davon ausgegangen, dass $(\mathbf{u}^*, \mathbf{a}^*)$ im Innern von K liegt, d. h. dass keine der Ungleichungsrestriktionen im betrachteten lokalen Minimum aktiv ist.

Raumzerlegung

Im gegebenen Fall der diskretisierten Differentialgleichung bieten sich als Zugänge zur Bildung von Raumzerlegungen die Methoden der

- Gebietszerlegung und der
- Grobgitterbildung

an. Im Fall einer überlappenden Gebietszerlegung $\Omega = \bigcup_{j=1}^p \Omega_j$ des Gesamtgebietes in offene und zusammenhängende Teilgebiete $\Omega_j \subseteq \Omega$, wird ein Teilraum V_j dadurch gebildet, dass die Freiheitsgrade des Zustandes und des Parameters in den Knoten, die im abgeschlossenen Teilgebiet $\bar{\Omega}_j$ liegen, diesem zugeordnet werden. Die Teilge-



Abbildung 3.2.1: Gebietszerlegung mit induzierter Knotenaufteilung

bierte sind so gewählt, dass $\bar{\Omega}_i \cap \bar{\Omega}_{i+2} = \emptyset$ für $i = 1, \dots, p-2$ gilt. Die miteinander nicht überlappenden Gebiete werden zu zwei Farben

$$\mathcal{A} = \{\Omega_{2i-1} : i \in \mathbb{N}, 1 \leq 2i-1 \leq p\} \quad \text{und} \quad \mathcal{B} = \{\Omega_{2i} : i \in \mathbb{N}, 1 \leq 2i \leq p\}$$

zusammengefasst.

Dem Teilraum V_j seien die $n_j = \bar{i}_j - \underline{i}_j + 1$ Knoten $x_{\underline{i}_j}$ bis $x_{\bar{i}_j}$ zugeordnet. Sämtliche auftretende Räume lassen sich als direktes Produkt zweier Räume $V_j = V_j^Z \times V_j^P$ auffassen, die jeweils den Raum für den Modellzustand und den Parameter repräsentieren. Dies gilt auch für die Räume $W_j = W_j^Z \times W_j^P = \mathbb{R}^{n_j} \times \mathbb{R}^{n_j}$. Einbettungen und Restriktionen wirken hier zwischen W_j^Z und V_j^Z bzw. W_j^P und V_j^P völlig analog.

Die Einbettung $\hat{\mathbf{P}}_j$ von $W_j^Z = \mathbb{R}^{n_j}$ in $V_j^Z \subseteq \mathbb{R}^N$ (bzw. W_j^P in V_j^P) wird mit

$$\hat{\mathbf{P}}_j = \begin{pmatrix} \mathbf{0}_{(\underline{i}_j-1) \times n_j} \\ \mathbf{I}_{n_j} \\ \mathbf{0}_{(N-\bar{i}_j) \times n_j} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{N \times n_j} \quad \text{für } j = 1, \dots, p$$

angesetzt, so dass $V_j = \hat{\mathbf{P}}_j W_j^Z \times \hat{\mathbf{P}}_j W_j^P$ und \mathbf{P}_j mit

$$\mathbf{P}_j = \begin{pmatrix} \hat{\mathbf{P}}_j \\ \hat{\mathbf{P}}_j \end{pmatrix}$$

identifiziert werden kann. Die Matrix $\sum_{j=1}^p \hat{\mathbf{P}}_j' \hat{\mathbf{P}}_j$ ist eine Diagonalmatrix in \mathbb{N}^N , wobei der Diagonaleintrag (i, i) angibt, wievielen Teilgebieten $\bar{\Omega}_j$ der Knoten x_i angehört, im gegebenen Fall also einem oder höchstens zweien. Durch diagonale Wichtungsmatrizen $\hat{\mathbf{E}}_j \geq 0$ aus \mathbb{R}^N lässt sich

$$\sum_{j=1}^p \hat{\mathbf{E}}_j \hat{\mathbf{P}}_j' \hat{\mathbf{P}}_j = \mathbf{I}_N$$

erreichen. Es zeigt sich, dass sich mit diesen Wichtungen, das Konvergenzverhalten der Verfahren verbessern lässt. In Überlappbereichen sind die $\hat{\mathbf{E}}_j$ nicht eindeutig bestimmt; gehört der Knoten x_i jedoch ausschließlich dem abgeschlossenen Teilgebiet $\bar{\Omega}_l$ an, so gilt $\hat{\mathbf{E}}_l(i, i) = 1$ und $\hat{\mathbf{E}}_j(i, i) = 0$ für $j \neq l$.

Der Grobgitterraum $V_0 = V_0^Z \times V_0^P$ entsteht durch die Wahl eines Teilgitters größerer Maschenweite (über das gesamte Gebiet) als freie Knotenmenge. Die Freiheitsgrade, die nicht dem Teilgitter angehören, werden durch lineare Interpolation festgelegt. Der Grobgitterraum entsteht in der gegebenen Situation durch m -fache Vergrößerung eines Gitters mit $N = m \cdot n + 1$ inneren Knoten als Bildraum des Einbettungs-

Lagrangefunktional gewählt wird,

$$(\Delta \mathbf{u}^k, \Delta \mathbf{a}^k) = \underset{(\Delta \mathbf{u}, \Delta \mathbf{a}) \in \mathcal{D}_\alpha^k}{\operatorname{argmin}} \ell_{\rho^k}(\mathbf{u}^k + \Delta \mathbf{u}, \mathbf{a}^k + \Delta \mathbf{a}, \boldsymbol{\lambda}^k).$$

Dieser Schritt erfordert nur die Auswertung des Lagrangefunktionals für die mit E , Σ , \mathcal{A} und \mathcal{B} indizierten Korrekturen, da die übrigen Funktionswerte aus der Berechnung der Teilraumkorrekturen bekannt sind. Der erste Iterationsschritt unterscheidet sich jedoch von den nachfolgenden darin, dass *ausschließlich* die Grobgitterkorrektur berechnet wird. Die Aktualisierung des Lagrangeparameters erfolgt unabhängig von der Wahl der Korrektur $(\Delta \mathbf{u}^k, \Delta \mathbf{a}^k)$ nach der Aufdatierung

$$(\mathbf{u}^{k+1}, \mathbf{a}^{k+1}) = (\mathbf{u}^k, \mathbf{a}^k) + (\Delta \mathbf{u}^k, \Delta \mathbf{a}^k)$$

gemäß

$$\boldsymbol{\lambda}^{k+1} = \boldsymbol{\lambda}^k + \gamma \rho^k \mathbf{c}(\mathbf{u}^{k+1}, \mathbf{a}^{k+1})$$

mit einem vorgegebenen und festen Verfahrensparameter $\gamma > 0$.

Für die Minimierung des Lagrangefunktionals zur Berechnung der Teilraumkorrekturen wird in einer MATLAB-Implementierung das in der Funktion `fmincon` der *optimization toolbox* realisierte SQP-Verfahren (in der `medium-scale`-Einstellung) mit Intervallnebenbedingungen und BFGS-Aufdatierung der Hessematrix verwendet, [67].

Das beschriebene Verfahren wird im folgenden Algorithmus zusammengefasst. Die auftauchenden Werte der Verfahrensparameter veranschaulichen die Größenordnung dieser Parameter in den verschiedenen zum Testproblem durchgeführten Rechnungen.

3.2.1 Algorithmus

wähle Raumzerlegung $\{(V_i, P_i, R_i) : i = 0, \dots, p\}$

wähle $\alpha = 0.75 \in (0, 1]$ und $\gamma = 0.5 \in (0, 1]$

setze $\rho^0 = 10^{-6}$, $\underline{\rho} = 10^{-8}$ und $\bar{\rho} = 10^{-4}$

setze $\underline{a}_i = 0$, $\bar{a}_i = 2.5$ und $\underline{u}_i = 0$, $\bar{u}_i = 15$ für $i = 1, \dots, N$

setze $a_i^0 = 1$, $u_i^0 = 0$ und $\lambda_i^0 = 0$ für $i = 1, \dots, N$

für $k = 0, 1 \dots$

falls $k > 0$

für $i = 0, \dots, p$

berechne

$$(\mathbf{v}^{i,k}, \mathbf{b}^{i,k}) = \underset{\substack{\underline{\mathbf{u}} - \mathbf{u}^k \leq \hat{\mathbf{P}}_i \mathbf{v} \leq \bar{\mathbf{u}} - \mathbf{u}^k \\ \underline{\mathbf{a}} - \mathbf{a}^k \leq \hat{\mathbf{P}}_i \mathbf{b} \leq \bar{\mathbf{a}} - \mathbf{a}^k}}{\text{fmincon}} \ell_{\rho^k}(\mathbf{u}^k + \hat{\mathbf{P}}_i \mathbf{v}, \mathbf{a}^k + \hat{\mathbf{P}}_i \mathbf{b}, \boldsymbol{\lambda}^k)$$

in $\mathbb{R}^{n_i} \times \mathbb{R}^{n_i}$

setze $\Delta \mathbf{u}^{i,k} = \hat{\mathbf{P}}_i \mathbf{v}^{i,k}$ und $\Delta \mathbf{a}^{i,k} = \hat{\mathbf{P}}_i \mathbf{b}^{i,k}$

bestimme $(\Delta \mathbf{u}^k, \Delta \mathbf{a}^k) = \underset{(\Delta \mathbf{u}, \Delta \mathbf{a}) \in \mathcal{D}_\alpha^k}{\text{argmin}} \ell_{\rho^k}(\mathbf{u}^k + \Delta \mathbf{u}, \mathbf{a}^k + \Delta \mathbf{a}, \boldsymbol{\lambda}^k)$

sonst

berechne

$$(\mathbf{v}^0, \mathbf{b}^0) = \underset{\substack{\underline{\mathbf{u}} - \mathbf{u}^0 \leq \hat{\mathbf{P}}_0 \mathbf{v} \leq \bar{\mathbf{u}} - \mathbf{u}^0 \\ \underline{\mathbf{a}} - \mathbf{a}^0 \leq \hat{\mathbf{P}}_0 \mathbf{b} \leq \bar{\mathbf{a}} - \mathbf{a}^0}}{\text{fmincon}} \ell_{\rho^0}(\mathbf{u}^0 + \hat{\mathbf{P}}_0 \mathbf{v}, \mathbf{a}^0 + \hat{\mathbf{P}}_0 \mathbf{b}, \boldsymbol{\lambda}^0)$$

in $\mathbb{R}^{n_0} \times \mathbb{R}^{n_0}$

setze $\Delta \mathbf{u}^0 = \hat{\mathbf{P}}_0 \mathbf{v}^0$ und $\Delta \mathbf{a}^0 = \hat{\mathbf{P}}_0 \mathbf{b}^0$

setze $\mathbf{u}^{k+1} = \mathbf{u}^k + \Delta \mathbf{u}^k$ und $\mathbf{a}^{k+1} = \mathbf{a}^k + \Delta \mathbf{a}^k$

setze $\boldsymbol{\lambda}^{k+1} = \boldsymbol{\lambda}^k + \gamma \rho^k \mathbf{c}(\mathbf{u}^{k+1}, \mathbf{a}^{k+1})$

setze

$$\rho^{k+1} = \begin{cases} 1.05 \rho^k, & \text{falls } \|\mathbf{c}(\mathbf{u}^{k+1}, \mathbf{a}^{k+1})\| > 0.75 \|\mathbf{c}(\mathbf{u}^k, \mathbf{a}^k)\| \\ \rho^k, & \text{sonst} \end{cases}$$

setze $\rho^{k+1} = \min\{\bar{\rho}, \max\{\underline{\rho}, \rho^{k+1}\}\}$

Ein numerischer Testfall

Auf einem Gitter mit N inneren Knoten und Maschenweite $\frac{1}{N+1}$ wird $\hat{\mathbf{u}}$ als diskrete Lösung der Randwertaufgabe zur Quelldichte $f_i = 100$ und Parameterwerten $\hat{a}_i = 1 + x_i^2$ gewählt ($i = 1, \dots, N$). Die Identifikationsaufgabe wird mit dem Re-

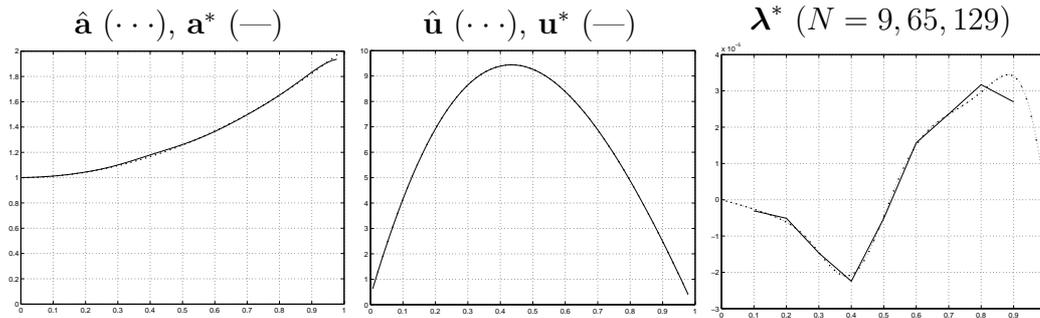


Abbildung 3.2.3: Ausgangswerte $\hat{\mathbf{a}}$, $\hat{\mathbf{u}}$ und KKT-Lösung

gularisierungsparameter $\eta = 5 \cdot 10^{-4}$ angesetzt. Diese Regularisierung führt wie in Abbildung 3.2.3 zu sehen zu einer geringen Abflachung des streng monoton wachsenden Parameters mit einer maximalen Differenz von 0.04 am rechten Intervallrand zwischen dem Ausgangsparameter $\hat{\mathbf{a}}$ und der regularisierten Lösung \mathbf{a}^* , Abbildung 3.2.4. Die Differenz in \mathbf{u} ist noch geringer. Das rechte Diagramm in Abbildung 3.2.3

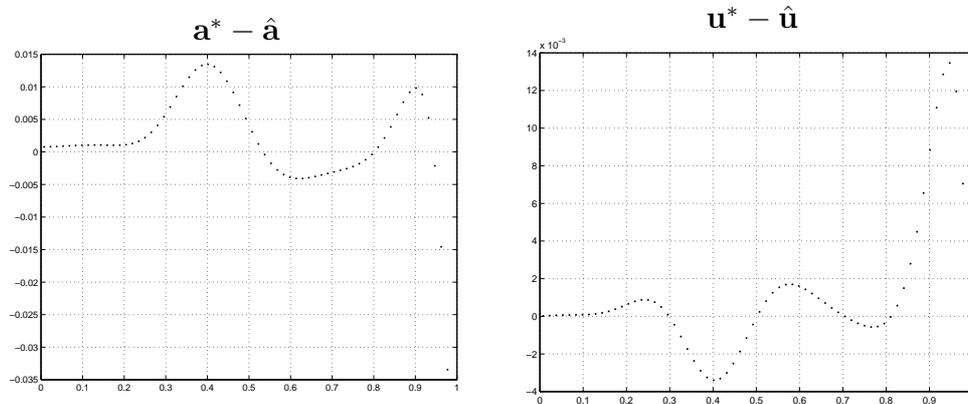


Abbildung 3.2.4: Differenz zwischen Ausgangswerten und KKT-Lösung

zeigt den Lagrangeparameter für verschiedene Diskretisierungen und dokumentiert dessen Skalierungsunabhängigkeit von der Maschenweite.

Die im Weiteren vorgestellten Rechnungen gehen vom Startwert $a_i = 1$, $u_i = 0$ und $\lambda_i = 0$ für $i = 1, \dots, N$ aus. Abbildung 3.2.5 veranschaulicht das Konvergenzverhalten für den einfachsten Fall einer Raumzerlegung in zwei Teilgebiete (ohne

Grobgitterkorrektur) mit $N = 129$ und einem Überlappbereich, der von den Knoten 60 bis 70 gebildet wird.

