10 Reduktionsmethoden und Strategien der aktiven Menge

Vorläufige Version, enthält noch viele unausgefüllte Referenzen!

Bei den Reduktionsmethoden behandeln wir ein Problem von der Form

$$f(\boldsymbol{x}) = \min \quad \text{mit} \quad \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{b}, \tag{$*$}$$

wobei wir nur die Lösungsmenge des Gleichungssystems $\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{b}$ in f einsetzen. Wir reduzieren damit den Bereich bei der Berechnung von f auf die Menge $M := \{\boldsymbol{x} : \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{b}\}$, die wir *zulässige Menge* des Problems $(*)$ genannt hatten. Jeder Punkt $\boldsymbol{x} \in M$ ist entsprechend ein *zulässiger Punkt*. Bei der Herleitung notwendiger Optimalitätsbedingungen für Probleme mit Gleichungsrestriktionen 7, S. 61 hatten wir gebraucht, daß der zulässige Bereich M *regulär* ist. Ein zulässiger Punkt $\hat{\boldsymbol{x}} \in M$ hieß dabei regulär, wenn die Jacobi-Matrix $\boldsymbol{g}'(\hat{\boldsymbol{x}})$ den maximal möglichen Rang hat, wenn also die aus den Komponenten $\boldsymbol{g}_j'(\hat{\boldsymbol{x}})$ von $\boldsymbol{g}'(\hat{\boldsymbol{x}})$ gebildeten Vektoren linear unabhängig sind. Ist $\hat{\boldsymbol{x}} \in M$ weiterhin ein regulärer Punkt, so kann man

$$T(\hat{\boldsymbol{x}}) := \{\boldsymbol{z} : \boldsymbol{g}'(\hat{\boldsymbol{x}})\boldsymbol{z} = \boldsymbol{0}\} \tag{$**$}$$

als *Tangentialraum* an der Stelle $\hat{\boldsymbol{x}}$ auffassen, da $T(\hat{\boldsymbol{x}})$ alle Tangenten der durch $\hat{\boldsymbol{x}}$ in M verlaufenden Kurven enthält.

Bei den Strategien der *aktiven* Menge behandeln wir ein Problem von der Form

$$f(\boldsymbol{x}) = \min \quad \text{mit} \quad \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) \geq \boldsymbol{b}. \tag{$***$}$$

Hier versuchen wir aus dem Ungleichungssystem $\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) \geq \boldsymbol{b}$ diejenigen Ungleichungen herauszufinden, bei denen Gleichheit angenommen wird. Das sind die sogenannten *aktiven* Ungleichungen. Beide Probleme sind eng verwandt. Aus $\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{b}$ kann man $\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) \geq \boldsymbol{b}$, $\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) \leq \boldsymbol{b}$ machen. Multipliziert man die letzte Gleichung mit -1, so erhält man $-\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) \geq -\boldsymbol{b}$, insgesamt

$$\begin{pmatrix} \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) \\ -\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) \end{pmatrix} \geq \begin{pmatrix} \boldsymbol{b} \\ -\boldsymbol{b} \end{pmatrix},$$

also die Form $(***)$. Aus $(***)$ kann man $\boldsymbol{z} := \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) - \boldsymbol{b} \geq \boldsymbol{0}$ ableiten, also $\boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{z}) := \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) - \boldsymbol{z} = \boldsymbol{b}$, allerdings mit $\boldsymbol{z} \geq \boldsymbol{0}$. Der neue Vektor $\boldsymbol{z}$ wird auch als Vektor der *Schlupfvariabeln* bezeichnet. Obwohl die Probleme formal ähnlich sind, sind die Vorgehensweisen in beiden Problemen verschieden. Wir behandeln nur den Fall, daß $\boldsymbol{g}$ eine lineare Funktion ist. Dieses Kapitel entstammt i. w. aus dem Vorlesungstext C. Geiger: Optimierung, Universität Hamburg, 1998, Kapitel 9 und 10.

10.1 Reduktion bei linearen Gleichungsrestriktionen

Gegeben sei die Aufgabe ($*$) in der Form

$$\text{minimiere} \quad f(\boldsymbol{x}) \quad \text{unter den Nebenbedingungen} \quad \boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b} \tag{10.1}$$

mit $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$, $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{m\times n}$, $\boldsymbol{b} \in \mathbb{R}^m$, $f \in \mathrm{C}^1(\mathbb{R}^n)$. Damit $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$ überhaupt Lösungen besitzt, nehmen wir an, daß $m < n$ ist und $\boldsymbol{A}$ den vollen Rang m hat. Bei dem Gleichungssystem handelt es sich also um ein *unterbestimmtes* System. In diesem Fall ist der *zulässige Bereich*

$$M := \{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n \,:\, \boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}\},$$

darstellbar in der Form

$$M = \hat{\boldsymbol{x}} + \mathrm{Kern}(\boldsymbol{A}), \tag{10.2}$$

wobei $\hat{\boldsymbol{x}}$ irgendeine spezielle Lösung von $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$ ist. Unter $\mathrm{Kern}(\boldsymbol{A})$ versteht man die Menge aller Lösungen des *homogenen* Gleichungssystems $\boldsymbol{Az} = \boldsymbol{0}$, also

$$\mathrm{Kern}(\boldsymbol{A}) := \{\boldsymbol{z} \,:\, \boldsymbol{Az} = \boldsymbol{0}\}.$$

Damit ist der zulässige Bereich, bis auf die Verschiebung $\hat{\boldsymbol{x}}$, ein *Vektorraum* der - unter den getroffenen Voraussetzungen - die Dimension $m - n$ hat (Lehrbücher über lineare Algebra). Setzen wir $\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) := \boldsymbol{Ax}$, so ist $\boldsymbol{g}' = \boldsymbol{A}$ von $\boldsymbol{x}$ unabhängig mit maximalem Rang. Alle zulässigen Punkte sind also regulär und

$$\mathrm{Kern}(\boldsymbol{A}) = T(\boldsymbol{x}) \quad \text{für jedes zulässige} \quad \boldsymbol{x}.$$

Damit hat der frühere Satz 7.5angewendet auf das Problem (10.1) die folgende Form.

