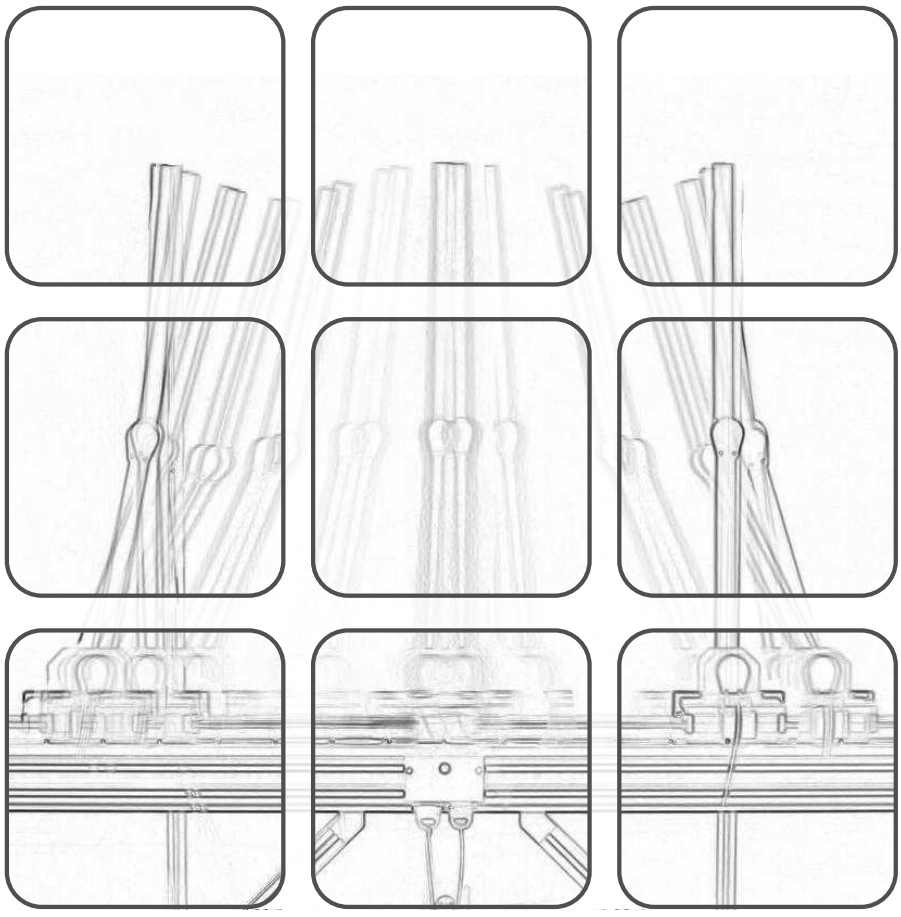
TECHNISCHE UNIVERSITÄT WIEN

AUTOMATION & CONTROL INSTITUTE
INSTITUT FÜR AUTOMATISIERUNGS- & REGELUNGSTECHNIK

Vorlesung und Übung
WS 2018/2019

Andreas STEINBÖCK

OPTIMIERUNG



Optimierung

Vorlesung und Übung
WS 2018/2019

Andreas STEINBÖCK

TU Wien
Institut für Automatisierungs- und Regelungstechnik
Gruppe für komplexe dynamische Systeme

Gußhausstraße 27–29
1040 Wien
Telefon: +43 1 58801 – 37615
Internet: https://www.acin.tuwien.ac.at

Inhaltsverzeichnis

Vorwort

Wesentliche Teile dieses Skriptums wurden von Prof. Dr.-Ing. Knut GRAICHEN und Univ.-Prof. Dr. techn. Andreas KUGI verfasst. Ihnen gebührt aufrichtiger Dank dafür. Fragen sowie Korrektur- und Verbesserungsvorschläge zu diesem Skriptum können Sie jederzeit an Andreas STEINBÖCK richten.

1 Einleitung

Unter *Optimierung* versteht man gemeinhin die Suche nach einem im Sinne einer bestimmten Zielsetzung bestmöglichen Punkt (optimale Lösung) in einem Entscheidungsraum, wobei bei dieser Suche meist Nebenbedingungen zu berücksichtigen sind. Zur Systematisierung solcher Entscheidungsfindungsprozesse können mathematische Formulierungen und Lösungen von Optimierungsaufgaben (Optimierungsproblemen) verwendet werden. Das vorliegende Skriptum gibt einen Überblick über die mathematische Formulierung und Lösung von Optimierungsaufgaben.