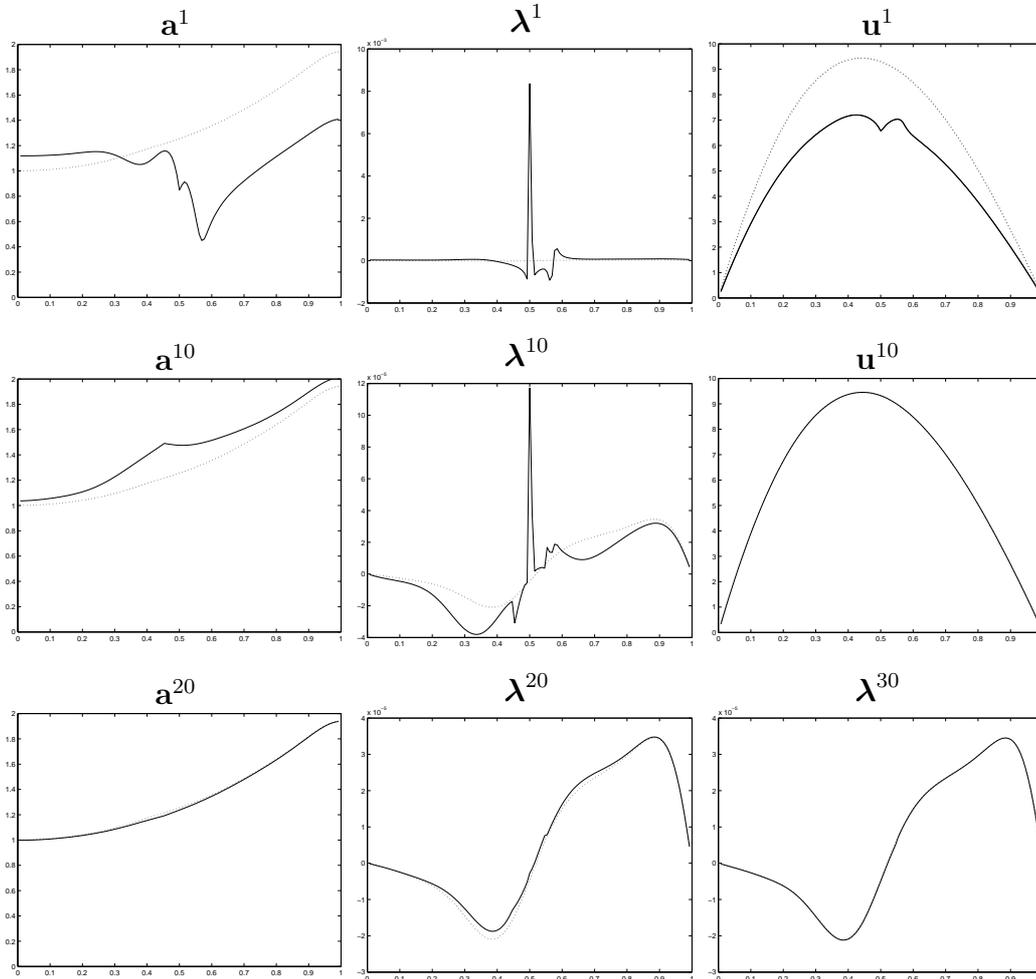


Abbildung 3.2.5: Iterierte für Verfahren mit zwei Teilgebietsräumen ohne Grobgitterraum ($N = 129$, $\alpha = \frac{3}{4}$, $\gamma = \frac{2}{5}$, $\rho^0 = 10^{-6}$, gewichtet mit \mathbf{E}_i)

Typisch ist für die gegebene Aufgabe die unterschiedliche Konvergenzgeschwindigkeit in den Problemvariablen \mathbf{u} , \mathbf{a} und $\boldsymbol{\lambda}$. Beim ungewichteten Verfahren, d. h. ohne die Aufdatierung der primalen Variablen mit ausgleichenden Matrizen \mathbf{E}_i , ist das Oszillationsverhalten wie es Abbildung 3.2.6 veranschaulicht deutlich stärker ausgeprägt als bei dem mit \mathbf{E}_i gewichteten Verfahren. In den Spektren der Jacobimatrix des Iterationsoperators $Q = \partial Q_{\rho}^{\alpha, \gamma}((\mathbf{u}^*, \mathbf{a}^*), \boldsymbol{\lambda}^*)$, siehe (2.4.21), zeigt sich auch ein größerer Anteil von Eigenwerten mit negativem Realteil, Abbildungen 3.2.8. Unabhängig von der Raumzerlegung führt eine zu große Wahl von ρ zu einem schlechten

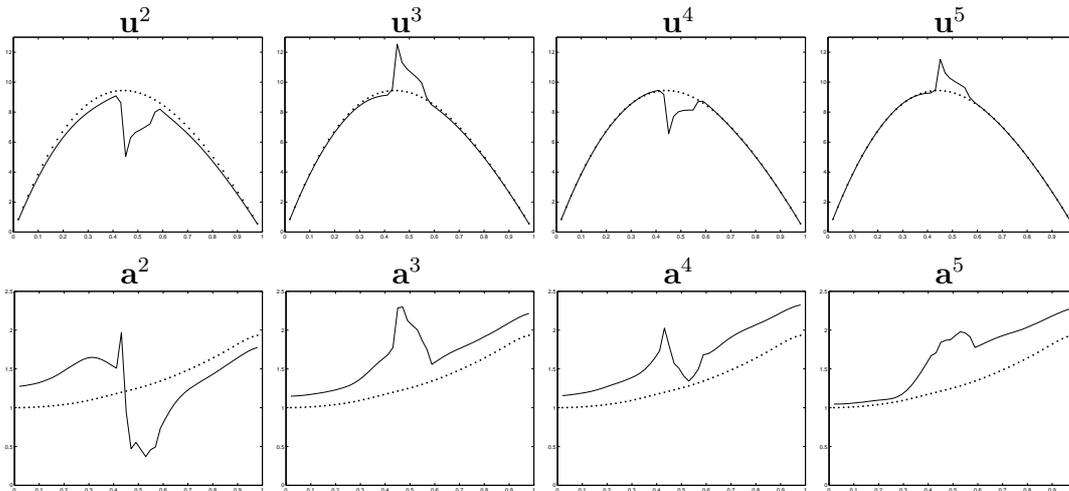


Abbildung 3.2.6: Oszillation im Überlappgebiet beim ungewichteten Verfahren

Konvergenzverhalten, insbesondere im Lagrangeparameter λ , in dem starke Oszillationen auftreten, vgl. Abbildung 3.2.7. Für das Beispiel ist eine Wahl von ρ^0 im

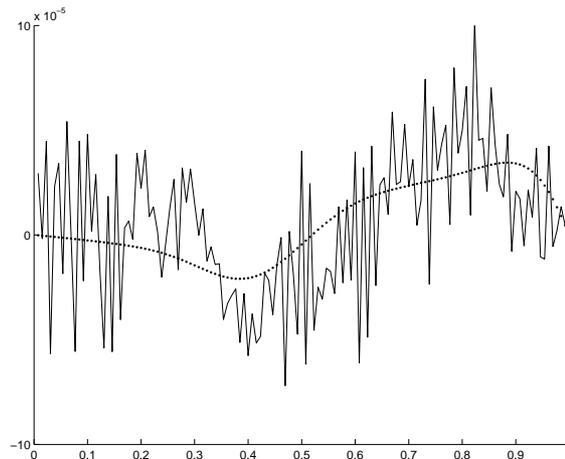


Abbildung 3.2.7: λ^5 für $\rho^0 = 0.01$ (Standardverfahren ohne Raumzerlegung)

Intervall $[10^{-6}, 10^{-5}]$ ein geeigneter Startwert des Strafparameters.

Die Abbildungen 3.2.8, 3.2.9 und 3.2.10 zeigen die mit der MATLAB-Funktion `eig` berechneten Spektren von Q für verschiedene Raumzerlegungen und unterschiedliche Verfahrensparameter. Die Spektren ohne Wichtungen zeigen gegenüber den gewichteten deutlich größere Anteile von Eigenwerten mit negativem Realteil. Außerdem können die Parameter α und γ im letzteren Fall größer, d. h. näher an 1 gewählt werden, womit der Spektralradius von Q verkleinert werden kann. Gegebenfalls ist

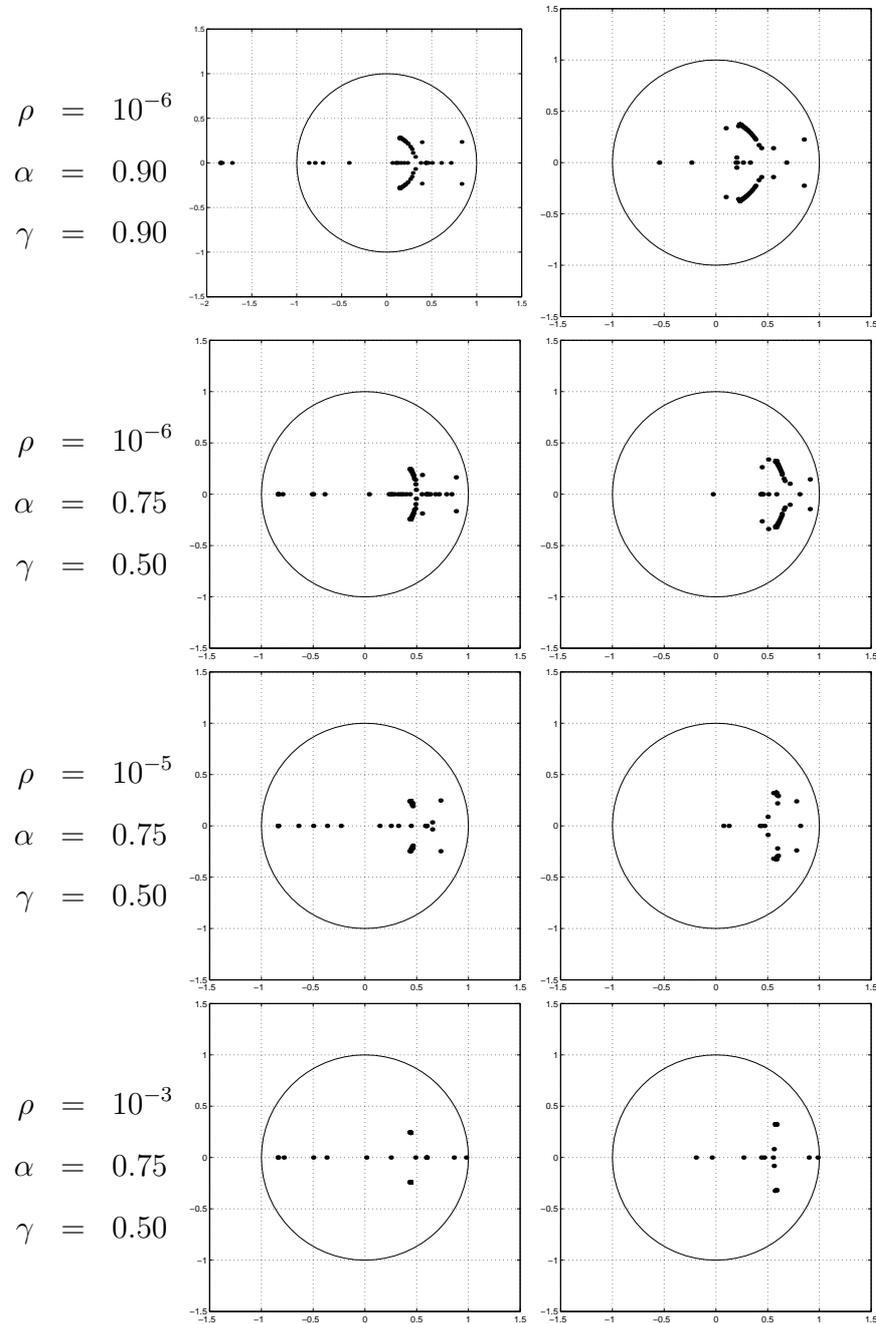


Abbildung 3.2.8: $\text{spek}(Q) \subset \mathbb{C}$ ohne (links) und mit Wichtungen \mathbf{E}_i für eine Raumerlegung in zwei Teilgebietsräume ohne Grobgitterraum

sogar eine Überrelaxation $\gamma > 1$ möglich, oben rechts in Abbildung 3.2.9. In Abbildung 3.2.8 ist zu erkennen, dass beim Übergang von $\rho = 10^{-6}$ auf $\rho = 10^{-3}$ bei sonst gleicher Wahl der Verfahrensparameter einige Eigenwerte nahe an die 1 heranrücken und damit auch der Spektralradius, was das schlechte Konvergenzverhalten für großes ρ erklärt.

Anhand der Raumzerlegung in zwei Teilgebietsräume und Grobgitterraum wird kurz auf die Bedingungen (2.4.23) und (2.4.24) aus Lemma 2.4.14 als hinreichende Bedingung für $\text{sprd}(Q) < 1$ eingegangen. Für den im zweiten Kapitel untersuchten ungewichteten Fall ist mit der Parameterwahl $\alpha = 0.75$ und $\gamma = 0.50$ die Spektralbedingung für Q nicht erfüllt; dies gilt bereits für die Bedingung $\text{sprd}(I_n - H^\sharp H) < 1$, linke Darstellung in Abbildung 3.2.11. Diese ist für die gewichtete Variante jedoch gegeben, ebenso gilt $\text{spek}(M_\rho^\gamma(s)) \subset \mathcal{K}_1$ für die vorgeschlagenen *worst-case*-Fälle $s = \pm 1$, wie in Abbildung 3.2.12 zu sehen ist. Der Fall mit Wichtungen \mathbf{E}_i mit der Folge eines unsymmetrischen $\mathbf{H}^\sharp = \sum_{i=1}^p \mathbf{E}_i \mathbf{H}^{-\mathbf{P}_i}$ ist zwar nicht im betreffenden Lemma berücksichtigt, allerdings gilt dort Aussage (iv) mit dem gleichen Beweis, wenn zusätzlich die Regularität von \mathbf{H}^\sharp verlangt wird, was hier erfüllt ist.

Die Rechnungen zu verschiedenen Raumzerlegungen mit Grobgitter- und 2 bis 16 Teilgebietsräumen zeigen, dass in dem dargestellten Verfahren ein *speedup*-Effekt erreicht werden kann, und bei den Zerlegungen mit mindestens 4 Teilgebietsräumen ein günstigeres Verhältnis des erbrachten *effektiven Aufwandes* zur erzielten Genauigkeit als im Verfahren ohne Raumzerlegung erreicht wird. Bezeichnet ν_i^k den Aufwand zur Bestimmung der Teilraumkorrektur im Raum W_i im k -ten Schritt gemessen in der Anzahl benötigter Zielfunktionsaufrufe des Lösers `fmincon`, so ermittelt sich der effektive Aufwand, der zur Berechnung der k -ten Iterierten nötig war mit

$$\begin{aligned} A^0 &= 0 \\ A^k &= A^{k-1} + \max\{\nu_i^k : i = 0, \dots, p\} \quad k = 1, 2, \dots \end{aligned}$$

Zur Darstellung des *speedup*-Effektes ist in Abbildung 3.2.13 der Maximumfehler in den Iterierten \mathbf{u}^k , \mathbf{a}^k und $\boldsymbol{\lambda}^k$ gegenüber dem effektiven Aufwand aufgetragen.

Tabelle 3.1 gibt die Dimensionen der verwendeten Teilräume der Raumzerlegungen, zu denen Rechnungen angestellt wurden, wieder. Die Rechnungen sind tabellarisch

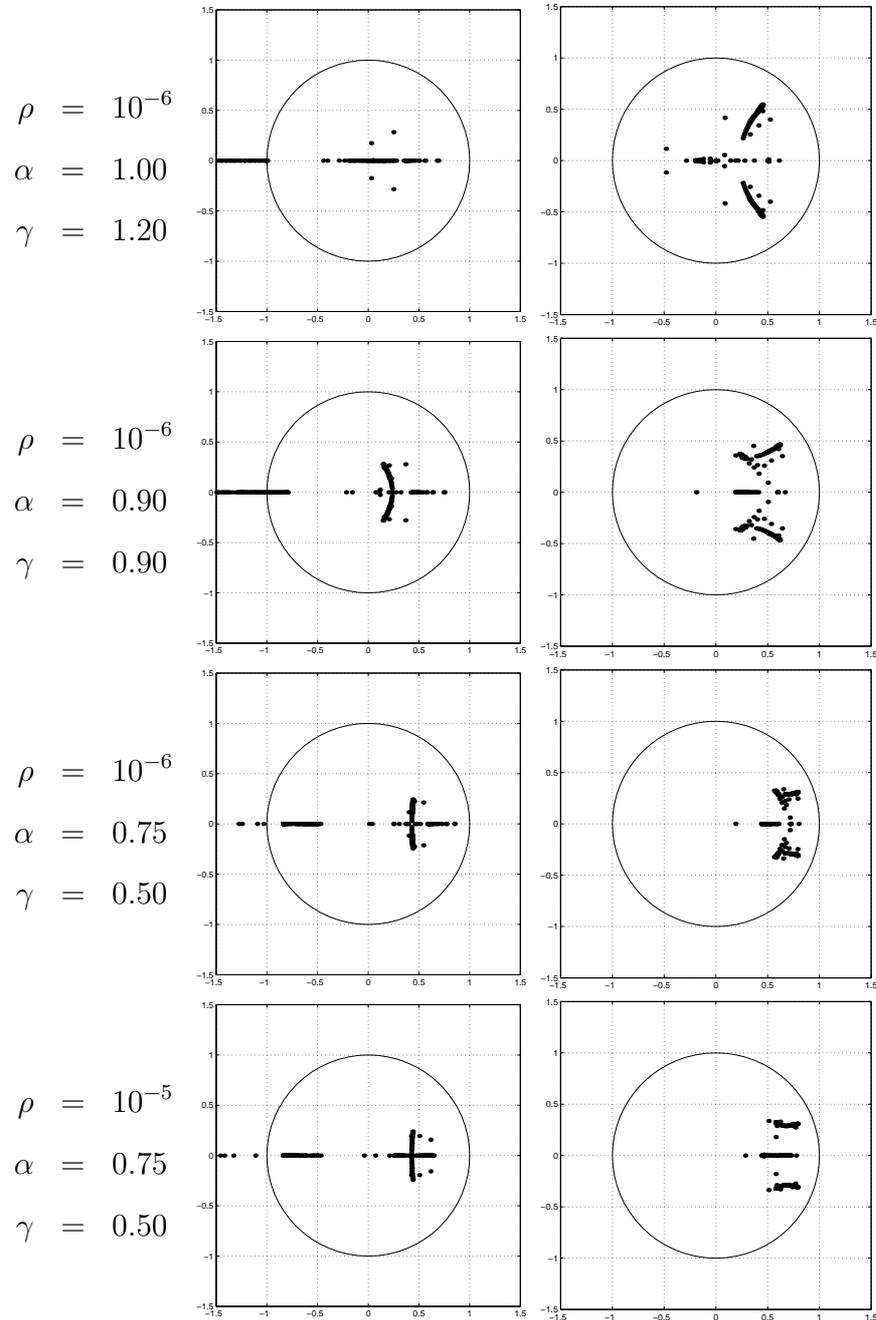


Abbildung 3.2.9: $\text{spek}(Q) \subset \mathbb{C}$ ohne (links) und mit Wichtungen \mathbf{E}_i für eine Raumzerlegung in zwei Teilgebietsräume und einen Grobgitterraum