Satz 10.1. Sei $\boldsymbol{x}^* \in M$ lokales Minimum von f unter den Nebenbedingungen $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$. Hat $\boldsymbol{A}$ den maximalen Rang m mit $m < n$, dann existiert ein Vektor $\boldsymbol{\lambda}^* \in \mathbb{R}^m$ mit

$$\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\lambda}^* = f'(\boldsymbol{x}^*). \tag{10.3}$$

Die Struktur der zulässigen Menge M hatten wir in (10.2) bereits kennengelernt. Sei $\boldsymbol{Z} \in \mathbb{R}^{n\times n-m}$ eine Matrix, die in ihren Spalten eine Basis von $\mathrm{Kern}(\boldsymbol{A})$ enthält. Dann hat M bei beliebigem $\hat{\boldsymbol{x}} \in M$ die Form

$$M = \{\boldsymbol{x} \,:\, \boldsymbol{x} = \hat{\boldsymbol{x}} + \boldsymbol{Zu}, \boldsymbol{u} \in \mathbb{R}^{n-m}\} \tag{10.4}$$

und (10.1) kann als *unrestringierte* Optimierungsaufgabe geschrieben werden:

$$\text{Minimiere} \quad F(\boldsymbol{u}) := f(\hat{\boldsymbol{x}} + \boldsymbol{Zu}), \quad \boldsymbol{u} \in \mathbb{R}^{n-m}. \tag{10.5}$$

Wir müssen jetzt noch klären, wie die numerische Ermittlung von $\hat{\boldsymbol{x}}$ und $\boldsymbol{Z}$ möglichst zweckmäßig vorgenommen werden kann. Da $\boldsymbol{A}$ maximalen Rang hat, gibt es eine quadratische, nichtsinguläre $m \times m$ Teilmatrix, bestehend aus m Spalten von $\boldsymbol{A}$. Naheliegend ist folgende *Eliminationsmethode*. Sei

$$\boldsymbol{A} = (\,\boldsymbol{A}_1 \quad \boldsymbol{A}_2\,)\,,\ \boldsymbol{A}_1 \in \mathbb{R}^{m\times m},\ \boldsymbol{A}_2 \in \mathbb{R}^{m\times(n-m)},\ \boldsymbol{A}_1 \text{ invertierbar.}$$

Dann lautet $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$ mit $\boldsymbol{x} = \binom{\boldsymbol{x}_1}{\boldsymbol{x}_2}$, $\boldsymbol{x}_1 \in \mathbb{R}^m$, $\boldsymbol{x}_2 \in \mathbb{R}^{n-m}$:

$$\boldsymbol{A}_1\boldsymbol{x}_1 + \boldsymbol{A}_2\boldsymbol{x}_2 = \boldsymbol{b},$$

woraus man rein formal

$$\boldsymbol{x}_1 = -\boldsymbol{A}_1^{-1}\boldsymbol{A}_2\boldsymbol{x}_2 + \boldsymbol{A}_1^{-1}\boldsymbol{b}$$

erhält. Man kann also

$$\hat{\boldsymbol{x}} := \begin{pmatrix} \boldsymbol{A}_1^{-1} \\ \boldsymbol{0} \end{pmatrix} \boldsymbol{b}, \quad \boldsymbol{Z} := \begin{pmatrix} -\boldsymbol{A}_1^{-1}\boldsymbol{A}_2 \\ \boldsymbol{I} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{n \times n-m}, \quad \boldsymbol{I} \in \mathbb{R}^{n-m \times n-m}.$$

setzen. Allgemeiner kann man nach Matrizen $\boldsymbol{Y} \in \mathbb{R}^{n\times m}$, $\boldsymbol{Z} \in \mathbb{R}^{n\times(n-m)}$ fragen mit den Eigenschaften

$$\boldsymbol{AY} = \boldsymbol{I} \in \mathbb{R}^{m\times m}, \quad \boldsymbol{AZ} = \boldsymbol{0} \in \mathbb{R}^{m\times n-m}, \quad (\boldsymbol{Y}\ \boldsymbol{Z}) \in \mathbb{R}^{n\times n} \text{ invertierbar.} \tag{10.6}$$

Gilt (10.6), so ist $\hat{\boldsymbol{x}} := \boldsymbol{Yb}$ Lösung von $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$, und die Spalten von $\boldsymbol{Z}$ bilden eine Basis von Kern$\,(\boldsymbol{A})$. Die Eliminationsmethode entspricht der Wahl

$$\boldsymbol{Y} := \begin{pmatrix} \boldsymbol{A}_1^{-1} \\ \boldsymbol{0} \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{Z} := \begin{pmatrix} -\boldsymbol{A}_1^{-1}\boldsymbol{A}_2 \\ \boldsymbol{I} \end{pmatrix}.$$

Numerisch stabiler ist die folgende Wahl: man ermittle eine $\boldsymbol{QR}$-Zerlegung (etwa mit dem Householder-Verfahren)

$$\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{Q}\begin{pmatrix} \boldsymbol{R} \\ \boldsymbol{0} \end{pmatrix} = (\,\boldsymbol{Q}_1 \quad \boldsymbol{Q}_2\,)\begin{pmatrix} \boldsymbol{R} \\ \boldsymbol{0} \end{pmatrix} = \boldsymbol{Q}_1\boldsymbol{R}, \tag{10.7}$$

mit einer orthogonalen Matrix $\boldsymbol{Q} \in \mathbb{R}^{n\times n}$, einer oberen Dreiecksmatrix $\boldsymbol{R} \in \mathbb{R}^{m\times m}$ sowie $\boldsymbol{Q}_1 \in \mathbb{R}^{n\times m}$, $\boldsymbol{Q}_2 \in \mathbb{R}^{n\times(n-m)}$; damit setze man

$$\boldsymbol{Y} := \boldsymbol{Q}_1\boldsymbol{R}^{-\mathrm{T}}, \quad \boldsymbol{Z} := \boldsymbol{Q}_2 \tag{10.8}$$

(mit $\boldsymbol{R}^{-\mathrm{T}} := (\boldsymbol{R}^{-1})^{\mathrm{T}}$). Tatsächlich haben die so definierten Matrizen $\boldsymbol{Y}, \boldsymbol{Z}$ die in (10.6) genannten Eigenschaften:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{AY} &= (\boldsymbol{Q}_1\boldsymbol{R})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}_1\boldsymbol{R}^{-\mathrm{T}} = \boldsymbol{R}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}_1\boldsymbol{R}^{-\mathrm{T}} = \boldsymbol{R}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{R}^{-\mathrm{T}} = \boldsymbol{I}, \\ \boldsymbol{AZ} &= (\boldsymbol{Q}_1\boldsymbol{R})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}_2 = \boldsymbol{R}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}_2 = \boldsymbol{R}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{0} = \boldsymbol{0}. \end{aligned}$$

Weiter gilt: die durch die Spalten von $\boldsymbol{Z}$ gelieferte Basis von Kern$\,(\boldsymbol{A})$ ist orthonormiert, und $\hat{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{Yb} = \boldsymbol{Q}_1(\boldsymbol{R}^{-\mathrm{T}}\boldsymbol{b})$ ist orthogonal zu Kern$\,(\boldsymbol{A})$ (anders gesagt: $\hat{\boldsymbol{x}}$ ist die orthogonale Projektion von $\boldsymbol{0}$ auf M). Die mittels der Wahl (10.8) durchgeführte Reduzierung $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{Yb} + \boldsymbol{Zu}$ wird als *Orthogonalzerlegungsmethode* bezeichnet.

Einen allgemeinen Zugang zu den verschiedenen Reduktionsmethoden liefert folgende Überlegung: Ist $\boldsymbol{V}$ eine $(n-m)\times n$-Matrix, für welche $\begin{pmatrix} \boldsymbol{A} \\ \boldsymbol{V} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ invertierbar ist, so kann

$$\boldsymbol{y} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{y}_1 \\ \boldsymbol{y}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{A} \\ \boldsymbol{V} \end{pmatrix}\boldsymbol{x} - \begin{pmatrix} \boldsymbol{b} \\ \boldsymbol{0} \end{pmatrix} \tag{10.9}$$

als Variablentransformation im $\mathbb{R}^n$ aufgefaßt werden. In den neuen Variablen y_i wird M durch $\boldsymbol{y}_1 = \mathbf{0}$ beschrieben; die Komponenten von $\boldsymbol{y}_2$ können als freie Variablen aufgefaßt werden. (10.9) liefert somit für $\boldsymbol{x} \in M$

$$\boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{A} \\ \boldsymbol{V} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \boldsymbol{b} \\ \boldsymbol{y}_2 \end{pmatrix}.$$

Stellt man $\begin{pmatrix} \boldsymbol{A} \\ \boldsymbol{V} \end{pmatrix}^{-1}$ in der Form $\begin{pmatrix} \boldsymbol{Y} \\ \boldsymbol{Z} \end{pmatrix}$ mit $\boldsymbol{Y} \in \mathbb{R}^{n\times m}$, $\boldsymbol{Z} \in \mathbb{R}^{n\times(n-m)}$ dar, so gilt für $\boldsymbol{Y}, \boldsymbol{Z}$ (10.6), und für $\boldsymbol{x}$ erhält man mit $\boldsymbol{u} := \boldsymbol{y}_2$ die Gleichung

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{Y}\boldsymbol{b} + \boldsymbol{Z}\boldsymbol{u}.$$

Die Wahl $\boldsymbol{V} := (\,\mathbf{0} \quad \boldsymbol{I}\,)$ führt auf die Eliminationsmethode, die Wahl $\boldsymbol{V} := \boldsymbol{Q}_2^{\mathrm{T}}$ auf die Orthogonalzerlegungsmethode.

Das auf die Variablen $u_1, \ldots, u_{n-m}$ reduzierte Problem (10.5) kann nun mit einem der früher besprochenen Verfahren gelöst werden. Für die Ableitungen von F gilt aufgrund der Kettenregel mit $\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) := \nabla f(\boldsymbol{x}), \boldsymbol{G}(\boldsymbol{x}) := \nabla^2 f(\boldsymbol{x})$

$$\begin{aligned} \nabla_{\boldsymbol{u}} F(\boldsymbol{u}) &= \boldsymbol{Z}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{g}(\hat{\boldsymbol{x}} + \boldsymbol{Z}\boldsymbol{u}), \\ \nabla^2_{\boldsymbol{u}} F(\boldsymbol{u}) &= \boldsymbol{Z}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{G}(\hat{\boldsymbol{x}} + \boldsymbol{Z}\boldsymbol{u})\boldsymbol{Z} \end{aligned}$$

(*reduzierter Gradient* bzw. *reduzierte Hesse-Matrix*). Hinweis: Wir haben früher auch f' für ∇f und f'' für $\nabla^2 f$ geschrieben. Aus Stabilitätsgründen wird empfohlen, im Verlaufe des auf (10.5) angewandten Iterationsverfahrens jeweils $\hat{\boldsymbol{x}}$ durch den aktuellen Punkt $\boldsymbol{x} := \boldsymbol{x}^k$ zu ersetzen.

Will man z.B. das *Newton-Verfahren* verwenden, so gewinnt man die Suchrichtung $\boldsymbol{r}$ im „$\boldsymbol{u}$-Raum“ durch Minimierung der quadratischen Approximation

$$\begin{aligned} F(\boldsymbol{u}) &\approx F(\mathbf{0}) + \boldsymbol{u}^{\mathrm{T}} \nabla_{\boldsymbol{u}} F(\mathbf{0}) + \frac{1}{2}\, \boldsymbol{u}^{\mathrm{T}} \nabla^2_{\boldsymbol{u}} F(\mathbf{0}) \boldsymbol{u} \\ &= f + \boldsymbol{u}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{Z}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{g} + \frac{1}{2}\, \boldsymbol{u}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{Z}^{\mathrm{T}} \mathbf{GZu} \end{aligned} \tag{10.10}$$

(mit $f, \boldsymbol{g}, \boldsymbol{G}$ an der Stelle $\boldsymbol{x}$) aus

$$\boldsymbol{Z}^{\mathrm{T}} \mathbf{GZr} = -\, \boldsymbol{Z}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{g}, \tag{10.11}$$

denn (10.11) geht aus (6.7) einfach durch Ersetzen von $\boldsymbol{g}$, $\boldsymbol{G}$ durch die entsprechenden reduzierten Größen hervor. Die zugehörige Suchrichtung $\mathbf{s}$ im „$\boldsymbol{x}$-Raum“ ist dann

$$\mathbf{s} = \mathbf{Zr}.$$

Der Ansatz für *Quasi-Newton-Verfahren* (vgl. Abschnitt 6) lautet entsprechend

$$\begin{aligned} \boldsymbol{r} &= -\mathbf{H}\, \nabla_{\boldsymbol{u}} F(\mathbf{0}) = -\mathbf{H}\mathbf{Z}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{g}, \\ \mathbf{s} &= \mathbf{Zr} = -\mathbf{ZHZ}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{g}. \end{aligned} \tag{10.12}$$