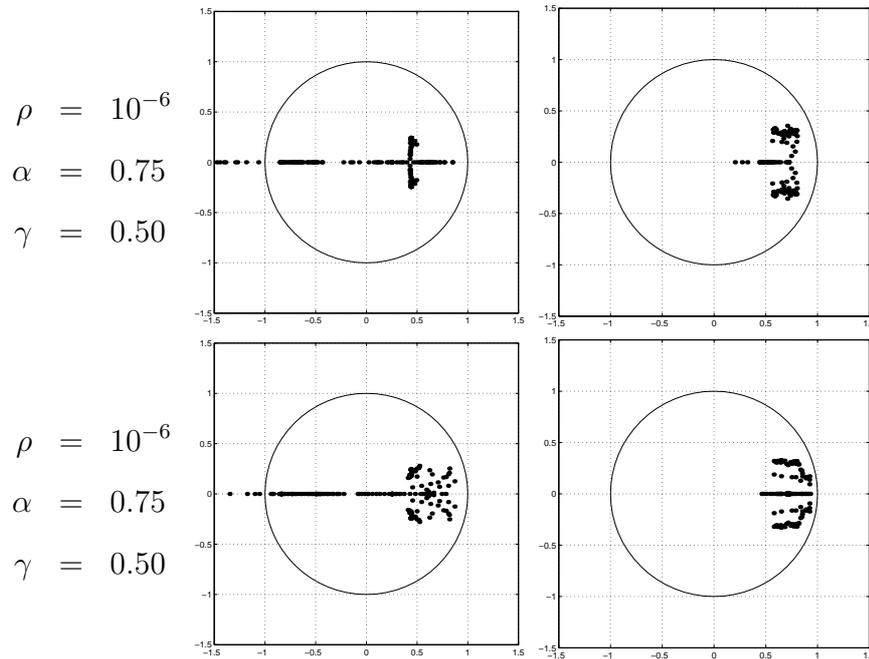


Abbildung 3.2.10: $\text{spek}(Q) \subset \mathbb{C}$ ohne (links) und mit Wichtungen \mathbf{E}_i für Raumzerlegung in Grobgitterraum und 4 (oben) bzw. 16 Teilgebietsräume

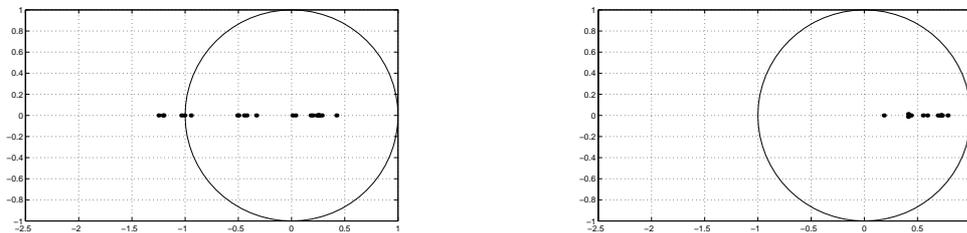


Abbildung 3.2.11: Spektrum von $I_n - H^\#H$ für eine Raumzerlegung in Grobgitterraum und 2 Teilgebietsräume, $\alpha = 0.75$, $\gamma = 0.50$ im ungewichteten (links) und gewichteten Fall

p	$\dim V_0^P$	$\dim V_i^P, i > 0$	α	γ
0	129	—	1.00	1.00
2	33	66, 67	0.75	0.50
4	33	39, 40	0.75	0.40
8	17	24	0.75	0.40
16	9	12	0.65	0.20

Tabelle 3.1: Anzahl der Teilgebietsräume, Anzahl der Knoten des Grobgitterraumes und der Teilgebietsräume, Verfahrensparameter verwendeter Raumzerlegungen

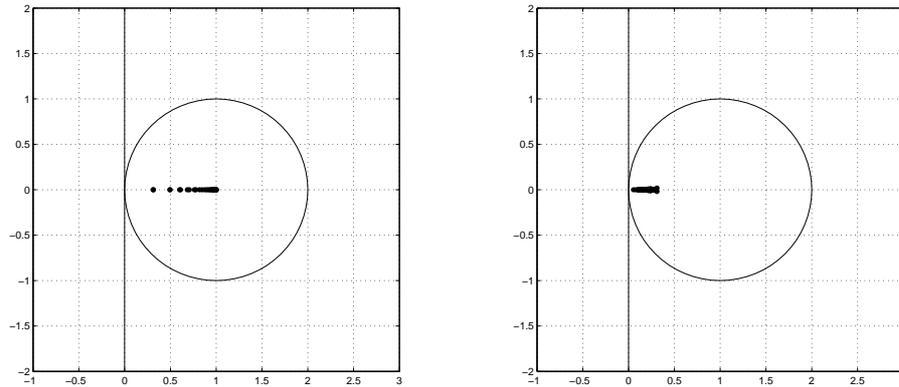


Abbildung 3.2.12: $\text{spek}(M_\rho^\gamma(1))$ (links) und $\text{spek}(M_\rho^\gamma(-1))$ für den gewichteten Fall einer Raumzerlegung in Grobgitterraum und 2 Teilgebietsräume mit $\alpha = 0.75$ und $\gamma = 0.50$

im Anhang B dokumentiert.

3.2.2 Der zweidimensionale Fall $\Omega \subset \mathbb{R}^2$

Die Diskretisierung der elliptischen Differentialgleichung 3.2.1 für den Fall $\Omega = (0, 1)^2 \subset \mathbb{R}^2$ wird über einer Triangulation wie in Abbildung 3.2.14 angedeutet mit linearen Dreieckselementen realisiert. Dort ist bereits das Prinzip der Raumzerlegung für den realisierten Testfall angedeutet. Die Freiheitsgrade für den Modellzustand und den Parameter beziehen sich wieder auf die gleichen Gitterknoten, wobei bei der Diskretisierung des Parameters randbenachbarte Basisfunktionen wie im eindimensionalen Fall konstant zum Rand fortgesetzt werden, wie es im rechten Diagramm der Abbildung 3.2.14 zu sehen ist. Das „algebraisierte“ Problem lässt sich ähnlich wie in einer Raumdimension darstellen. Die Diskretisierung der partiellen Differentialgleichung führt wieder auf ein lineares Gleichungssystem

$$\mathbf{A}\mathbf{u} = h^2\mathbf{f},$$

während die Diskretisierung des Zielfunktionals die Gestalt

$$E_\eta(\mathbf{u}, \mathbf{a}) = h^2\|\mathbf{u} - \hat{\mathbf{u}}\|^2 + \frac{\eta}{2} (\|\mathbf{D}_x\mathbf{a}\|^2 + \|\mathbf{D}_y\mathbf{a}\|^2)$$

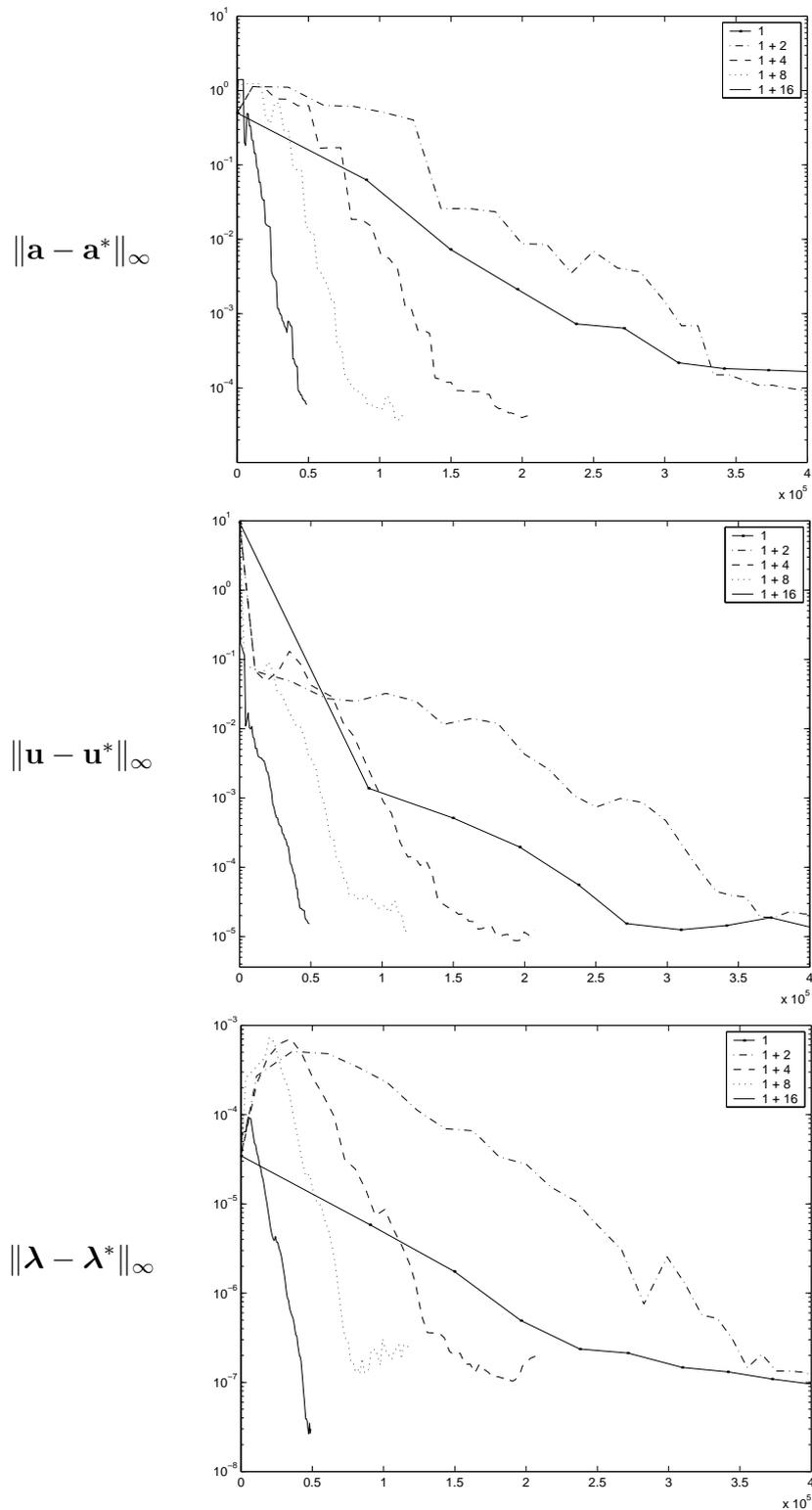


Abbildung 3.2.13: Fehler aufgetragen gegenüber dem effektiven Aufwand für das Verfahren ohne Zerlegung und mit Zerlegung in 2, 4, 8 und 16 Teilgebietsräume und Grobitterraum

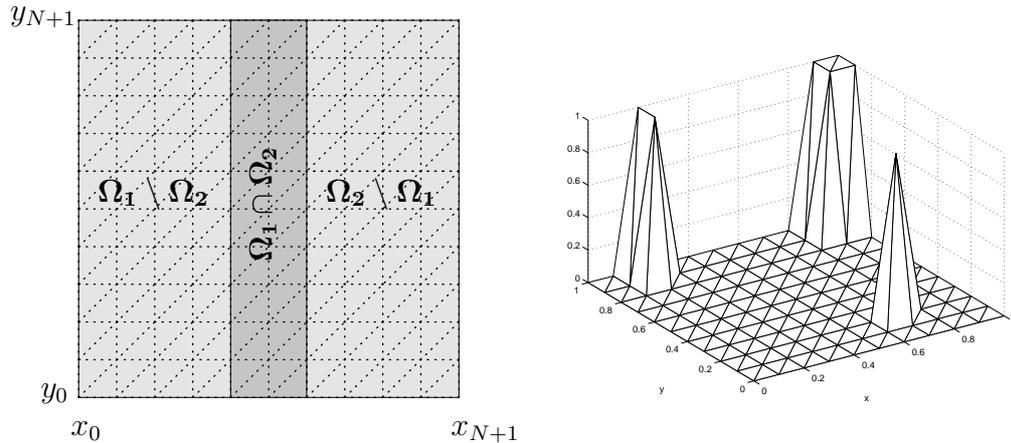


Abbildung 3.2.14: Gitter und FE-Basisfunktion

annimmt. Mit der Nebenbedingung

$$\mathbf{c}(\mathbf{u}, \mathbf{a}) = \mathbf{f} - \frac{1}{h^2} \mathbf{A} \mathbf{u} = 0$$

wird die skalierte Lagrangefunktion nun mittels

$$\ell_\rho(\mathbf{u}, \mathbf{a}, \boldsymbol{\lambda}) = \frac{1}{h^2} E_\eta(\mathbf{u}, \mathbf{a}) + \langle \boldsymbol{\lambda}, \mathbf{c}(\mathbf{u}, \mathbf{a}) \rangle + \frac{\rho}{2} \|\mathbf{c}(\mathbf{u}, \mathbf{a})\|^2$$

gebildet. Hierbei sind \mathbf{u} und \mathbf{a} die nach einer geeigneten Indizierung gewonnenen Vektoren der Freiheitsgrade von u und a der Dimension N^2 und \mathbf{D}_z geeignet definierte Differenzenoperatoren zur Darstellung der diskreten Ableitung in x - bzw. y -Richtung. Der Regularisierungsparameter ist mit $\eta = 10^{-4}$ angesetzt.

Es wird hier lediglich die Raumzerlegung in zwei Teilgebietsräume, wie in Abbildung 3.2.14 angedeutet, behandelt und zwei Rechnungen mit unterschiedlich breitem Überlapp gegenüber gestellt. In dem betrachteten numerischen Testfall wird das Gitter mit $N = 12$, d. h. mit $N^2 = 144$ inneren Knoten eines äquidistanten Gitters der Maschenweite $h = \frac{1}{N+1}$ diskretisiert. Der breite Überlappbereich umfasst die Knoten $\{(ih, jh) : 5 \leq i \leq 8, 1 \leq j \leq 12\}$, was einem Drittel der Freiheitsgrade entspricht, und der schmale die Knoten $\{(ih, jh) : 6 \leq i \leq 7, 1 \leq j \leq 12\}$ mit einem Sechstel der Freiheitsgrade. Die Quelledichte ist mit $f(x) = 100$ gegeben, und der zu identifizierende Parameter wird auf den inneren Knoten mit

$$\hat{a}(ih, jh) = \hat{a}_{ij} = (i-1)(j-1)h^2 + \frac{1}{2}, \quad i, j = 1, \dots, N$$

angesetzt und konstant zum Rand fortgesetzt, linkes Diagramm in Abbildung 3.2.15. Der „Messwert“ \hat{u} ist die Lösung der diskretisierten Differentialgleichung zum Pa-

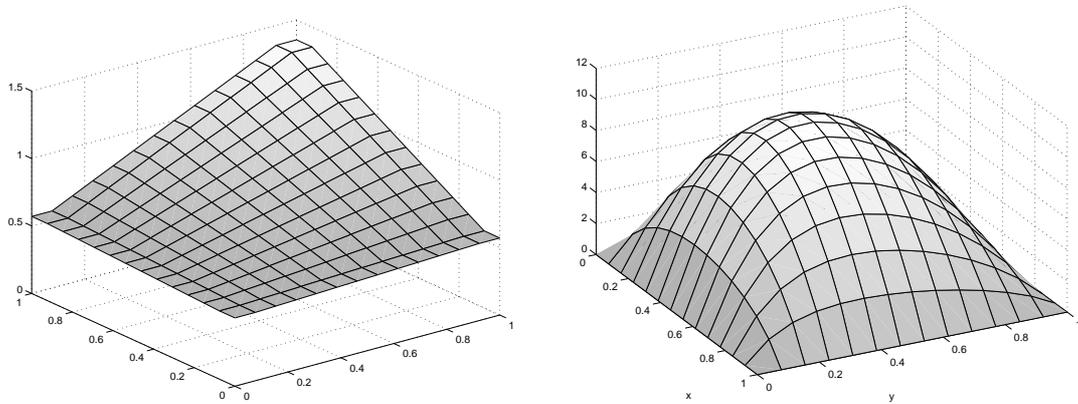


Abbildung 3.2.15: Parameter \hat{a} und Messwert \hat{u}

rameter \hat{a} und der gegebenen Quelldichte. Als Startwert dient

$$a_{ij}^0 = 1, \quad u_{ij}^0 = 0 \quad \text{und} \quad \lambda_{ij}^0 = 0 \quad \text{für} \quad 1 \leq i, j \leq N.$$

In beiden Rechnungen wird eine schwache Dämpfung mit $\alpha = 0.95$ und $\gamma = 0.95$ verwendet.