Die in den Update-Formeln auftretenden Vektoren $\mathbf{p}, \boldsymbol{y}$ errechnen sich jetzt aus

$$\mathbf{p} = \boldsymbol{u}^+ - \boldsymbol{u} = \boldsymbol{u}^+ - \mathbf{0} = \alpha \boldsymbol{r}, \quad \boldsymbol{y} = \boldsymbol{Z}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}^+) - \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}))$$

mit $\boldsymbol{x}^+ = \boldsymbol{x} + \alpha \mathbf{s} = \boldsymbol{x} + \alpha \mathbf{Z}\mathbf{r} = \boldsymbol{x} + \boldsymbol{Z}\boldsymbol{u}^+$. Manchmal ist es erforderlich, *Lagrange-Parameter* $\lambda_1, \ldots, \lambda_m$ aus dem überbestimmten Gleichungssystem (vgl. (10.3), S. 85 mit $f' = \boldsymbol{g}$)

$$\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\lambda} = \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) \tag{10.13}$$

zu berechnen. Die Berechnung der λ_i's kann nötig sein, wenn (10.1) als Hilfsproblem auftritt für ein Problem mit Ungleichungen (vgl. Abschnitt 10.2, (10.22)) oder mit nichtlinearen Gleichungen (vgl. nächstes Kapitel), oder wenn eine Sensitivitätsanalyse durchgeführt werden soll. Ist $\boldsymbol{x}$ lokales Minimum von (10.1), dann existiert eine Lösung $\boldsymbol{\lambda}$ von (10.13), vgl. (10.3). Diese notwendige Bedingung aus Satz 10.1 ist übrigens äquivalent zur Bedingung

$$\nabla_{\boldsymbol{u}} F(\boldsymbol{u}) = \boldsymbol{Z}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) = \mathbf{0}$$

mit $\boldsymbol{x} := \hat{\boldsymbol{x}} + \boldsymbol{Z}\boldsymbol{u}$, also mit der notwendigen Bedingung aus Satz 1.8,angewandt auf $F(\boldsymbol{u})$; denn $\boldsymbol{Z}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) = \mathbf{0}$ bedeutet $\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) \in (\mathrm{Kern}(\boldsymbol{A}))^{\perp}$, andererseits ist, wenn G den von den Zeilen $\mathbf{a}_1, \ldots, \mathbf{a}_m$ von $\boldsymbol{A}$ erzeugten Vektorraum bezeichnet, Kern $(\boldsymbol{A}) = G^{\perp}$, so daß aus $(G^{\perp})^{\perp} = G$ die Behauptung folgt (vgl. hierzu die Argumentation im Absatz vor Satz 7.5 !). Entsprechend sind die Optimalitätsbedingungen 2. Ordnung der Sätze 7.5, 7.9 äquivalent mit jenen der Sätze 1.8, 1.10, angewandt auf $F(\boldsymbol{u})$ Doch zurück zu (10.13)! Besitzt (10.13) eine Lösung $\boldsymbol{\lambda}$, so ergibt die Multiplikation von links mit $\boldsymbol{Y}^{\mathrm{T}}$ wegen (10.6)

$$\boldsymbol{\lambda} = \boldsymbol{Y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}). \tag{10.14}$$

Ist (10.13) nicht lösbar (weil $\boldsymbol{x}$ noch kein stationärer Punkt ist), so kann man $\boldsymbol{\lambda}$ aus (10.14) als *Schätzung* für den Vektor der Lagrange-Parameter in einem benachbarten stationären Punkt ansehen. Verwendet man zur Gewinnung von $\boldsymbol{Y}$ eine QR-Zerlegung von $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$ (vgl. (10.7), (10.8)), so hat $\boldsymbol{\lambda}$ aus (10.14) eine interessante Interpretation: Es gilt für jedes $\boldsymbol{\lambda} \in \mathbb{R}^m$

$$\begin{aligned}
\|\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\lambda} - \boldsymbol{g}\|_2 &= \|\boldsymbol{Q}\begin{bmatrix}\boldsymbol{R}\\ \mathbf{0}\end{bmatrix}\boldsymbol{\lambda} - \boldsymbol{g}\|_2 \\
&= \|\boldsymbol{Q}\{\begin{bmatrix}\boldsymbol{R}\\ \mathbf{0}\end{bmatrix}\boldsymbol{\lambda} - \boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{g}\}\|_2 \\
&= \|\begin{bmatrix}\boldsymbol{R}\\ \mathbf{0}\end{bmatrix}\boldsymbol{\lambda} - \begin{bmatrix}\boldsymbol{Q}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{g}\\ \boldsymbol{Q}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{g}\end{bmatrix}\|_2 \\
&\geq \|\boldsymbol{Q}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{g}\|_2,
\end{aligned}$$

und „=“ wird für $\boldsymbol{\lambda} = \boldsymbol{R}^{-1}\boldsymbol{Q}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{g} = \boldsymbol{Y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{g}$ angenommen; (10.14) gibt also die Lösung der *Ausgleichsaufgabe*

$$\text{Minimiere} \quad \|\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\lambda} - \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x})\|_2, \quad \boldsymbol{\lambda} \in \mathbb{R}^m \tag{10.15}$$

und $\boldsymbol{Y}^{\mathrm{T}}$ ist als die *Pseudoinverse*

$$(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})^{+} := (\mathbf{A}\mathbf{A}^{\mathrm{T}})^{-1}\boldsymbol{A}$$

von $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$ enttarnt.

Das folgende *Beispiel* zeigt, wie problematisch ein naives Umgehen mit (10.13) sein kann: sei mit $\varepsilon > 0$

$$\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1+\varepsilon & 1 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}^*) = \begin{bmatrix} 2 \\ 2+\varepsilon \\ -1 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) = \begin{bmatrix} 2+\varepsilon \\ 2 \\ -1+\varepsilon \end{bmatrix};$$

für $\boldsymbol{x}^*$ ist (10.13) lösbar, man erhält $\boldsymbol{\lambda}^* = \binom{1}{1}$; für $\boldsymbol{x}$ ist (10.13) inkonsistent, die Berechnung von $\boldsymbol{\lambda}$ aus den ersten beiden Zeilen von (10.13) liefert $\boldsymbol{\lambda} = \binom{-1}{3+\varepsilon}$ (also $\|\boldsymbol{\lambda} - \boldsymbol{\lambda}^*\|_2 > 2$, obwohl $\|\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) - \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}^*)\|_2 = \sqrt{3}\varepsilon$!); dagegen liefert (10.14) via $\boldsymbol{QR}$-Zerlegung

$$\lambda_1 = \frac{1+2\varepsilon}{1+\varepsilon+\varepsilon^2} \approx 1+\varepsilon, \quad \lambda_2 = \frac{1+\varepsilon^2}{1+\varepsilon+\varepsilon^2} \approx 1 - \varepsilon.$$

10.1.1 Reduktion bei quadratischer Zielfunktion

Abschließend spezialisieren wir unsere Überlegungen auf die *quadratische Optimierungsaufgabe*

$$\text{Minimiere } f(\boldsymbol{x}) := \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\mathbf{C}\mathbf{x} + \boldsymbol{d}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}, \text{ unter der Nebenbedingung } \boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \tag{10.16}$$

mit einer symmetrischen $n \times n$-Matrix $\boldsymbol{C}$ und mit $\boldsymbol{x}$, $\boldsymbol{d} \in \mathbb{R}^n$.

Die reduzierte Zielfunktion ergibt sich hier zu

$$F(\boldsymbol{u}) = f(\boldsymbol{Y}\boldsymbol{b} + \boldsymbol{Z}\boldsymbol{u}) = \frac{1}{2}\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{Z}^{\mathrm{T}}\mathbf{C}\mathbf{Z})\boldsymbol{u} + (\boldsymbol{d} + \mathbf{C}\mathbf{Y}\mathbf{b})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Z}\boldsymbol{u} + (\boldsymbol{d} + \frac{1}{2}\mathbf{C}\mathbf{Y}\mathbf{b})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Y}\boldsymbol{b}.$$

Ist $\boldsymbol{Z}^{\mathrm{T}}\mathbf{C}\mathbf{Z}$ positiv definit, so ist das Minimum $\boldsymbol{u}^*$ von $\boldsymbol{F}$ gegeben durch $\nabla_{\boldsymbol{u}}F(\boldsymbol{u}) = 0$, d.h. als Lösung des linearen Gleichungssystems

$$(\boldsymbol{Z}^{\mathrm{T}}\mathbf{C}\mathbf{Z})\boldsymbol{u} = -\,\boldsymbol{Z}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{d} + \mathbf{C}\mathbf{Y}\mathbf{b}). \tag{10.17}$$

Wir haben also folgenden **Algorithmus** zur Lösung von (10.16):

a) Bestimme Matrizen $\mathbf{Y}, \mathbf{Z}$ mit (10.6), etwa mittels QR-Zerlegung (10.7) und (10.8).

b) Löse das lineare Gleichungssystem (10.17), etwa mittels $\mathbf{L}\mathbf{L}^{\mathrm{T}}$- oder $\mathbf{L}\mathbf{D}\mathbf{L}^{\mathrm{T}}$-Zerlegung von $\boldsymbol{Z}^{\mathrm{T}}\mathbf{C}\mathbf{Z}$ (gleichzeitig Test auf positive Definitheit!), das Ergebnis sei $\boldsymbol{u}^*$.

c) Berechne $\boldsymbol{x}^* := \boldsymbol{Y}\boldsymbol{b} + \boldsymbol{Z}\boldsymbol{u}^*$.

d) Falls Lagrange-Parameter benötigt werden: Berechne $\boldsymbol{\lambda}^* := \boldsymbol{Y}^{\mathrm{T}}(\mathbf{C}\mathrm{x}^* + \boldsymbol{d})$.

Natürlich könnte man zur Lösung von (10.16) auch von den notwendigen Bedingungen der Form

$$\nabla L(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\lambda}) = \mathbf{0}$$

mit $L(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\lambda}) := f(\boldsymbol{x}) - (\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\lambda}$ ausgehen. Die hier eingeführte Funktion L ist die bekannte *Lagrange-Funktion*. Ausgeschrieben lautet dieses lineare Gleichungssystem

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{C} & -\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}} \\ -\boldsymbol{A} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{x} \\ \boldsymbol{\lambda} \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} \boldsymbol{d} \\ \boldsymbol{b} \end{bmatrix}. \tag{10.18}$$

Die hier auftretende *Lagrange-Matrix* $\in \mathbb{R}^{(n+m)\times(n+m)}$ ist allerdings um einiges größer als die bei unserem obigen Vorgehen vorkommenden Matrizen. In Fletcher [1987], p. 237, wird gezeigt, daß die obige Methode als eine „subtile Art der Faktorisierung der Lagrange-Matrix" aufgefaßt werden kann. In Fletcher [1987]kann man auch Hinweise auf die Behandlung nichtlinearer Nebenbedingungen finden.

10.2 Die Strategie der aktiven Menge bei linearen Ungleichungen

In diesem Abschnitt geht es um die folgende Aufgabe.

$$f(\boldsymbol{x}) = \min, \text{ bei } \boldsymbol{a}_j^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} \geq b_j,\ j \in I = \{1, \ldots, m'\},\ \boldsymbol{a}_k^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} = b_k,\ k \in E = \{m'+1, \ldots, m\} \tag{10.19}$$

mit $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$, $\boldsymbol{a}_i \in \mathbb{R}^n$, $b_i \in \mathbb{R}$, $i = 1, \ldots, m$, $f \in \mathrm{C}^1(\mathbb{R}^n)$. Bei der Herleitung der notwendigen Optimalitätsbedingung von Satz 7.13hatten wir argumentiert: ist $\boldsymbol{x}^*$ lokale Lösung von (10.19), so ist $\boldsymbol{x}^*$ auch lokale Lösung von

$$f(\boldsymbol{x}) = \min, \text{ unter den Nebenbedingungen } \boldsymbol{a}_j^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} = b_j,\ j \in J(\boldsymbol{x}^*) \cup E, \tag{10.20}$$

wobei $J(\boldsymbol{x}^*) = \{i \in I \,:\, \boldsymbol{a}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}^* = b_i\}$ die Indexmenge der in $\boldsymbol{x}^*$ *aktiven* Ungleichungsrestriktionen ist. Nun stehen uns zwar Verfahren zur Lösung von (10.20) zur Verfügung (vgl. Abschnitt 10.1, S. 85) – jedoch ist $J(\boldsymbol{x}^*)$ leider i.a. a priori nicht bekannt. Die *Strategie der aktiven Menge* besteht nun darin, iterativ vorzugehen, in jedem Schritt das Hilfsproblem (10.20) mit einer Schätzung J_a anstelle von $J(\boldsymbol{x}^*)$ zu bearbeiten und J_a geeignet fortzuschreiben. Es bezeichne im k-ten Schritt $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}^k$ den aktuellen Punkt, dieser sei zulässig (!), und es sei $J_a \subset J(\boldsymbol{x})$ (J_a wird häufig als **a**ktive Menge bezeichnet, obwohl i.a. $J_a \neq J(\boldsymbol{x})$ ist; das a in J_a steht deshalb besser für **a**ktuell). Dann lautet das zu bearbeitende Hilfsproblem nach einer Verschiebung um $\boldsymbol{x}$

$$f(\boldsymbol{x} + \Delta\boldsymbol{x}) = \min,\ \Delta\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n \text{ unter den Nebenbedingungen } \boldsymbol{a}_j^{\mathrm{T}}\Delta\boldsymbol{x} = 0,\ j \in J_a \cup E. \tag{10.21}$$

Die Menge J_a muß in folgenden Fällen verändert werden:

(i) Ist $\Delta\boldsymbol{x} = \mathbf{0}$ Lösung von (10.21) (ist also auf der durch $J_a \cup E$ gegebenen Mannigfaltigkeit nichts mehr zu holen), ist aber $\boldsymbol{x}$ noch nicht Lösung von (10.19), so muß man die Gleichungsrestriktionen lockern, also (mindestens) einen Index q aus J_a entfernen; die Frage ist, welchen Index man wählen soll.