In Abbildung 3.2.16 sind Iterierte \mathbf{a}^k des Parameters zu den beiden Raumzerlegungen gegenüber gestellt. Es ist nicht überraschend, dass das Verfahren mit größerem Überlapp bei gleicher Iterationszahl bessere Ergebnisse liefert.

Die hier für den zweidimensionalen elliptischen Fall vorgestellten Ergebnisse unterscheiden sich in einem Detail von dem allgemeinen vorgestellten Raumzerlegungsverfahren. Die Minimierung in den Teilgebietsräumen über Ω_i bezieht im Lagrangefunktional nicht alle Restriktionen, die den jeweiligen Teilraum betreffen ein, sondern nur diejenigen, die dem bei einem Schwarz-Verfahren entstehenden Teilsystem

$$\begin{aligned} -\nabla a(x) \nabla u_i^k(x) &= f(x) & x \in \hat{\Omega}_i \\ u_i^k(x) &= u^{k-1}(x) & x \in \partial \hat{\Omega}_i \end{aligned}$$

entsprechen. Die Gebiete $\hat{\Omega}_i \supset \Omega_i$ sind sozusagen Erweiterungen der Ω_i um eine Gitterlinie, wie es in Abbildung 3.2.17 angedeutet ist. Dadurch entfallen Restriktionen, in denen Freiheitsgrade des Teilraums ausschließlich auf Nebendiagonalen des

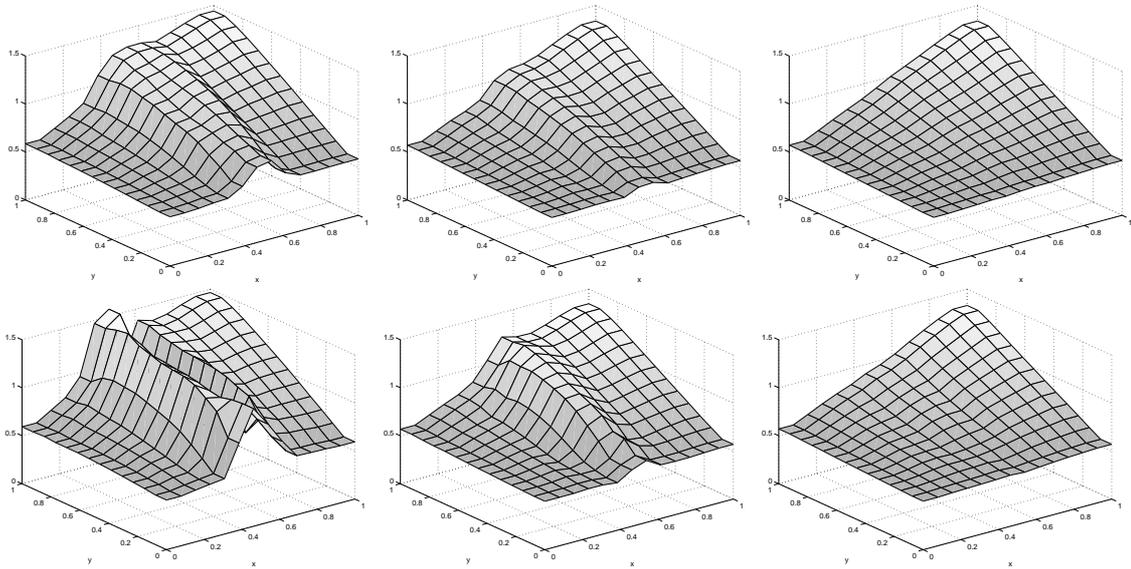


Abbildung 3.2.16: Der Parameter nach 2, 4 und 6 Iterationen mit breitem (oben) und schmalen Überlapp

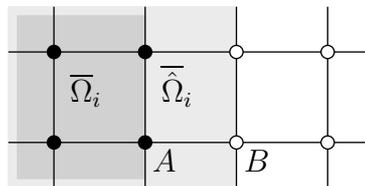


Abbildung 3.2.17: Die Gleichung zum Differenzenstern um B taucht nicht im Gleichungssystem zu Ω_1 auf, aber B liefert Randwert für A

linearen Gleichungssystems auftauchen. Diese Modifikation begründet sich in der einfacheren Realisierbarkeit und wäre auch für reale Problemstellungen relevant, da bei der Aufstellung der Teilsysteme bestehende Implementierungen zur Diskretisierung der Teilsysteme verwendet werden könnten.

Die in den Abbildungen 3.2.18 und 3.2.19 dargestellten Differenzen $\mathbf{a}^k - \hat{\mathbf{a}}$ und $\mathbf{u}^k - \hat{\mathbf{u}}$ stellen nicht die Differenz zur (regularisierten) optimalen Lösung dar, sondern zu dem „wahren“ Ausgangsparameter $\hat{\mathbf{a}}$ bzw. dem entsprechenden Modellzustand $\hat{\mathbf{u}}$. Die Regularisierung bewirkt das zu erwartende geringe Abflachen des Parameters. Es ist zu erkennen, dass die Iteration mit breitem Überlapp nach spätestens 10 und mit schmalen Überlapp nach etwa 15 Gesamtschritten die Lösung annähernd berechnet hat.

Ein multiplikatives Verfahren (also mit einer sequentiellen Struktur, in der die Teilraumkorrekturen mit unmittelbarer Aufdatierung der aktuellen Iterierten nacheinander statt parallel berechnet werden), das auf dem Schwarz-Verfahrens beruht, ist in [59] vorgestellt worden.

3.3 Identifikation eines parabolischen Modells

In praktischen Anwendungen ist häufig die Identifikation instationärer Prozesse notwendig. Können diese über einen entsprechend langen Zeitraum beobachtet werden, stellt sich bei zeitlich invarianten Modellparametern häufig eine bessere Datenlage als im stationären Fall zur Identifikation dieser dar. Sind die Parameter jedoch ebenfalls zeitlich veränderlich, führt dies zu einer weiteren Vergrößerung der zu lösenden diskretisierten Optimierungsaufgabe.

Betrachtet wird in diesem Zusammenhang auf dem Gebiet $\Omega = (0, 1) \subset \mathbb{R}^1$ das folgende parabolische Modellproblem.

$$\begin{aligned} \partial_t u(t, x) - \partial_x(a(t, x)\partial_x u(t, x)) &= f(t, x) & (t, x) \in (0, T] \times \Omega \\ u(0, x) &= 0 & x \in \Omega \\ u(t, 0) = u(t, 1) &= 0 & t \in (0, T] \end{aligned}$$

Der Parameter a wird als zeitvariant angenommen und als Kriterium zu dessen

3.3 Identifikation eines parabolischen Modells

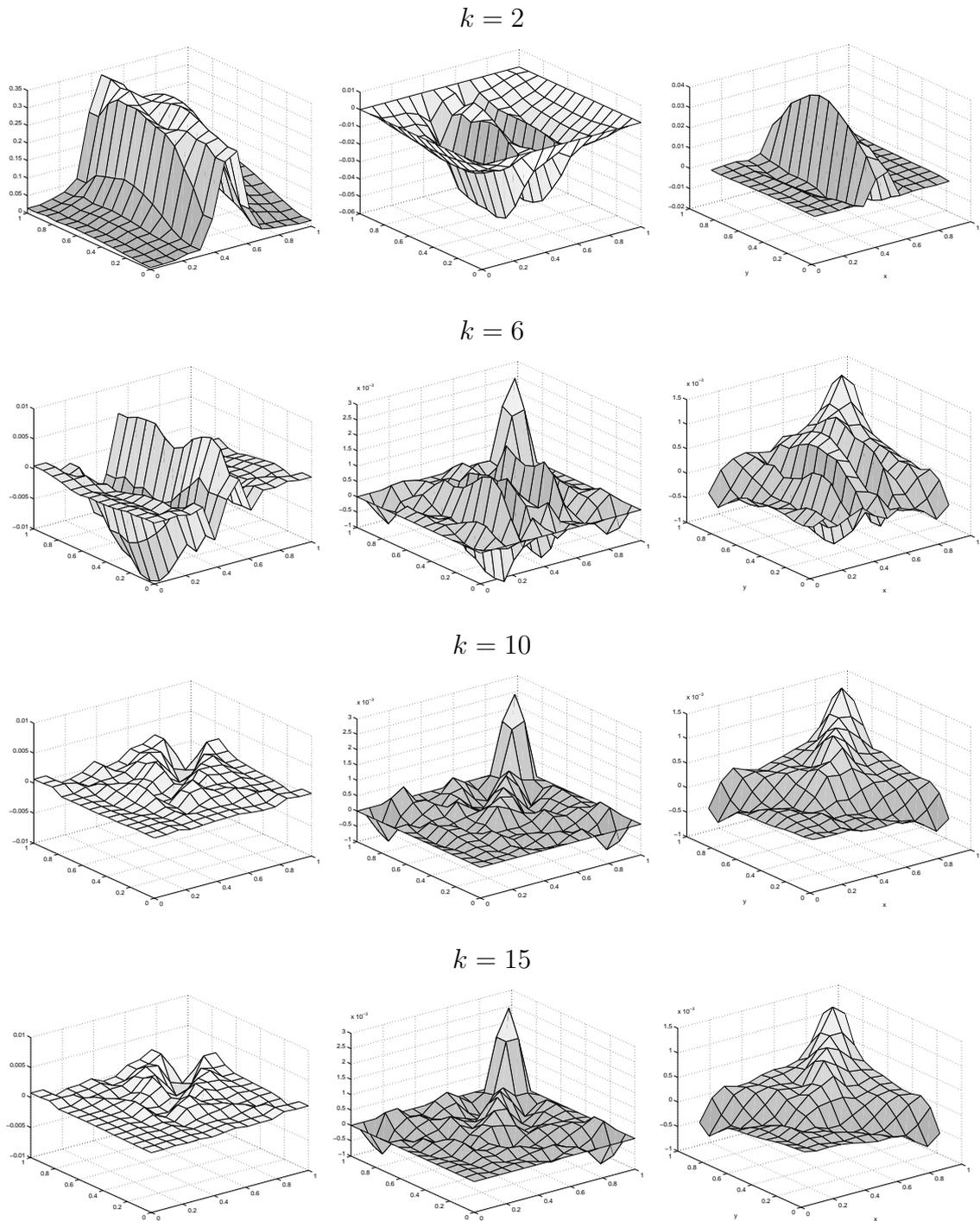


Abbildung 3.2.18: $\mathbf{a}^k - \hat{\mathbf{a}}$, $\mathbf{u}^k - \hat{\mathbf{u}}$ und λ^k für $k = 2, 6, 10, 15$ (breiter Überlapp)

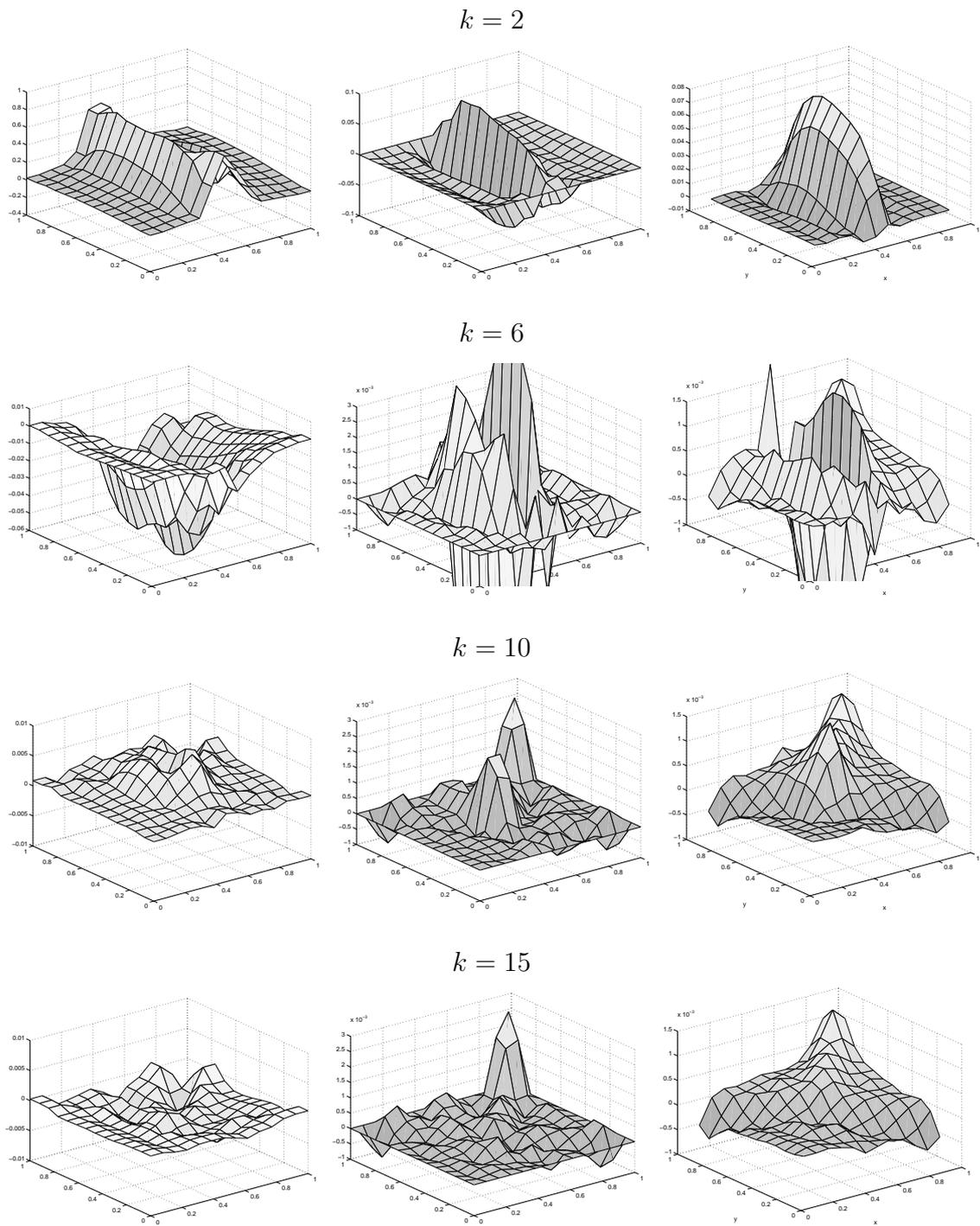


Abbildung 3.2.19: $\mathbf{a}^k - \hat{\mathbf{a}}$, $\mathbf{u}^k - \hat{\mathbf{u}}$ und λ^k für $k = 2, 6, 10, 15$ (schmaler Überlapp)

Identifikation wird das Zielfunktional

$$E_\eta(a, u) = \int_0^T \int_\Omega (u(t, x) - \hat{u}(t, x))^2 dx dt + \eta \int_0^T \int_\Omega \|\nabla_x a(t, x)\|^2 dx dt$$

angesetzt. Die Ortsdiskretisierung geschieht analog zum eindimensionalen elliptischen Problem aus Abschnitt 3.2.1 Die entstehende Anfangswertaufgabe wird auf einem äquidistanten Zeitgitter der Schrittweite $\tau = \frac{T}{M}$ mittels des Crank–Nicholson–Verfahrens diskretisiert, so dass man ausgehend vom diskretisierten Anfangswert $\mathbf{u}_0 = 0$ für den Modellzustand im Zeitpunkt

$$t_j = j\tau \quad (j = 1, \dots, M)$$

das Gleichungssystem

$$\mathbf{c}_j(\mathbf{u}_{j-1}, \mathbf{u}_j, \mathbf{a}_0, \mathbf{a}_T) = \tau \mathbf{f}_{j-\frac{1}{2}} - (\mathbf{u}_j - \mathbf{u}_{j-1}) - \frac{\tau}{2h^2} \mathbf{A}_{j-\frac{1}{2}} (\mathbf{u}_{j-1} + \mathbf{u}_j)$$

für $j = 1, \dots, M$ erhält. Die Matrizen $\mathbf{A}_{j-\frac{1}{2}}$ und Vektoren $\mathbf{f}_{j-\frac{1}{2}}$ sind die Diskretisierungen zu $a((j - \frac{1}{2})\tau, \cdot)$ und $f((j - \frac{1}{2})\tau, \cdot)$ wie im eindimensionalen elliptischen Fall aus Abschnitt 3.2.1. Die zeitliche Abhängigkeit wird hier linear mit

$$a(t, x) = \frac{T-t}{T} a_0(x) + \frac{t}{T} a_T(x)$$

angesetzt, so dass nur a_0 und a_T zu bestimmen sind. Damit besteht auch der Zusammenhang

$$\mathbf{A}_{j-\frac{1}{2}} = \frac{T-t_{j-\frac{1}{2}}}{T} \mathbf{A}_0 + \frac{t_{j-\frac{1}{2}}}{T} \mathbf{A}_T \quad (j = 1, \dots, M)$$

mit $t_{j-\frac{1}{2}} = (j - \frac{1}{2})\tau$, wobei \mathbf{A}_0 und \mathbf{A}_T die aus a_0 und a_T entstehenden Matrizen sind. Das diskretisierte Zielfunktional wird mit

$$E_\eta(\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_M, \mathbf{a}_0, \mathbf{a}_T) = \frac{h\tau}{2} \sum_{j=1}^M \|\mathbf{u}_j - \hat{\mathbf{u}}_j\|^2 + \frac{\eta T}{4h} (\|\mathbf{D}\mathbf{a}_0\|^2 + \|\mathbf{D}\mathbf{a}_T\|^2)$$

mit dem gleichen Differenzenoperator \mathbf{D} wie in Abschnitt 3.2.1 in den vorhandenen

Freiheitsgraden gebildet. Nach einer Skalierung ergibt sich das Lagrangefunktional

$$\begin{aligned} \ell_\rho(\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_M, \mathbf{a}_0, \mathbf{a}_T, \boldsymbol{\lambda}_1, \dots, \boldsymbol{\lambda}_M) = \\ \frac{1}{2} \sum_{j=1}^M \|\mathbf{u}_j - \hat{\mathbf{u}}_j\|^2 + \frac{\eta T}{4\tau h^2} (\|\mathbf{D}\mathbf{a}_0\|^2 + \|\mathbf{D}\mathbf{a}_T\|^2) + \\ \sum_{j=1}^M \langle \boldsymbol{\lambda}_j, \mathbf{c}_j(\mathbf{u}_{j-1}, \mathbf{u}_j, \mathbf{a}_0, \mathbf{a}_T) \rangle + \frac{\rho}{2} \sum_{j=1}^M \|\mathbf{c}_j(\mathbf{u}_{j-1}, \mathbf{u}_j, \mathbf{a}_0, \mathbf{a}_T)\|^2 \end{aligned}$$

der diskretisierten Optimierungsaufgabe.