(ii) Verletzt man beim Abwärtsgehen längs einer für (10.21) zulässigen Suchrichtung eine Ungleichung $\mathbf{a}_p^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} \geq b_p$, $p \notin J_a$, so muß man vor dem Verlassen des zulässigen Bereichs von (10.19) anhalten und p in J_a aufnehmen.

Zunächst *zu (i)*: Ist $\Delta\boldsymbol{x} = \mathbf{0}$ Lösung von (10.21), so liefert Satz 7.5(Regularität vorausgesetzt) die Existenz von Zahlen λ_i, $i \in J_a \cup E$, mit

$$\nabla f(\boldsymbol{x}) = \sum_{i \in J_a \cup E} \lambda_i \mathbf{a}_i. \tag{10.22}$$

Gilt $\lambda_i \geq 0$ für alle $i \in J_a$, so ist mit $\lambda_i := 0$ für $i \in J(\boldsymbol{x}) \setminus J_a$ die notwendige Bedingung aus Satz 7.13 dafür erfüllt, daß $\boldsymbol{x}$ Lösung von (10.19) ist. Gilt dagegen für ein $q \in J_a$

$$\lambda_q < 0,$$

so kann man eine für (10.19) zulässige Abstiegsrichtung finden, wenn man zuläßt, daß die Restriktion q inaktiv wird (klar? Tip: vgl. die Überlegung vor Satz 7.13).Gibt es mehrere negative Lagrange-Parameter λ_i, so wählt man üblicherweise $q \in J_a$ so, daß

$$\lambda_q = \min_{i \in J_a} \lambda_i. \tag{10.23}$$

Nun *zu (ii)*: Ist $\mathbf{s}$ eine für (10.21) zulässige Suchrichtung (d.h. gilt $\mathbf{a}_i^{\mathrm{T}}\mathbf{s} = 0$ für $i \in J_a \cup E$), so unterliegt die Schrittlänge $\alpha > 0$ den Einschräkungen

$$\mathbf{a}_i^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{x} + \alpha\mathbf{s}) \geq b_i, \quad i \in I \setminus J_a\,;$$

dies ist gleichbedeutend mit $\alpha \leq \bar{\alpha}$, wobei

$$\bar{\alpha} := \min\{\frac{b_i - \mathbf{a}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}}{\mathbf{a}_i^{\mathrm{T}}\mathbf{s}} \;:\; i \in I \setminus J_a,\, \mathbf{a}_i^{\mathrm{T}}\mathbf{s} < 0\} \tag{10.24}$$

(mit $\bar{\alpha} := \infty$, falls $\mathbf{a}_i^{\mathrm{T}}\mathbf{s} \geq 0$ für alle $i \in I \setminus J_a$).
Man muß also die verwendete Schrittlängenstrategie mit der Bedingung $\alpha \leq \bar{\alpha}$ koppeln. Wird so $\alpha = \bar{\alpha}$ geliefert, so nehme man den (bzw. einen) Index p in J_a auf, für welchen gilt

$$\frac{b_p - \mathbf{a}_p^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}}{\mathbf{a}_p^{\mathrm{T}}\mathbf{s}} = \bar{\alpha},\, p \in I \setminus J_a,\, \mathbf{a}_p^{\mathrm{T}}\mathbf{s} < 0 \tag{10.25}$$

(die Restriktion p wird im neuen Punkt $\boldsymbol{x} + \bar{\alpha}\mathbf{s}$ gerade aktiv).

Modell-Algorithmus für die Strategie der aktiven Menge:

Wähle zulässigen Punkt $\boldsymbol{x}$, setze $J_a := J(\boldsymbol{x})$;

```
REPEAT
    IF   Δx = 0  als Lösung von (10.21) akzeptiert   THEN
         berechne λ_i, i ∈ J_a ∪ E,   aus (10.22);
         bestimme Index q ∈ J_a   aus (10.23);
         IF  λ_q ≥ 0   THEN   STOP   ELSE
              J_a := J_a \ {q}  ;
    bestimme Suchrichtung  s  für (10.21);
    bestimme Schrittlänge  α ≤ ᾱ  für (10.21) (vgl. (10.24))
    IF   α = ᾱ   THEN
         bestimme Index  p ∈ I \ J_a  aus (10.25);
         J_a := J_a ∪ {p};
    x := x + αs;
UNTIL   Abbruch.
```

Beispiel: $n = 2$, $m' = m = 3$, $f(\boldsymbol{x}) = x_1^2 + x_2^2$, $\mathbf{a}_1 = \binom{-1}{0}$, $b_1 = -2$, $\mathbf{a}_2 = \binom{0}{-1}$, $b_2 = -1$, $\mathbf{a}_3 = \binom{1}{3}$, $b_3 = 2$. Man zeichne den zulässigen Bereich sowie einige Höhenlinien von f und verfolge den Ablauf des Algorithmus anhand dieser Zeichnung:

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{x}^0 := \tbinom{2}{1},\ J_a := \{1,2\}\ &:\ \Delta\boldsymbol{x} = \mathbf{0} \quad \text{ist Lösung von (10.21)}\\
&\lambda_1 = -4, \quad \lambda_2 = -2, \quad q = 1, \quad J_a = \{2\}\\
&\mathbf{s} = \tbinom{-2}{0}, \quad \alpha = 1 < \bar{\alpha} = \tfrac{3}{2}\\
\boldsymbol{x}^1 = \tbinom{0}{1}\ &:\ \Delta\boldsymbol{x} = \mathbf{0} \quad \text{ist Lösung von (10.21)}\\
&\lambda_2 = -2, \quad q = 2, \quad J_a = \emptyset\\
&\mathbf{s} = \tbinom{0}{-1}, \quad \alpha = \tfrac{1}{3} = \bar{\alpha}, \quad J_a = \{3\}\\
\boldsymbol{x}^2 = \tbinom{0}{\frac{2}{3}}\ &:\ \Delta\boldsymbol{x} = \mathbf{0} \quad \text{ist nicht Lösung von (10.21)}\\
&\mathbf{s} = \tbinom{\frac{1}{5}}{-\frac{1}{15}}, \quad \alpha = 1 < \bar{\alpha} = 10\\
\boldsymbol{x}^3 = \tbinom{\frac{1}{5}}{\frac{3}{5}}\ &:\ \Delta\boldsymbol{x} = \mathbf{0} \quad \text{ist Lösung von (10.21)}\\
&\lambda_3 = \tfrac{2}{5}, \quad \text{STOP}\ :\ \boldsymbol{x}^3 \quad \text{ist Lösung von (10.19).}
\end{aligned}
$$