Die Raumzerlegung wird wieder durch eine überlappende Gebietszerlegung von Ω in zwei Teilgebiete erzeugt, wie es in Abbildung 3.3.1 angedeutet ist.

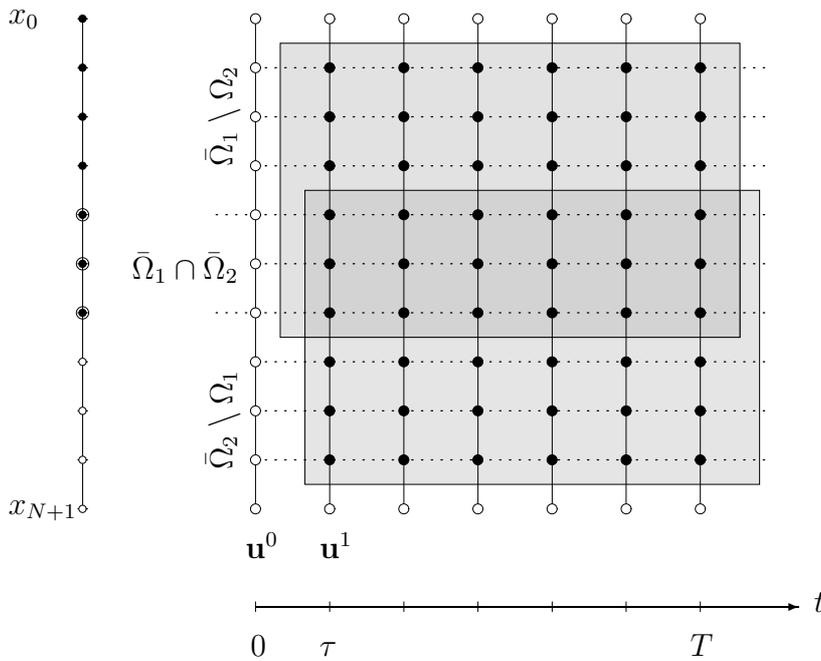


Abbildung 3.3.1: Raumzerlegung im Orts-Zeit-Bereich

Das numerische Testbeispiel wird mit

$$\hat{a}_0(x) = \frac{1}{2} + (1-x)^2 \quad \text{und} \quad \hat{a}_T(x) = \frac{1}{2} + x^2$$

konstruiert, so dass sich auf dem Rechenbereich $[0, T] \times \Omega$ mit $T = 0.25$ die in Abbildung 3.3.2 dargestellte Parameterfläche $\hat{a}(t, x)$ ergibt. Die zeitliche Veränderung

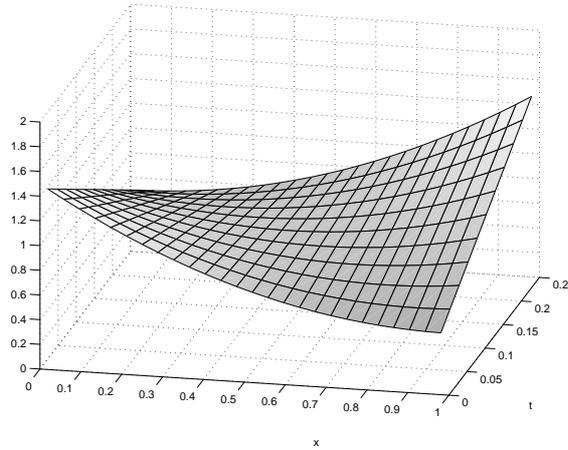


Abbildung 3.3.2: Parameterfläche $\hat{a}(t, x)$ des Testbeispiels auf $[0, T] \times \Omega$

des Parameters bewirkt, dass sich das Maximum von $\hat{u}(t, \cdot)$ im Laufe der Zeit von der rechten Intervallhälfte von Ω in die linke bewegt, was in Abbildung 3.3.3 zu sehen ist.

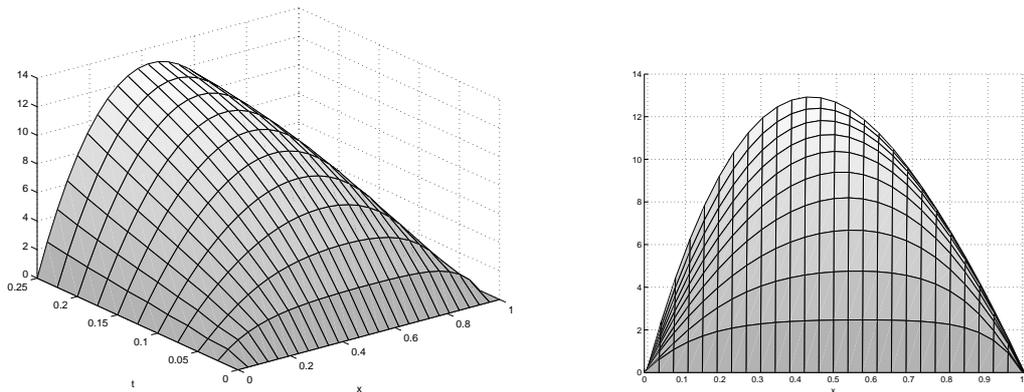


Abbildung 3.3.3: Der Messwert $\hat{u}(t, x)$ des Testbeispiels

Die Diskretisierung wird mit $N = 25$ und $M = 10$ gewählt. Der Startwert der Iteration ist

$$\begin{aligned} a_{0,i}^0 &= 1, & a_{T,i}^0 &= 1 & \text{für } i &= 1, \dots, N & \text{und} \\ \mathbf{u}_j^0 &= \mathbf{0}, & \boldsymbol{\lambda}_j^0 &= \mathbf{0} & \text{für } j &= 1, \dots, M. \end{aligned}$$

Die Dämpfung im gewichteten Verfahren mit dem Überlappbereich

$$\{(j, \tau, i, h) \in (0, T] \times \Omega : 11 \leq i \leq 16, 1 \leq j \leq M\}$$

der Knoten ist mit $\alpha = \gamma = 0.95$ gewählt.

Abbildung 3.3.4 stellt den Iterationsverlauf einer Testrechnung dar.

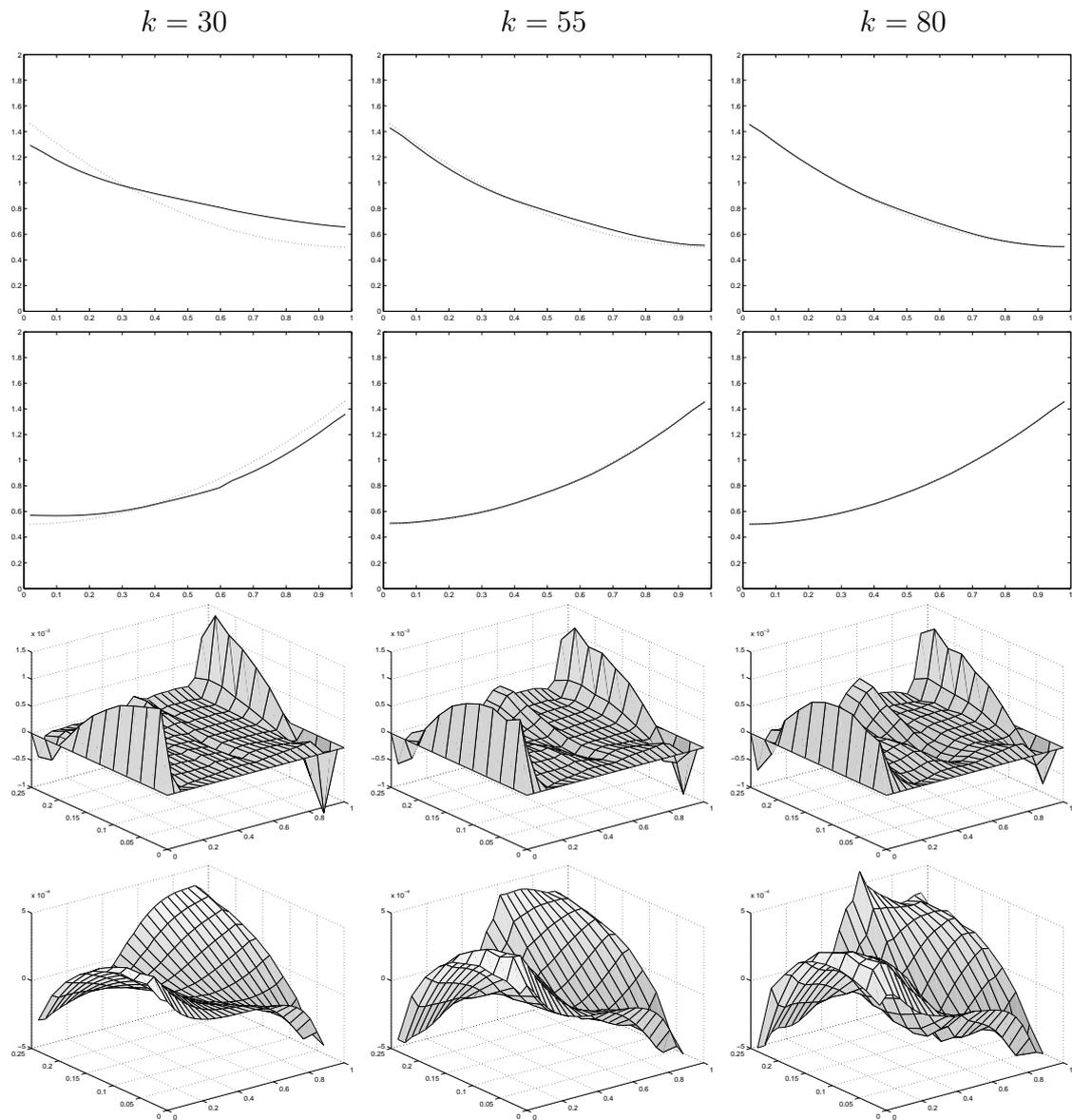


Abbildung 3.3.4: Iterierte \mathbf{a}_0^k (mit $\hat{\mathbf{a}}_0$), \mathbf{a}_T^k (mit $\hat{\mathbf{a}}_T$), $\mathbf{u}^k - \hat{\mathbf{u}}$ und λ^k

Zusammenfassung

Realistically, however, we freely admit that we have not investigated all possible avenues and ideas. [18]

Das Leitmotiv der vorliegenden Arbeit ist die Parallelisierung von Optimierungsverfahren durch Raumzerlegungen. Diese Technik ist ein wesentliches Hilfsmittel zur Formulierung von Verfahren, in denen eine grobkörnig parallelisierbare Struktur angelegt ist. Raumzerlegungsverfahren für Optimierungsprobleme sind von verschiedenen Autoren untersucht worden. Ein einheitlicher Zugang ist von Frommer und Renault beschrieben worden. Die Raumzerlegungsverfahren werden in der vorliegenden Arbeit für den bekannten unrestringierten Fall in eine Theorie verallgemeinerter Abstiegsverfahren eingebettet, die im ersten Teil der Arbeit im Vordergrund steht. Das Universalwerkzeug dieser Theorie ist Lemma 1.2.9, insbesondere in der Lesart des Lemmas 1.5.2. Letzteres ermöglicht die Übertragung der Theorie verallgemeinerter Abstiegsverfahren auf Verfahren mit Vergangenheitsbezug in der Abstiegsrichtung und Verfahren zur konvexrestringierten Optimierungsaufgabe, deren Verfahrensschritten den Zulässigkeitsbereich nicht verlassen. Die wesentliche Erkenntnis für Raumzerlegungsverfahren im konvexrestringierten Fall ist der Verlust der Identität globaler und lokaler Kritizität in allen Teilräumen als notwendiges Optimalitätskriterium, wie sie im unrestringierten Fall gegeben ist. Dies erfordert im Allgemeinen eine angepasste Wahl der Raumzerlegung in Abhängigkeit von der aktuellen Iterierten. Die Anwendung der Theorie verallgemeinerter Abstiegsverfahren beschränkt sich auf Strahlminimierungsverfahren, während eine Einordnung der in der Literatur existierenden nichtmonotonen *trust-region*-Verfahren, etwa [19] und [18, Abschnitt 10.1], bisher nicht vorgenommen wurde. In die Diskussion von Raumzerlegungsverfahren im Rahmen dieser Methoden könnten Ergebnisse aus der Darstellung der konvex restringierten Aufgaben einfließen.

Der Versuch, eine Theorie verallgemeinerter Verfahren für Methoden der nichtlinearen Optimierung zu entwickeln, wird nicht ausgeführt. Unabhängig von dieser

Diskussion erlauben modifizierte Straftermverfahren für das gleichungsrestringierte Problem eine direkte Anwendung der Raumzerlegung wie im unrestringierten Fall, ohne das zusätzliche Annahmen über die Struktur der Restriktion getroffen werden müssen. Das hier vielleicht erstmalig vorgestellte erweiterte Lagrangeverfahren mit Raumzerlegung (eLgVRz) gestattet es, den Raumzerlegungsansatz auf das restringierte Problem zu übertragen und dabei den Nachteil, der durch große Strafparameter verursachten schlechten Konditionierung reiner Straftermverfahren zu vermeiden. Wesentliches Ergebnis dieser Untersuchungen ist der Konvergenzsatz 2.4.18.

Die Anwendung der Verfahren auf die Schätzung verteilter Parameter in elliptischen und parabolischen Differentialgleichungen erlaubt es, dank natürlich gegebener Raumzerlegungen effektive Verfahren zu erhalten. Die Rechnungen zeigen die Notwendigkeit der im eLgVRZ auftauchenden Dämpfungen wie auch den Vorteil von zusätzlichen, im Überlappbereich ausgleichenden Wichtungen bei der Aufdatierung der primalen Verfahrensiterierten. Varianten der Beispielprobleme ließen sich detaillierter im Kontext der Gebietszerlegungs- und Mehrgitterverfahren für partielle Differentialgleichungen erörtern. Für das implementierte Verfahren wären praktikable Strategien zur Bestimmung eines „optimalen“ Verfahrensparameters γ bei der Aufdatierung der dualen Variablen wünschenswert. Außerdem sind die Verfahren bisher nicht für Aufgaben mit Ungleichungsrestriktionen hinreichend untersucht worden, die zusammen mit zusätzlichen Lagrangeparametern in das Lagrangefunktional aufgenommen werden. Für eine Anpassung der Raumzerlegungsverfahren an ungleichungsrestringierte Aufgabenstellungen sind möglicherweise die Ansätze in [26, 68] hilfreich.

Weitere Untersuchungen sollten sich auf effiziente Implementierungen der Raumzerlegungsverfahren für unterschiedliche Rechnerarchitekturen konzentrieren. Die ursprüngliche Idee besteht darin, durch die Grobkörnigkeit ein Verfahren zu erhalten, dass sich sinnvoll auf Clustern von Rechnern implementieren lässt. Es ist auch zu untersuchen, in wie weit sich bestehende Implementierungen von Mehrgitter- und Gebietszerlegungsverfahren für die diskutierten Parameteridentifikationsprobleme einsetzen lassen. Interessant wäre darüber hinaus, asynchrone Verfahrensvarianten, [62], und geeignete Abbruchkriterien unter dem Raumzerlegungs begriff näher zu erörtern. Da die Parallelisierbarkeit eine wesentliche Motivation der entwickelten Verfahren ist, beschränkt sich die Arbeit auf additive Methoden. Multiplikative Varianten wären noch zu untersuchen.