Bemerkungen.

a) Einen zulässigen *Start-Punkt* kann man wie bei linearen Optimierungsproblemen durch Lösen eines Hilfsproblems durch das Simplexverfahren („Phase I“) erhalten. Zur Erinnerung: einen (Basis-) Vektor mit

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}, \quad \boldsymbol{x} \geq \mathbf{0}$$

(mit $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $\boldsymbol{b} \geq \boldsymbol{0}$) gewinnt man durch Lösen von

$$\sum_{i=1}^{m} z_i = \min, \text{ bei } \boldsymbol{Ax} + \boldsymbol{z} = \boldsymbol{b}, \ \boldsymbol{x} \geq 0, \boldsymbol{z} \geq 0.$$

Ein Start-Basisvektor hierfür ist $\binom{\boldsymbol{x}}{\boldsymbol{z}} = \binom{\boldsymbol{0}}{\boldsymbol{b}}$.

b) Zur *Bestimmung der* λ_i wird man, wie im Abschnitt 10.1, S. 85erläutert, anstelle von (10.22) die Vorschrift (10.14) heranziehen; diese ermöglicht die Berechnung von Zahlen λ_i auch in dem Fall, daß $\Delta\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$ nicht exakte Lösung von (10.21) ist.

c) Die Abfrage, ob $\Delta\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$ *als Lösung von (10.21) akzeptiert* wird, hat es in sich. Stellt man hier hohe Anforderungen, so kann die `REPEAT`-Schleife mit unverändertem J_a sehr oft durchlaufen werden müssen (i.a. erfordert die exakte Lösung von (10.21) ja unendlich viele Schritte) – was sich sicher nicht lohnt, wenn J_a noch nicht die „richtige“ Menge (nämlich $J(\boldsymbol{x}^*)$) ist. Stellt man geringe Anforderungen (etwa, indem man $\Delta\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$ in *jedem* Schritt als Lösung akzeptiert, d.h. stets nur einen Iterationsschritt zur Lösung eines Problems (10.21) ausführt), so können die (etwa aus (10.14) bestimmten) λ_i eine falsche Vorzeicheninformation liefern; dies kann z.B. dazu führen, daß man zu früh bei STOP landet oder daß für die neue Schrittlänge $\alpha = 0$ genommen und deshalb der gerade entfernte Index wieder hinzugefügt werden muß (da eben die falsche Wand verlassen worden ist) oder daß sich ein *Zigzagging* zwischen verschiedenen Wänden und somit nur eine langsame Konvergenz ergibt (vgl. Figur 3.1, S. 23).

Man wird hier also einen vernünftigen Kompromiß zwischen hohen und geringen Anforderungen schließen müssen. Eine Möglichkeit ist folgende (hierzu und zu weiteren Strategien vgl. FLETCHER [1987], p. 269 f.): es bezeichne f den augenblicklichen Zielfunktionswert $f(\boldsymbol{x})$, $\tilde{f}$ den Funktionswert vor der letzten Verkleinerung von J_a, und δ_f eine Schätzung der im jetzigen Schritt möglichen Verkleinerung der Zielfunktion (zur Bestimmung von δ_f vgl. Bemerkung d)); dann wird $\Delta\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$ als Lösung von (10.21) akzeptiert, wenn

$$\delta_f \leq \tilde{f} - f\,;$$

gleichzeitig wird mit einer vorgegebenen Toleranz $\varepsilon > 0$ die Schätzung δ_f für das STOP-Kriterium

$$\delta_f \leq \varepsilon$$

herangezogen. Damit und mit Bemerkung b) erhält man die folgende Präzisierung der ersten Anweisung der `REPEAT`-Schleife des Modell-Algorithmus:

`IF` $\delta_f \leq \tilde{f} - f$ `THEN`
  berechne λ_i, $i \in J_a \cup E$, aus (10.14);
  bestimme Index $q \in J_a$ aus (10.23);
  `IF` ($\lambda_q \geq 0$ `AND` $\delta_f \leq \varepsilon$) `THEN` STOP;
  `IF` $\lambda_q < 0$ `THEN` $J_a := J_a \setminus \{q\}$;

d) Für die *Schätzung* δ_f aus Bemerkung c) bietet sich ein Ansatz 2. Ordnung an. Ein (ungedämpfter) Newton-Schritt (vgl. (10.11)) verkleinert, wenn $\boldsymbol{Z}^{\mathrm{T}}\mathbf{G}\boldsymbol{Z}$ positiv definit ist, den Wert der quadratischen Approximation an $F(\boldsymbol{u})$ (vgl. (10.10)) um

$$-\frac{1}{2}\boldsymbol{r}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Z}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{g} = \frac{1}{2}\boldsymbol{g}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Z}(\boldsymbol{Z}^{\mathrm{T}}\mathbf{G}\mathbf{Z})^{-1}\boldsymbol{Z}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{g}.$$

Man nimmt deshalb

$$\delta_f := \frac{1}{2}\boldsymbol{g}^{\mathrm{T}}\mathbf{Z}\mathbf{H}\mathbf{Z}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{g}, \tag{10.26}$$

wobei $\mathbf{H}$ die inverse reduzierte Hesse-Matrix in $\boldsymbol{x}$ oder eine Approximation hierfür ist (also etwa eine Quasi-Newton-Matrix wie $\mathbf{H}_{BFGS}$, vgl. auch (10.12)).