A Hilfsaussagen

A.1 \mathcal{F} -Funktionen

Sowohl die Bezeichnung *forcing function* wie \mathcal{F} -Funktion scheinen durch Ortega und Rheinboldt in [72] eingeführt oder doch verbreitet worden zu sein. Die dort im Abschlusskapitel zur Konvergenz von Minimierungsverfahren auftauchende Definition spricht jedoch dann von einer \mathcal{F} -Funktion $\varphi : \mathbb{R}_0^+ \rightarrow \mathbb{R}_0^+$, wenn für jede Folge $\{t^k\} \subset \mathbb{R}_0^+$ mit $\lim_{k \rightarrow \infty} \varphi(t^k) = 0$ die Konvergenz $\lim_{k \rightarrow \infty} t^k = 0$ folgt. Wir wiederholen jedoch die Definition 1.2.8, die eine hinreichend allgemeine Funktionenklasse bereit stellt.

A.1.1 Definition *Ein Element der Menge*

$$\mathcal{F} = \{\varphi : \mathbb{R}_0^+ \rightarrow \mathbb{R}_0^+ \mid \varphi^{-1}(0) = \{0\}, \varphi \text{ monoton wachsend}\}$$

heißt \mathcal{F} -Funktion. \mathcal{F}^* sei die Menge der in Null stetigen \mathcal{F} -Funktionen.

Typische \mathcal{F} -Funktionen sind die Abbildungen $t \mapsto ct^q$ mit positiven Konstanten c und q . Viele algebraische Verknüpfungen von \mathcal{F} -Funktionen führen wieder zu \mathcal{F} -Funktionen, worin nicht zuletzt die Stärke des Begriffs begründet ist.

A.1.2 Aussage Seien φ und ψ jeweils \mathcal{F} -Funktionen und c eine positive Konstante. Dann sind die Abbildungen

$$\begin{array}{ll} t \mapsto \varphi(t) + \psi(t), & t \mapsto \varphi(t) \psi(t), \\ t \mapsto \min\{\varphi(t), \psi(t)\}, & t \mapsto \max\{\varphi(t), \psi(t)\}, \\ t \mapsto c\varphi(t), & t \mapsto \varphi(ct) \\ \text{und} & t \mapsto \varphi(\psi(t)) \end{array}$$

auf \mathbb{R}_0^+ wieder \mathcal{F} -Funktionen.

Der hier verwendete Begriff ist etwas eingeschränkter als der in [72] benutzte, wie das nächste Lemma zeigt.

A.1.3 Aussage Sei φ eine \mathcal{F} -Funktion und $\{t^k\} \subseteq \mathbb{R}_0^+$. Dann folgt aus

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \varphi(t^k) = 0$$

die Konvergenz der Urbildfolge

$$\lim_{k \rightarrow \infty} t^k = 0.$$

Beweis

Für $\varepsilon > 0$ seien $\mathcal{T}_\varepsilon := \{t \in \mathbb{R}_0^+ : \varphi(t) \geq \varepsilon\}$ und $t_\varepsilon := \inf(\mathcal{T}_\varepsilon)$, so dass wegen der Monotonie

$$(t_\varepsilon, \infty) \subseteq \mathcal{T}_\varepsilon \subseteq [t_\varepsilon, \infty)$$

folgt. Es gilt

$$0 \notin \mathcal{T}_\delta \subseteq \mathcal{T}_\varepsilon, \quad \forall 0 < \varepsilon \leq \delta \tag{A.1.1}$$

und damit $t_\varepsilon \leq t_\delta$. Weiterhin gilt $\bigcup_{\varepsilon > 0} \mathcal{T}_\varepsilon = \mathbb{R}^+$, da jedes $t > 0$ in $\mathcal{T}_{\varphi(t)}$ enthalten ist. Daraus folgt dann mit (A.1.1) die Konvergenz $\lim_{\varepsilon \searrow 0} t_\varepsilon = 0$. Nach Voraussetzung gibt es für jedes $\varepsilon > 0$ ein k_ε , so dass für $k \geq k_\varepsilon$ die Relation $\varphi(t^k) < \varepsilon$ gilt, damit aber auch $t^k \leq t_\varepsilon$. Die Behauptung $\lim_{k \rightarrow \infty} t^k = 0$ ist damit gezeigt. \square

A.2 Konvexe Funktionen

Die Aussagen dieses Abschnittes sind aus [34, Kapitel 3] zusammengestellt.

A.2.1 Definition (Konvexität) Eine Menge $X \subseteq \mathbb{R}^n$ heißt konvex, wenn für alle $x, y \in X$ und alle $t \in (0, 1)$ auch $z = tx + (1 - t)y$ in X liegt. Die Funktion $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ heißt auf der konvexen Menge X

(i) konvex, wenn für alle $x, y \in X$ und alle $t \in (0, 1)$

$$f(tx + (1 - t)y) \leq tf(x) + (1 - t)f(y),$$

(ii) strikt konvex, wenn für alle $x, y \in X$ und alle $t \in (0, 1)$

$$f(tx + (1 - t)y) < tf(x) + (1 - t)f(y),$$

(iii) gleichmäßig konvex, wenn es ein $\mu > 0$ gibt mit

$$f(tx + (1 - t)y) + \mu t(1 - t)\|x - y\|^2 \leq tf(x) + (1 - t)f(y)$$

für alle $x, y \in X$ und alle $t \in (0, 1)$

gilt. Die Funktion f heißt konkav, wenn $-f$ konvex ist.

Differenzierbare konvexe Funktionen lassen sich außerdem wie im folgenden Satz beschrieben charakterisieren.

A.2.2 Satz Sei $X \subseteq \mathbb{R}^n$ eine offene und konvexe Menge, sowie $f : X \rightarrow \mathbb{R}$ stetig differenzierbar. Dann gelten

(i) f ist genau dann konvex auf X , wenn für alle $x, y \in X$

$$f(x) - f(y) \geq \langle \nabla f(y), x - y \rangle \quad \text{gilt.}$$

(ii) f ist genau dann strikt konvex auf X , wenn für alle $x, y \in X$ mit $x \neq y$

$$f(x) - f(y) > \langle \nabla f(y), x - y \rangle \quad \text{gilt.}$$

(iii) f ist genau dann gleichmäßig konvex auf X , wenn es ein $\mu > 0$ gibt mit

$$f(x) - f(y) \geq \langle \nabla f(y), x - y \rangle + \mu \|x - y\|^2$$

für alle $x, y \in X$ gilt.

Bei zweimal stetiger Differenzierbarkeit von f lassen sich die Begriffe durch die Definitheit der Hessematrix charakterisieren.

A.2.3 Satz Seien $X \subset \mathbb{R}^n$ eine offene und konvexe Menge, sowie $f : X \rightarrow \mathbb{R}^n$ zweimal stetig differenzierbar. Dann gelten:

(i) f ist genau dann konvex auf X , wenn $\nabla^2 f(x)$ für alle $x \in X$ positiv semidefinit ist.

(ii) Ist $\nabla^2 f(x)$ für alle $x \in X$ positiv definit, so ist f strikt konvex.

(iii) f ist genau dann gleichmäßig konvex auf X , wenn $\nabla^2 f(x)$ gleichmäßig positiv definit auf X ist, d. h. wenn es ein $\mu > 0$ gibt mit

$$\langle \nabla^2 f(x)d, d \rangle \geq \mu \langle d, d \rangle$$

für alle $x \in X$ und $d \in \mathbb{R}^n$.

Allein durch die (strikte) Konvexität des Zielfunktional einer konvex restringierten Minimierungsaufgabe ergeben sich nützliche Resultate über deren Lösungsmenge.

A.2.4 Satz Seien $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ stetig differenzierbar und $X \subseteq \mathbb{R}^n$ konvex, $X \neq \emptyset$. Dann ist die Lösungsmenge des konvex restringierten Minimierungsproblems

$$x^* = \operatorname{argmin}_{x \in X} f(x)$$

(i) konvex und möglicherweise leer, falls f konvex ist,

(ii) höchstens einelementig, falls f strikt konvex ist,

(iii) genau einelementig, falls f gleichmäßig konvex und X abgeschlossen ist.

A.3 Miscellanea

Das folgende Lemma formalisiert eine in der Literatur an verschiedenen Stellen anzutreffende Beweistechnik.

A.3.1 Lemma Sei $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ stetig differenzierbar und $X \subset \mathbb{R}^n$ sei konvex. Die Ableitung von f sei Lipschitz-stetig auf X , d. h. für ein $L > 0$ gilt

$$\|\nabla f(x) - \nabla f(y)\| \leq L\|x - y\| \quad \forall x, y \in X.$$

Dann gilt

$$\begin{aligned} f(y) - f(x) - \langle \nabla f(x), y - x \rangle &\leq \\ |f(y) - f(x) - \langle \nabla f(x), y - x \rangle| &\leq \frac{L}{2}\|y - x\|^2 \quad \forall x, y \in X. \end{aligned}$$

Insbesondere gilt für $y = x - \frac{1}{L}\nabla f(x)$ die Abschätzung

$$f(x) - f(y) \geq \frac{1}{2L}\|\nabla f(x)\|^2, \quad \text{falls } x, y \in X.$$

Beweis

Die Abschätzung $|f(y) - f(x) - \langle \nabla f(x), y - x \rangle| \leq \frac{L}{2}\|y - x\|^2$ gilt als Sonderfall von [87, Satz 2.2.10], woraus die weiteren Aussagen unmittelbar folgen. \square

Die nachstehende einfache Version des Satzes der impliziten Funktionen gilt z. B. nach [82, Theorem 9.28].

A.3.2 Satz (Satz der impliziten Funktionen) Sei $\Omega \subseteq \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m$ offen, und es sei $c \in C^1(\Omega; \mathbb{R}^m)$. Sei weiterhin $(x^*, y^*) \in \Omega$, derart dass $c(x^*, y^*) = 0$ gilt und $\nabla_y c(x^*, y^*)$ regulär ist. Dann gibt es offene Umgebungen U^* von x^* und W^* von y^* , so dass $U^* \times W^* \subseteq \Omega$ gilt und es eine eindeutig bestimmte C^1 -Funktion $\phi : U^* \rightarrow W^*$ gibt mit $c(x, \phi(x)) = 0$ für jedes $x \in U^*$. Außerdem gilt dann die Darstellung

$$\nabla \phi(x^*) = -\nabla_x c(x^*, y^*) (\nabla_y c(x^*, y^*))^{-1}$$

der Ableitung von ϕ in x^* .

A.3.3 Satz (Ostrowski, [73], S.203) Die Folge $\{x^k\} \subseteq \mathbb{R}^n$ sei beschränkt und besitze die Eigenschaft $\lim_{k \rightarrow \infty} \|x^{k+1} - x^k\| = 0$. Dann ist die Menge der Häufungspunkte von $\{x^k\}$ ein Kontinuum.

Bekanntlich ist eine Teilmenge eines topologischen Raumes ein Kontinuum, wenn sie nicht als Vereinigung zweier abgeschlossener und disjunkter Mengen darstellbar ist.

A.3.4 Aussage Seien V und W endlichdimensionale Vektorräume sowie $K_V \subset V$ und $K_W \subset W$ kompakte Teilmengen. Außerdem sei die Funktion $\varphi : K_V \times K_W \rightarrow \mathbb{R}$ stetig. Dann ist die durch

$$\psi(v) := \max\{\varphi(v, w) : w \in K_W\}$$

definierte Funktion $\psi : K_V \rightarrow \mathbb{R}$ ebenfalls stetig.

Beweis

Da $w \mapsto \varphi(v, w)$ stetig für jedes $v \in K_V$ ist, ist ψ wohldefiniert. Angenommen ψ sei in $v \in K_V$ unstetig. Dann gibt es ein $\varepsilon > 0$, so dass für alle $\delta > 0$ ein $v_\delta \in K_V$ existiert mit $\|v_\delta - v\|_V < \delta$ und $|\psi(v_\delta) - \psi(v)| > \varepsilon$. Es gibt Elemente w_v und w_δ aus K_W mit $\psi(v) = \varphi(v, w_v)$ und $\psi(v_\delta) = \varphi(v_\delta, w_\delta)$. Für hinreichend kleines δ gilt

$$\max\{|\varphi(v_\delta, w_\delta) - \varphi(v, w_\delta)|, |\varphi(v_\delta, w_v) - \varphi(v, w_v)|\} < \varepsilon,$$

da φ auf dem Kompaktum $K_V \times K_W$ gleichmäßig stetig ist. Dann ergibt sich einer der beiden nachstehenden Widersprüche.

$$\begin{aligned} \psi(v) &> \psi(v_\delta) + \varepsilon \geq \varphi(v_\delta, w_v) + \varepsilon \geq \varphi(v, w_v) = \psi(v) \\ \psi(v_\delta) &> \psi(v) + \varepsilon \geq \varphi(v, w_\delta) + \varepsilon \geq \varphi(v_\delta, w_\delta) = \psi(v_\delta) \end{aligned}$$

Also ist ψ stetig. □

B Tabellen

Die hier aufgeführten Tabellen dokumentieren Rechnungen zum in Abschnitt 3.2.1 dargestellten, eindimensionalen elliptischen Identifikationsproblem. Die mit # überschriebene Spalte gibt den effektiven Aufwand als Summe der maximalen Anzahl der Zielfunktionsaufrufe zur Berechnung der Teilraumoptima jedes bisherigen Iterationsschrittes wieder, S. 128. Die linearen Konvergenzraten sind gemäß

$$q_{\mathbf{a}}^k = \frac{\|\mathbf{a}^k - \mathbf{a}^*\|_{\infty}}{\|\mathbf{a}^{k-1} - \mathbf{a}^*\|_{\infty}}, \quad q_{\mathbf{u}}^k = \frac{\|\mathbf{u}^k - \mathbf{u}^*\|_{\infty}}{\|\mathbf{u}^{k-1} - \mathbf{u}^*\|_{\infty}} \quad \text{und} \quad q_{\boldsymbol{\lambda}}^k = \frac{\|\boldsymbol{\lambda}^k - \boldsymbol{\lambda}^*\|_{\infty}}{\|\boldsymbol{\lambda}^{k-1} - \boldsymbol{\lambda}^*\|_{\infty}}$$

berechnet.

$N = 129, \alpha = 1, \gamma = 1$								
k	#	$\ \mathbf{a}^k - \mathbf{a}^*\ _{\infty}$	$q_{\mathbf{a}}$	$\ \mathbf{u}^k - \mathbf{u}^*\ _{\infty}$	$q_{\mathbf{u}}$	$\ \boldsymbol{\lambda}^k - \boldsymbol{\lambda}^*\ _{\infty}$	$q_{\boldsymbol{\lambda}}$	$\ \mathbf{c}\ $
0	—	4.99e-01	—	9.44e+00	—	3.45e-05	—	1.00e+02
1	90509	6.32e-02	0.13	1.38e-03	0.00	5.84e-06	0.17	6.29e+00
2	149656	7.32e-03	0.12	5.15e-04	0.37	1.75e-06	0.30	8.74e-01
3	196450	2.14e-03	0.29	1.96e-04	0.38	4.92e-07	0.28	2.79e-01
4	237718	7.28e-04	0.34	5.58e-05	0.28	2.36e-07	0.48	9.37e-02
5	271380	6.38e-04	0.88	1.54e-05	0.28	2.13e-07	0.90	6.39e-02
6	309502	2.19e-04	0.34	1.25e-05	0.81	1.47e-07	0.69	2.40e-02
7	341569	1.83e-04	0.84	1.44e-05	1.15	1.31e-07	0.89	1.99e-02
8	372586	1.74e-04	0.95	1.87e-05	1.30	1.09e-07	0.83	2.50e-02
9	402814	1.66e-04	0.95	1.33e-05	0.71	9.43e-08	0.86	1.90e-02
10	433855	1.63e-04	0.98	2.30e-05	1.73	1.08e-07	1.14	1.97e-02

Tabelle B.1: Iterationsverlauf ohne Raumzerlegung

$N = 129, \alpha = 0.75, \gamma = 0.5$								
k	$\#$	$\ \mathbf{a}^k - \mathbf{a}^*\ _\infty$	$q_{\mathbf{a}}$	$\ \mathbf{u}^k - \mathbf{u}^*\ _\infty$	$q_{\mathbf{u}}$	$\ \boldsymbol{\lambda}^k - \boldsymbol{\lambda}^*\ _\infty$	$q_{\boldsymbol{\lambda}}$	$\ \mathbf{c}\ $
1	11001	1.13e+00	2.26	6.71e-02	0.01	2.71e-04	7.84	1.00e+02
2	35851	1.11e+00	0.99	4.83e-02	0.72	5.09e-04	1.88	1.25e+02
3	60837	6.32e-01	0.57	2.72e-02	0.56	4.82e-04	0.95	6.58e+01
4	81930	6.11e-01	0.97	2.48e-02	0.91	3.40e-04	0.71	1.10e+02
5	102645	5.09e-01	0.83	3.23e-02	1.31	2.28e-04	0.67	6.14e+01
6	123653	4.02e-01	0.79	2.49e-02	0.77	1.12e-04	0.49	5.11e+01
7	143054	2.59e-02	0.06	1.15e-02	0.46	6.95e-05	0.62	3.33e+01
8	162832	2.59e-02	1.00	1.40e-02	1.22	6.58e-05	0.95	8.48e+00
9	181159	2.35e-02	0.91	1.19e-02	0.85	3.36e-05	0.51	1.05e+01
10	199994	8.70e-03	0.37	4.27e-03	0.36	2.79e-05	0.83	6.08e+00
15	282616	3.65e-03	0.89	8.60e-04	0.88	7.54e-07	0.25	1.04e+00
20	345034	1.50e-04	1.00	3.93e-05	0.88	2.99e-07	0.58	6.26e-02
25	395673	9.46e-05	0.94	2.12e-05	0.93	1.29e-07	0.96	2.03e-02
30	445540	6.38e-05	0.96	1.70e-05	1.15	1.88e-07	1.00	4.24e-02

Tabelle B.2: Iterationsverlauf mit zwei Teilgebieten und Grobgitterraum

$N = 129, \alpha = 0.75, \gamma = 0.4$								
k	$\#$	$\ \mathbf{a}^k - \mathbf{a}^*\ _\infty$	$q_{\mathbf{a}}$	$\ \mathbf{u}^k - \mathbf{u}^*\ _\infty$	$q_{\mathbf{u}}$	$\ \boldsymbol{\lambda}^k - \boldsymbol{\lambda}^*\ _\infty$	$q_{\boldsymbol{\lambda}}$	$\ \mathbf{c}\ $
1	11001	1.13e+00	2.26	6.71e-02	0.01	2.21e-04	6.40	1.00e+02
2	18686	1.11e+00	0.99	4.83e-02	0.72	4.33e-04	1.96	1.00e+02
3	27234	7.74e-01	0.69	6.75e-02	1.40	6.25e-04	1.44	1.27e+02
4	35001	7.66e-01	0.99	1.31e-01	1.94	7.06e-04	1.13	1.43e+02
5	42643	6.26e-01	0.82	8.63e-02	0.66	4.83e-04	0.68	8.89e+01
10	80203	1.85e-02	0.11	7.78e-03	0.64	2.46e-05	0.78	9.76e+00
15	112756	3.93e-03	0.71	2.27e-04	0.38	3.43e-06	0.64	6.64e-01
20	135100	5.43e-04	0.91	8.23e-05	0.66	3.57e-07	0.99	5.92e-02
25	153646	9.22e-05	0.77	2.09e-05	0.87	2.13e-07	1.05	2.36e-02
30	170543	8.96e-05	1.00	1.31e-05	1.03	1.40e-07	0.88	1.26e-02
35	186612	5.27e-05	1.00	1.07e-05	1.04	1.15e-07	1.04	5.50e-03
40	195287	4.48e-05	1.00	8.70e-06	1.00	1.23e-07	1.04	4.66e-03
45	206968	4.45e-05	1.06	1.26e-05	1.20	1.97e-07	1.05	7.55e-03

Tabelle B.3: Iterationsverlauf mit vier Teilgebieten und Grobgitterraum

$N = 129, \alpha = 0.75, \gamma = 0.4$								
k	$\#$	$\ \mathbf{a}^k - \mathbf{a}^*\ _\infty$	$q_{\mathbf{a}}$	$\ \mathbf{u}^k - \mathbf{u}^*\ _\infty$	$q_{\mathbf{u}}$	$\ \boldsymbol{\lambda}^k - \boldsymbol{\lambda}^*\ _\infty$	$q_{\boldsymbol{\lambda}}$	$\ \mathbf{c}\ $
1	3468	1.23e+00	2.47	8.31e-02	0.01	2.58e-04	7.47	1.30e+02
2	16759	1.23e+00	1.00	6.31e-02	0.76	4.36e-04	1.69	1.14e+02
3	19987	4.47e-01	0.36	9.18e-02	1.46	7.31e-04	1.68	2.74e+02
4	23245	3.60e-01	0.81	6.84e-02	0.74	6.46e-04	0.88	1.07e+02
5	26451	6.95e-01	1.93	3.43e-02	0.50	4.10e-04	0.63	1.28e+02
10	42322	8.42e-02	0.86	1.10e-02	0.97	3.35e-05	0.55	2.84e+01
15	56266	4.06e-03	0.33	1.24e-03	0.48	9.59e-06	0.95	1.44e+00
20	67951	1.55e-03	1.00	1.36e-04	0.53	1.25e-06	0.57	2.90e-01
30	85043	8.95e-05	1.00	3.45e-05	1.01	1.86e-07	1.49	1.84e-02
40	100997	5.25e-05	0.99	2.76e-05	1.07	2.49e-07	0.82	1.57e-02
50	117718	4.08e-05	0.96	1.27e-05	1.08	2.50e-07	0.97	8.04e-03

Tabelle B.4: Iterationsverlauf mit acht Teilgebieten und Grobgridterraum

$N = 129, \alpha = 0.65, \gamma = 0.20$								
k	$\#$	$\ \mathbf{a}^k - \mathbf{a}^*\ _\infty$	$q_{\mathbf{a}}$	$\ \mathbf{u}^k - \mathbf{u}^*\ _\infty$	$q_{\mathbf{u}}$	$\ \boldsymbol{\lambda}^k - \boldsymbol{\lambda}^*\ _\infty$	$q_{\boldsymbol{\lambda}}$	$\ \mathbf{c}\ $
1	787	1.40e+00	2.80	1.70e-01	0.02	6.27e-05	1.82	1.42e+02
2	3490	1.41e+00	1.01	1.13e-01	0.66	6.44e-05	1.03	1.24e+02
3	4281	1.41e+00	1.00	1.09e-02	0.10	8.19e-05	1.27	1.09e+02
4	5097	2.01e-01	0.14	1.31e-02	1.21	9.38e-05	1.15	1.74e+02
5	5996	1.82e-01	0.91	1.68e-02	1.28	9.13e-05	0.97	7.26e+01
10	10353	2.18e-01	0.65	7.19e-03	0.95	4.53e-05	0.94	4.23e+01
15	14674	8.70e-02	0.94	3.77e-03	0.97	2.06e-05	0.82	1.41e+01
20	18986	3.37e-02	1.00	2.43e-03	0.82	8.31e-06	0.80	7.15e+00
30	27537	2.69e-03	0.94	4.20e-04	0.82	2.92e-06	0.92	8.74e-01
40	35647	7.92e-04	1.41	1.13e-04	0.73	5.63e-07	0.92	2.79e-01
50	42193	1.96e-04	1.00	2.65e-05	0.77	1.72e-07	0.89	3.89e-02
60	47550	6.76e-05	1.00	1.66e-05	0.96	2.64e-08	0.89	8.87e-03

Tabelle B.5: Iterationsverlauf mit sechzehn Teilgebieten und Grobgridterraum

Literaturverzeichnis

- [1] BANKS, H. T. und K. KUNISCH: *Estimation Techniques for Distributed Parameter Systems*. Birkhäuser Verlag, Basel, 1989.
- [2] BARZILAI, J. und J. M. BORWEIN: *Two point step size gradient methods*. IMA Journal of Numerical Analysis, S. 141–148, 1988.
- [3] BAZARAA, M. S., H. D. SHERALI und C. SHETTY: *Nonlinear Programming: Theory and Algorithms*. John Wiley & Sons, 2. Aufl., 1993.
- [4] BERTSEKAS, D. P.: *Combined primal–dual and penalty methods for constrained optimization*. SIAM Journal on Control and Optimization, 13:521–544, 1975.
- [5] BERTSEKAS, D. P.: *Multiplier methods: a survey*. Automatica, 12:133–145, 1976.
- [6] BERTSEKAS, D. P.: *Convergence analysis of augmented Lagrangian methods*. In: *ILSA proceedings*, Laxenburg, Österreich, 1981. ILSA.
- [7] BERTSEKAS, D. P.: *Constrained Optimization and Lagrange Multiplier Methods*. Academic Press, London, New York, 1982.
- [8] BERTSEKAS, D. P.: *Nonlinear Programming*. Athena Scientific, 2. Aufl., 1999.
- [9] BERTSEKAS, D. P. und J. N. TSITSIKILIS: *Parallel and Distributed Computation*. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, N.J., 1989.
- [10] BIRGIN, E., J. MARTINEZ und M. RAYDAN: *Nonmonotone spectral projected gradient method on convex sets*. SIAM Journal on Optimization, 10(4):1196–1211, 2000.
- [11] BONNANS, J. F. und A. SHAPIRO: *Perturbation Analysis of Optimization Problems*. Springer Series in Operations Research. Springer-Verlag, 2000.
- [12] BRAESS, D.: *Finite Elemente*. Springer-Verlag, Berlin, 1997.
- [13] BRENNER, S. C. und L. R. SCOTT: *The Mathematical Theory of Finite Element Methods*. Nr. 15 in *Texts in Applied Mathematics*. Springer-Verlag, Berlin, 2. Aufl., 1996.

-
- [14] CAUCHY, A.: *Méthodes Générale pour la Resolution des Systèmes d'Équations Simultanées*. *Compte Rendus de l'Académie des Sciences de Paris*, 25:536–538, 1847.
- [15] CHAMBERLAIN, R. M., M. J. O. POWELL, C. LEMARÉCHAL und H. C. PEDERSEN: *The watchdog technique for forcing convergence in algorithms for constrained optimization*. *Mathematical Programming Study*, 16:1–17, 1982.
- [16] CHEN, Z. und J. ZOU: *An augmented Lagrangian method for identifying discontinuous parameters in elliptic systems*. *SIAM Journal on Control and Optimization*, 37(3):892–910, 1999.
- [17] CONN, A. R., N. I. M. GOULD, A. SARTENAER und P. L. TOINT: *On iterated subspace minimization methods for nonlinear optimization*. In: ADAMS, L. und J. L. NAZARETH (Hrsg.): *Linear and Nonlinear Conjugate Gradient-Related Methods*. SIAM Publ., Philadelphia, 1996.
- [18] CONN, A. R., N. I. M. GOULD und P. L. TOINT: *Trust-Region Methods*. SIAM Publ., Philadelphia, 2000.
- [19] DENG, N. Y., Y. XIAO und F. J. ZHOU: *A nonmonotone trust region algorithm*. *Journal of Optimization Theory and Applications*, 76:259–285, 1993.
- [20] DENNIS, J. E. und R. B. SCHNABEL: *Numerical Methods for Unconstrained Optimization*. Prentice-Hall, 1983.
- [21] DENNIS, J. E. und Z. WU: *Parallel Continuous Optimization*. Techn. Ber. TR00-01, Rice University, 2000.
- [22] EIERMANN, M.: *persönliche Konsultation*, April 2002.
- [23] ENGL, H. W., M. HANKE und A. NEUBAUER: *Regularization of Inverse Problems*. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 1996.
- [24] ESPEDAL, M. S., X.-C. TAI und N. YAN: *A hybrid domain decomposition method for advection-diffusion problems*. *Numerical Algorithms*, 18:321–336, 1998. <http://www.mi.uib.no/~tai>.
- [25] FERRIS, M. und O. MANGASARIAN: *Parallel constrained distribution*. *SIAM Journal on Optimization*, 1:487–500, 1991.
- [26] FERRIS, M. C. und O. L. MANGASARIAN: *Parallel variable distribution*. *SIAM Journal on Optimization*, 4(4):815–832, 1994.
- [27] FIACCO, A. V. und G. P. MCCORMICK: *Nonlinear Programming :Sequential Unconstrained Minimization Techniques*, Bd. 4 d. Reihe *Classics in Applied Mathematics*. SIAM, Philadelphia, 2. Aufl., 1990.
- [28] FLETCHER, R.: *Practical Methods of Optimization*. John Wiley & Sons, 2. Aufl., 1987.

- [29] FORTIN, M. und R. GLOWINSKI (Hrsg.): *Méthodes de lagrangien augmenté. Application à la résolution numérique de problèmes aux limites*. Dunod, Paris, 1983.
- [30] FROMMER, A.: *Parallel Nonlinear Multisplitting Methods*. Numerische Mathematik, 56:269–282, 1989.
- [31] FROMMER, A. und R. A. RENAUT: *A unified approach to parallel space decomposition*. Journal of Computational and Applied Mathematics, 110:205–223, 1999.
- [32] FUKUSHIMA, M.: *Parallel variable transformation in unconstrained optimization*. SIAM Journal on Optimization, 8:658–672, 1998.
- [33] GAUVIN, J.: *A necessary and sufficient condition to have bounded multipliers in nonconvex programming*. Mathematical Programming, 12:136–138, 1977.
- [34] GEIGER, C. und C. KANZOW: *Numerische Verfahren zur Lösung unrestringierter Optimierungsaufgaben*. Springer-Verlag, Berlin, 1999.
- [35] GILL, P. E., W. MURRAY und M. H. WRIGHT: *Practical Optimization*. Academic Press, London, New York, 1981.
- [36] GLOWINSKI, R.: *Numerical Methods for Nonlinear Variational Problems*. Springer-Verlag, Berlin, 1984.
- [37] GOULD, N. I. M., S. LUCIDI, M. ROMA und P. L. TOINT: *A linesearch algorithm with memory for unconstrained optimization*. Techn. Ber. 98/03, Department of Mathematics, Facultés Universitaires ND de la Paix, 1998.
- [38] GRIPPO, L., F. LAMPARIELLO und S. LUCIDI: *A nonmonotone line search technique for Newton's method*. SIAM Journal on Numerical Analysis, 23(4):707–716, Aug. 1986.
- [39] GRIPPO, L., F. LAMPARIELLO und S. LUCIDI: *A truncated Newton method with nonmonotone line search for unconstrained optimization*. Journal of Optimization Theory and Applications, 60(3):401–419, 1989.
- [40] GRIPPO, L., F. LAMPARIELLO und S. LUCIDI: *A quasi-discrete Newton algorithm with a nonmonotone stabilization technique*. Journal of Optimization Theory and Applications, 64(3):495–510, 1990.
- [41] GRIPPO, L., F. LAMPARIELLO und S. LUCIDI: *A class of nonmonotone stabilization methods in unconstrained optimization*. Numerische Mathematik, 59:779–805, 1991.
- [42] GRIPPO, L. und M. SCIANDRONE: *Globally convergent block-decomposition techniques in unconstrained optimization*. Optimization Methods and Software, 10(4):587–637, 1999.

- [43] GROSSMANN, C. und H.-G. ROOS: *Numerik partieller Differentialgleichungen*. Teubner, Stuttgart, Leipzig, 1994.
- [44] GROSSMANN, C. und J. TERNO: *Numerik der Optimierung*. Teubner, Stuttgart, Leipzig, 1993.
- [45] HACKBUSCH, W.: *Iterative Lösung großer schwachbesetzter Gleichungssysteme*, Bd. 69 d. Reihe *Leitfäden der angewandten Mathematik und Mechanik*. Teubner, Stuttgart, Leipzig, 1993.
- [46] HANSEN, P. C.: *Rank-Deficient and Discrete Ill-Posed Problems*. SIAM Publ., Philadelphia, 1997.
- [47] HESTENES, M.: *Multiplier and gradient methods*. *Journal of Optimization Theory and Applications*, 4:303–320, 1969.
- [48] HORN, R. H. und C. R. JOHNSON: *Matrix Analysis*. Cambridge University Press, 1985.
- [49] ITO, K. und K. KUNISCH: *The augmented Lagrangian method for equality and inequality constraints in Hilbert space*. *Mathematical Programming*, 46:341–360, 1990.
- [50] ITO, K. und K. KUNISCH: *The augmented Lagrangian method for parameter estimation in elliptic systems*. *SIAM Journal on Control and Optimization*, 28(1):113–136, 1990.
- [51] ITO, K. und K. KUNISCH: *An augmented Lagrangian technique for variational inequalities*. *Appl. Math. Optim.*, 21:223–242, 1990.
- [52] ITO, K. und K. KUNISCH: *Augmented Lagrangian-SQP-methods in Hilbert Spaces and application to control in the coefficients problems*. *SIAM Journal on Optimization*, 6:96–125, 1996.
- [53] JAHN, J.: *Introduction to the Theory of Nonlinear Optimization*. Springer-Verlag, Berlin, 2. Aufl., 1996.
- [54] KE, X. und J. HAN: *A nonmonotone trust region algorithm for equality constrained optimization*. *Science in China, Series A*, 38(6):683–695, 1995.
- [55] KELLEY, C. T.: *Iterative Methods for Optimization*. SIAM Publ., Philadelphia, 1999.
- [56] KIELBASINSKI, A. und H. SCHWETLICK: *Numerische lineare Algebra*. VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin, 1988.
- [57] KUNISCH, K.: *Numerical methods for parameter estimation problems*. Forschungsbericht 411, TU Berlin, 1994.