e) Bei der Bearbeitung von (10.21) mittels einer Reduktionsmethode (vgl. Abschnitt 10.1, S. 85)müssen bei jeder Veränderung der Indexmenge J_a die Matrizen $\boldsymbol{Y}, \boldsymbol{Z}$ erneut berechnet werden. Nun verändert sich die Matrix $\boldsymbol{A}$ mit den Zeilen $\mathbf{a}_i^{\mathrm{T}}$, $i \in J_a \cup E$, ja lediglich durch Hinzufügen oder Streichen einer Zeile. Dies eröffnet die Möglichkeit, die Matrizen $\boldsymbol{Y}, \boldsymbol{Z}$ mittels einer *Modifikationstechnik* aus den alten Matrizen mit $O(n^2)$ Operationen zu gewinnen (eine völlige Neuberechnung von $\boldsymbol{Y}, \boldsymbol{Z}$ kostet dagegen $O(n^3)$ Operationen). Wir erläutern dies für die Orthogonalzerlegungsmethode für den Fall des Hinzufügens einer Zeile: sei also

$$\bar{\boldsymbol{A}}^{\mathrm{T}} = [\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}} \quad \mathbf{a}]$$

mit bekannter QR-Zerlegung von $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$ (vgl. (10.7))

$$\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{R} \\ \mathbf{0} \end{bmatrix};$$

wegen

$$\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\bar{\boldsymbol{A}}^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{R} & \mathbf{v}_1 \\ \mathbf{0} & \mathbf{v}_2 \end{bmatrix}$$

muß man nur *eine* Householder-Matrix $\mathbf{H}_{\ell+1}$ berechnen, um

$$\mathbf{H}_{\ell+1}\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\bar{\boldsymbol{A}}^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{R} & \mathbf{v}_1 \\ \mathbf{0} & \begin{smallmatrix}\gamma \\ \mathbf{0}\end{smallmatrix} \end{bmatrix}$$

(mit $\gamma \in \mathbb{R}$) zu erreichen (der Index $\ell + 1 := |J_a \cup E| + 1$ von $\mathbf{H}_{\ell+1}$ soll andeuten, daß diese Householder-Matrix auf die $(\ell+1)$-te Spalte der dahinter stehenden Matrix wirkt). Man muß dann lediglich noch $\bar{\boldsymbol{Q}} := \mathbf{Q}\mathbf{H}_{\ell+1}$ und hieraus $\bar{\boldsymbol{Z}}$ ausrechnen. (Für weitere Modifikationstechniken in der Numerischen Linearen Algebra vgl. Golub-van Loan [1996]; es sei daran erinnert, daß moderne Varianten des Simplexverfahrens ebenfalls mit (numerisch stabilen) Modifikationstechniken arbeiten). Verwendet man für das aus (10.21) resultierende Problem eine Quasi-Newton-Methode, so ist zu klären, wie nach einer Veränderung von J_a die aktuelle Update-Matrix $\mathbf{H}$ bzw. $\mathbf{B}$ fortzuschreiben ist (man beachte, daß sich deren Zeilen- und Spaltenzahl um 1 verändert); Hinweise gibt Fletcher [1987], p. 266, p. 275 (Question 11.4), p. 244/245 (Literaturhinweise).

f) Zur Bestimmung der Suchrichtung $\mathbf{s}$ kann man natürlich auch auf die *Lagrange-Newton-Iteration* zurückgreifen: (8.1.3) lautet für (10.21)

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{G} & -\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}} \\ -\boldsymbol{A} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{s} \\ \boldsymbol{\lambda}^{+} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\boldsymbol{g} \\ \mathbf{0} \end{bmatrix}.$$

Dieses lineare Gleichungssystem liefert überdies Zahlen λ_i für den nächsten Schritt (sofern J_a beim Übergang zum nächsten Schritt nicht vergrößert wird). Daß in diese λ_i Informationen 2. Ordnung über f eingehen (anders als in (10.14)), macht plausibel, daß man sie als *Schätzungen 2. Ordnung für die Lagrange-Parameter* eines benachbarten stationären Punktes auffassen kann.

10.2.1 Die Strategie der aktiven Menge bei quadratischer Zielfunktion

Abschließend spezialisieren wir den besprochenen Algorithmus auf die *quadratische Optimierungsaufgabe*

$$\begin{array}{l} \text{Minimiere} \quad f(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\mathbf{C}\mathbf{x} + \boldsymbol{d}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}, \quad \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n \\ \text{unter den Nebenbedingungen} \\ \qquad \mathbf{a}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} \geq b_i, \quad i \in I = \{1, \dots, m'\} \\ \qquad \mathbf{a}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} = b_i, \quad i \in E = \{m'+1, \dots, m\} \end{array} \tag{10.27}$$

($\boldsymbol{C}$ feste symmetrische $n \times n$-Matrix, $\boldsymbol{d} \in \mathbb{R}^n$). Die Hilfsprobleme (10.21) lauten hierfür

$$\begin{array}{l} \text{Minimiere} \quad \frac{1}{2}\Delta\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{C}\Delta\boldsymbol{x} + (\mathbf{C}\mathbf{x} + \boldsymbol{d})^{\mathrm{T}}\Delta\boldsymbol{x} \\ \text{unter den Nebenbedingungen} \\ \qquad \mathbf{a}_i^{\mathrm{T}}\Delta\boldsymbol{x} = 0, \quad i \in J_a \cup E. \end{array} \tag{10.28}$$

Sie können mit dem am Ende von Abschnitt 10.1, S. 85 beschriebenen Algorithmus im Prinzip exakt gelöst werden; die in der Bemerkung c) besprochene Problematik entfällt hier also. Weiter kann die Schrittlänge α explizit angegeben werden. Zusammengefaßt erhält man folgenden **Algorithmus** (vgl. dazu das obige Beispiel):

Wähle zulässigen Punkt $\boldsymbol{x}$, setze $J_a := J(\boldsymbol{x})$;

`REPEAT`

`IF` $\Delta\boldsymbol{x} = \mathbf{0}$ ist Lösung von (10.28) `THEN`
  berechne λ_i, $i \in J_a \cup E$, aus (10.14);
  bestimme Index $q \in J_a$ aus (10.23);
  `IF` $\lambda_q \geq 0$ `THEN` STOP `ELSE`
    $J_a := J_a \setminus \{q\}$;
bestimme Lösung $\Delta\boldsymbol{x}$ von (10.28), setze $\mathbf{s} := \Delta\boldsymbol{x}$;
bestimme $\alpha := \min(1, \bar{\alpha})$ ($\bar{\alpha}$ aus (10.24);
`IF` $\alpha = \bar{\alpha}$ `THEN`

bestimme Index $p \in I \setminus J_a$ aus (10.25);
$J_a := J_a \cup \{p\}$
$\boldsymbol{x} := \boldsymbol{x} + \alpha \mathbf{s}$;
`UNTIL` Abbruch.

Man kann (mit einem ähnlichen Argument wie beim Simplexverfahren, vgl. letzten Abschnitt) zeigen: Ist $\boldsymbol{C}$ positiv definit, und gilt in jedem Schritt $\alpha \neq 0$, so liefert der Algorithmus *in endlich vielen Schritten* die Lösung von (10.27). Hierzu und zu einer Diskussion des indefiniten Falls vgl. Fletcher [1987], p. 242, 245 f.. Es sei darauf hingewiesen, daß ein effizienter Algorithmus für das quadratische Problem (10.27) das entscheidende Hilfsmittel für die empfehlenswerte SQP-Methode (vgl. das folgende Kapitel) ist.