- [58] KUNISCH, K. und E. PEICHL: *Estimation of temporally and spacially varying diffusion coefficient in a parabolic system by an augmented Lagrangian technique*. Numerische Mathematik, 59:473–509, 1991.
- [59] KUNISCH, K. und X.-C. TAI: *Non overlapping domain decomposition methods for inverse problems*. In: BJØRSTAD, P. E., M. ESPEDAL und D. KEYES (Hrsg.): *DD9 Proceedings*, Bd. 9, Chichester, New York, 1996. DDM, John Wiley & Sons.
- [60] KUNISCH, K. und X.-C. TAI: *Sequential and parallel splitting methods for bilinear control problems in Hilbert spaces*. SIAM Journal on Numerical Analysis, 34(1):91–118, 1997. <http://www.mi.uib.no/~tai>.
- [61] LIU, C. und C. TSENG: *Space-decomposition minimization method for large-scale minimization problems*. Computers & Mathematics with Applications, 37(7):73–88, 1999.
- [62] LIU, C. und C. TSENG: *Parallel synchronous and asynchronous space-decomposition algorithms for large-scale minimization problems*. Computational Optimization and Applications, 17(1):85–107, 2000.
- [63] LIU, C. und C. TSENG: *Space-decomposition multiplier method for constrained minimization*. Computers & Mathematics with Applications, 41(1-2):51–62, 2001.
- [64] LIU, G. und L. JING: *Convergence of the nonmonotone Perry and Shanno method for optimization*. Computational Optimization and Applications, 16(2):159–172, 2000.
- [65] MANGASARIAN, O.: *Parallel gradient distribution in unconstrained optimization*. SIAM Journal on Optimization, 33:1916–1925, 1995.
- [66] MANGASARIAN, O. L.: *Nonlinear Programming*, Bd. 10 d. Reihe *Classics in Applied Mathematics*. SIAM Publ., Philadelphia, 2 Aufl., 1994. Nachdruck.
- [67] THE MATHWORKS INC., <http://www.mathworks.com>: *Optimization Toolbox - For Use with MATLAB (User's Guide)*.
- [68] MITTELMANN, H. D.: *Parallel multisplittings for constrained optimization*. Parallel Algorithms, 9:91–99, 1996.
- [69] NILSSEN, T. und X.-C. TAI: *Parameter estimation with the augmented Lagrangian method for a parabolic equation*. Techn. Ber. R 153, Universitetet i Bergen, Department of Applied Mathematics, 2001.
- [70] NILSSEN, T. K.: *Parameter estimation with the augmented Lagrangian method and a study of some fourth order problems*. Doktorarbeit, Universitetet i Bergen, 2001.

-
- [71] NOCEDAL, J. und S. J. WRIGHT: *Numerical Optimization*. Springer Series in Operations Research. Springer-Verlag, New York, 1999.
- [72] ORTEGA, J. und W. RHEINBOLDT: *Iterative Solution of Nonlinear Equations*. Academic Press, London, New York, 1970.
- [73] OSTROWSKI, A. M.: *Solution of Equations and Systems of Equations*. Academic Press, New York, London, 1966.
- [74] POLAK, E.: *On the convergence of optimization algorithms*. Revue Française d'Informatique et de Recherche Operationelle, Serie Rouge, 16:17–34, 1969.
- [75] POWELL, M. J. D.: *A method for nonlinear constraints in minimization problems*. In: FLETCHER, R. (Hrsg.): *Optimization*, Kap. 19. Academic Press, London, New York, 1969.
- [76] QUARTERONI, A. und A. VALLI: *Domain Decomposition Methods for Partial Differential Equations*. Oxford University Press, New York, Oxford, 1999.
- [77] RAYDAN, M.: *The Brazilai and Borwein choice of steplength for the gradient method*. IMA Journal of Numerical Analysis, S. 321–326, 1993.
- [78] RENAUT, R. A.: *A parallel multisplitting solution of the least squares problem*. Numerical Linear Algebra with Applications, 4:1–21, 1997.
- [79] RENAUT, R. A., Q. HE und F.-S. HORNG: *Parallel multisplittings for minimization*. In: TENTNER, A. (Hrsg.): *Grand Challenges in Computer Simulation*, High Performance Computing 1995, S. 317–322. Society for Computer Simulation, 1995.
- [80] RENAUT, R. A. und H. D. MITTELMANN: *Parallel multisplittings for optimization*. Parallel Algorithms and Applications, 7:17–27, 1995.
- [81] RENAUT, R. A., H. D. MITTELMANN und Q. HE: *Parallel multisplittings: overview and extensions*. In: LEWIS, J. (Hrsg.): *Proceedings of the Fifth SIAM Conference on Applied Linear Algebra*, S. 34–38, 1994.
- [82] RUDIN, W.: *Principles of Mathematical Analysis*. McGraw–Hill, 3. Aufl., 1976.
- [83] RUDIN, W.: *Real and Complex Analysis*. McGraw-Hill, 3. Aufl., 1987.
- [84] SAAD, Y.: *Numerical Methods for Large Eigenvalue Problems*. Halstead Press, New York, USA, 1992.
- [85] SAAD, Y.: *Iterative Methods for Sparse Linear Systems*. PWS Publishing Company, 1996.
- [86] SCHULZ, V. und G. WITTUM: *Multigrid Optimization Methods for Stationary Parameter Identification Problems in Groundwater Flow*. In: HACKBUSCH,

- W. und G. WITTUM (Hrsg.): *Multigrid Methods V*, Nr. 3 in *Lecture Notes in Computational Science and Engineering*, S. 276–288. Springer-Verlag, 1998.
- [87] SCHWETLICK, H.: *Numerische Lösung nichtlinearer Gleichungen*. VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin, 1979.
- [88] SOLODOV, M. V.: *New inexact parallel variable distribution algorithms*. Computational Optimization and Applications, 7:165–182, 1997.
- [89] SOLODOV, M. V.: *On the convergence of constrained parallel variable distribution algorithms*. SIAM Journal on Optimization, 8(1):187–196, 1998.
- [90] SPELLUCCI, P.: *Numerische Verfahren der nichtlinearen Optimierung*. Birkhäuser Verlag, Basel, 1993.
- [91] TAI, X.-C.: *Parallel function and space decomposition methods – Part I*. Beijing Mathematics, 1(2):104–134, 1995. <http://www.mi.uib.no/~tai>.
- [92] TAI, X.-C.: *Parallel function and space decomposition methods – Part II*. Beijing Mathematics, 1(2):135–152, 1995. <http://www.mi.uib.no/~tai>.
- [93] TOINT, P. L.: *An assessment of nonmonotone linesearch techniques for unconstrained optimization*. SIAM Journal on Scientific Computing, 17(3), 1996.
- [94] TOINT, P. L.: *Non-monotone trust-region algorithms for nonlinear optimization subject to convex constraints*. Mathematical Programming, 77(1):69–94, 1997.
- [95] WOHLMUTH, B. I.: *Discretization Methods and Iterative Solvers Based on Domain Decomposition*. Springer-Verlag, Berlin, 2001.
- [96] XU, J.: *Iterative methods by space decomposition and subspace correction*. SIAM Review, 34(4):581–613, 1992.
- [97] YEH, W. W.-G.: *Review of parameter identification procedures in groundwater hydrology: the inverse problems*. Water Resources Research, 22:95–108, 1986.
- [98] ZHANG, J. Z. und L. H. CHEN: *Nonmonotone Levenberg–Marquardt algorithms and their convergence analysis*. Journal of Optimization Theory and Applications, 92(2):393–418, 1997.
- [99] ZHU, D.: *Nonmonotonic projected algorithm with both trust region and line search for constrained optimization*. Computational and Applied Mathematics, 117:35–60, 2000.

Symbolregister

- $\|\cdot\|_\infty$, 2
 $\langle \cdot, \cdot \rangle$, $\|\cdot\|$ in Hilberträumen, 2
 B^* , 2
 W^\perp , $v \perp W$, 2
 $\nabla f(x) = (\partial_{x_1} f(x), \dots, \partial_{x_n} f(x))'$, 2
 $\langle x, y \rangle = \sum_{i=1}^n x_i y_i$ für $x, y \in \mathbb{R}^n$, 2
 \succ , \succeq , 2
 B^* , B -hermitesch für $B \in \mathbb{C}^{n \times m}$, 100

 $\Gamma_K(x)$, (2.2.3), 56
 $\Gamma_K^{\mathcal{A}, i}$, 61
 η Regularisierungsparameter, 112, 113, 139
 $\nu_i(v)$, 103
 $\Pi_K^{\mathbb{R}^n}$, Π_{K-x}^V , $\Pi_{Y_i}^{W_i}$, 54, 56, 61
 ψ_1 , ψ_N , φ_i , 113
 ρ , Strafparameter, 76
 $\rho^{k+\frac{1}{2}} = (\rho^k + \rho^{k+1})/2$, 86
 $\hat{\rho}$, 84
 $\underline{\rho}$, 80
 $\sigma : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}_0^+$, Straffunktion, 76
 τ , 139
 $\chi(x)$, (2.2.2), 56

 $A = \nabla c(x^*)$, 94
 $\mathbf{A}_{j-\frac{1}{2}}$, 139
 \mathcal{A} , Farbe, 119
 a_0 , 139
 \mathbf{A}_i , 115
 a_ω , 114
 a_T , 139
 $A(x) = \nabla c(x)$, 71
 $A_{\mathbb{G}}(x) = \nabla c_{\mathbb{G}}(x)$, 71
 $A_{\mathbb{U}}(x) = \nabla c_{\mathbb{U}}(x)$, 71
 \mathcal{B} , Farbe, 119
 $\text{bild}(B) = \{Bw : w \in W\}$ für $B : W \rightarrow V$, 2

 $c^k = c(x^k)$, 86
 \mathbf{c}_j , 139
 \mathbf{D} , 115
 $\mathcal{D}_\rho^{(i)}(x, \lambda)$, 92
 $d(x, S) = \inf\{\|x - s\| : s \in S\}$, 13, 41
 $E_\eta(u, a)$, 111, 113, 115, 139
 E_η , 115, 131, 139
 $\mathbf{e} = (1, \dots, 1)'$, 118
 \mathcal{E}_1 , \mathcal{E}_1 , 100, 103
 E_i , 92
 $\hat{\mathbf{E}}_j$, 120
 $F^k = \max\{f^{k-j} : 0 \leq j \leq \min\{M, k\}\}$, 11
 $\mathcal{F} = \{\varphi : \mathbb{R}_0^+ \rightarrow \mathbb{R}_0^+ \mid \varphi^{-1}(0) = \{0\}, \varphi \text{ monoton}\}$,
16, 145

 \mathbf{f} , 115
 $\mathbf{f}_{j-\frac{1}{2}}$, 139
 \bar{f}^k , 44
 $f^k = f(x^k)$, 4
 f_ω , 114
 \mathbb{G} , 70
 \bar{g}^k , 44
 $g^k = \nabla f(x^k)$, 4
 $H = H_\rho = \nabla^2 \ell_\rho(x^*, \lambda^*)$, 94
 $H^\sharp = H_\rho^\sharp = \sum_{i=1}^p \alpha_i H^{-P_i}$, 94
 $H^{-P_i} = P_i \left(P_i' H P_i \right)^{-1} P_i'$, 94
 \bar{H}^k , 44
 H^1 , H_0^1 , Sobolevräume, 3
 \mathbb{I} , 70
 $\Im(z)$, Imaginärteil von $z \in \mathbb{C}$, 99
 I_n Einheitsmatrix, I_V Identität, 2
 $\mathcal{K}_R := \{z \in \mathbb{C} : |R - z| < R\}$, 95, 98–100
 $\text{kern}(B) = \{w : Bw = 0\}$ für $B : W \rightarrow V$, 2
 L_2 , Lebesgueraum, 3
 $\ell(x, \lambda)$, 71

ℓ_ρ , 78
 $\ell^k = \ell_{\rho^k}(x^k, \lambda^k)$, 86
 $\hat{\ell}^k = \ell_{\rho^k}(x^{k+1}, \lambda^k)$, 86
 $\nabla \ell = \nabla_x \ell$, $\nabla^2 \ell = \nabla_{xx} \ell$, 71
 $M_\rho^\gamma(s)$, 95
 $\mathbf{m}^k(x)$, $\bar{\mathbf{m}}^k(x)$, 44
 $\mathcal{M} := \bigcup \{\mathcal{M}_M : M \in \mathbb{N}_0\}$, 8
 $\mathcal{M}, \mathcal{M}_M$, 7
 P_i , 28
 \mathbf{P}_j , 120
 $\hat{\mathbf{P}}_j$, 120
 \mathcal{P} , 56
 p , 28
 $Q, \mathcal{Q}_\rho^{\alpha, \gamma}, Q_{ij}$, 95
 $\mathcal{Q}_\rho^{\alpha, \gamma}(q)$, 93
 R_i , 28
 $\Re(z)$, Realteil von $z \in \mathbb{C}$, 98
 $\text{rang}(B) = \dim(\text{bild}(B))$, 2
 $\mathbb{R}_0^+ = \{t \in \mathbb{R} : t \geq 0\}$, 16, 21
 $\mathcal{S} := \{z \in \mathbb{C} : |z| \geq 1\}$, 95
 $S_0 = \{x \in \mathbb{R}^n : \nabla f(x) = 0\}$, 4, 13, 24, 38, 49,
 51
 $S_K = \{x \in K : \Gamma_K(x) = 0\}$, 60, 67
 $\text{spann}\{v_i\} = \{\sum_{i=1}^n \alpha_i v_i : \alpha_i \in \mathbb{R}\}$, 33
 $\text{spek}(B)$, Spektrum von $B \in \mathbb{C}^{n \times n}$, 2
 $\text{sprd}(B)$, Spektralradius von $B \in \mathbb{C}^{n \times n}$, 2
 t_j , 139
 \mathbb{U} , 70
 \mathbf{u} , 115
 \mathbb{U}_{akt} , 70
 u_ω , 114
 V_j^P, V_j^Z , 120
 $\mathcal{W}(B), \tilde{\mathcal{W}}(B)$, 101
 W_j^P, W_j^Z , 120
 $\mathcal{X}_\rho^\alpha(x, \lambda)$, 92
 $X_0 = \{x \in \mathbb{R}^n : f(x) \leq f(x^0)\}$, 4
 $\mathcal{X}_\rho^{\alpha, E}$, 92
 Y_M^k, Y^k , 7
 $Y_i^{\mathcal{L}}$, 61

Personen- und Sachregister

- Abadie-Bedingung, 73
- abgeleitete Korrektur, 121
- Abstiegsverfahren, 4
- Algorithmus
 - eLgV, 2.4.8, 85
 - eLgVRz, 2.4.11, 90
 - StMin, 1.1.1, 5
 - StMinRz, 1.4.7, 33
 - Vertrauensbereichverfahren, 1.1.2, 6
 - vStMin, 1.3.1, 23
 - vStMin_K, 2.2.5, 58
 - vStMinRz, 1.4.9, 36
 - vStMinRz_K, 2.2.7, 62
- ARMIJO, 25, 45, 60
- Armijo-Schrittweite, 24, 25

- backtracking, 25
- Barzilai-Borwein-Methode, 60
- BERTSEKAS, 74, 75

- CAUCHY, 5

- duale Variable, 71

- effektiver Aufwand, 128
- eig, 126
- Einbettung, 28
- Einraumkorrektur, 121
- eLgVRz, 90
 - multiplikativ, 107

- \mathcal{F} -Funktion, \mathcal{F}^* -Funktion, 16, 145
- Farbe, 119
- „fast immer“, 2
- FERRIS, 27
- fmincon, 122, 123, 128
- Folge
 - M -monotone, 7
 - \mathcal{M} -, \mathcal{M}_M -Folge, 7
 - kritische, 12
 - minimierende, 6
 - schwach kritische, 12
 - verallgemeinert minimierende, 12
 - verallgemeinert schwach minimierende, 12
- forget-me-not-Term, 27, 65
- Fritz-John-Bedingungen, 72
- „für schließlich alle“, 2

- Gebietszerlegung, 119
- GOULD, 44
- GRIPPO, 7, 27
- Grobgitter, 119
 - korrektur, 121, 122
 - raum, 120, 121

- HESTENES, 75

- ITO, 75

- Jacobimatrix, 93, 95

- KKT-Bedingungen, 72
- KKT-Punkt, 72
- kritische Stelle (bzgl. (Min_K)), 54
- KUNISCH, 75

- Lagrangefunktion, 71
 - erweiterte, 78
- LAMPARIELLO, 7
- line search method, 5
- lokale Lösung, 71
- LUCIDI, 7, 44

- M -majorisierend, 7
- M -monoton, 7
- MANGASARIAN, 27
- Mehrfachzerlegung, 26
 - (Min), 4
 - (Min_K), 54
- MITTELMANN, 26

multisplitting, 26, 27

Niveaumenge, 4
(*NLO*), 70
(*NLO=*), 76

Orthogonalprojektion, 29
OSTROWSKI, 21, 93, 150

parallel variable distribution, 27
POWELL, 75
primale Variable, 71
Primalfunktion, primal function, 83
Projektionssatz, 55

quasiregulär, 74

Raumzerlegung, 28
 nicht überlappende, 39
Regularitätsbedingung, 74
regulärer Punkt, 74
RENAUT, 26
Restriktion, 28
ROCKAFELLAR, 75
ROMA, 44
RzV, 33

SCIANDRONE, 27
SOLODOV, 27, 61
speedup-Effekt, 128
stationär, 5

TAI, 27, 61
Tangentialkegel, 73
Teilraum, 28
 -korrektur, 33
TOINT, 44
trust region method, 5

(*V1*), (*V2*), 80
verallgemeinerte Abstiegsverfahren, 7
Vertrauensbereichverfahren, 5, 6
vRzV, 36

Wertebereich, 100
Winkelbereich, 100

Zielfunktion, 4