Es wird grundsätzlich zwischen *statischen* und *dynamischen* Optimierungsproblemen unterschieden:

- *Statisches Optimierungsproblem*: Minimierung einer Funktion mit Optimierungsvariablen, die Elemente eines finit-dimensionalen Raumes (z. B. dem Euklidischen Raum) sind
- *Dynamisches Optimierungsproblem*: Minimierung eines Funktionals mit Optimierungsvariablen, die Elemente eines unendlich-dimensionalen Raumes sind (z. B. Zeitfunktionen)

In diesem Abschnitt soll anhand von Beispielen der prinzipielle Unterschied zwischen statischen und dynamischen Optimierungsaufgaben verdeutlicht werden.

1.1 Statische Optimierungsprobleme

Unter einem *statischen Optimierungsproblem* wird das Minimieren einer Funktion $f(\mathbf{x})$ unter Berücksichtigung gewisser Nebenbedingungen verstanden, wobei die Optimierungsvariablen $\mathbf{x}$ Elemente des Euklidischen Raumes $\mathbb{R}^n$ sind.

1.1.1 Mathematische Formulierung

Die Standardformulierung eines statischen Optimierungsproblems lautet

$$\begin{aligned}
&\min_{\mathbf{x}\in\mathbb{R}^n} && f(\mathbf{x}) && && \text{Kostenfunktion} && (1.1a)\\
&\text{u.B.v.} && g_i(\mathbf{x}) = 0, && i = 1,\dots,p && \text{Gleichungsbeschränkungen} && (1.1b)\\
&&& h_i(\mathbf{x}) \le 0, && i = 1,\dots,q && \text{Ungleichungsbeschränkungen.} && (1.1c)
\end{aligned}$$

Ist ein Optimierungsproblem ohne die Gleichungs- und Ungleichungsbeschränkungen (1.1b) und (1.1c) gegeben, spricht man von einem *unbeschränkten Optimierungsproblem*. Im allgemeinen Fall, d. h. unter Berücksichtigung der Nebenbedingungen (1.1b) und (1.1c), handelt es sich um ein *beschränktes Optimierungsproblem*.

Die Menge $\mathcal{X} \subset \mathbb{R}^n$, die die Gleichungs- und Ungleichungsbeschränkungen (1.1b) und (1.1c) erfüllt,

$$\mathcal{X} = \{\, \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid g_i(\mathbf{x}) = 0,\ i = 1, \dots, p, \quad h_i(\mathbf{x}) \leq 0,\ i = 1, \dots, q \,\} \tag{1.2}$$

wird als *zulässiges Gebiet* oder *zulässige Menge* (englisch: *admissible region* oder *feasible region*) und jedes $\mathbf{x} \in \mathcal{X}$ als *zulässiger Punkt* bezeichnet. Damit lässt sich das statische Optimierungsproblem (1.1) auch in der äquivalenten Form

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathcal{X}} \ f(\mathbf{x}) \tag{1.3}$$

angeben. Im Falle von unbeschränkten Problemen gilt $\mathcal{X} = \mathbb{R}^n$.

$\mathcal{X}$ darf nicht die leere Menge sein, da sonst das Optimierungsproblem (1.3) keine Lösung besitzt. Eine weitere notwendige Bedingung für $\mathcal{X}$ kann aus den Gleichungsbeschränkungen (1.1b) abgeleitet werden, da sich durch die p algebraischen Restriktionen $g_i(\mathbf{x}) = 0$ die Anzahl der freien Optimierungsvariablen $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ auf $n - p$ reduziert. Somit darf die Anzahl p der Gleichungsbeschränkungen (1.1b) nicht größer als die Anzahl der Optimierungsvariablen $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ sein, da die zulässige Menge $\mathcal{X}$ ansonsten leer wäre.

In der Literatur hat sich weitgehend die Formulierung als Minimierungsproblem (1.1) oder (1.3) durchgesetzt. Analog dazu kann ein Maximierungsproblem ebenfalls als Minimierungsproblem gemäß (1.3) geschrieben werden:

$$\max_{\mathbf{x} \in \mathcal{X}} \ f(\mathbf{x}) = \min_{\mathbf{x} \in \mathcal{X}} \ -f(\mathbf{x})\,.$$

Neben der Bezeichnung statische Optimierung werden häufig auch die Begriffe *mathematische Programmierung* oder *endlich-dimensionale Optimierung* verwendet. Der Begriff *Programmierung* ist eher im Sinne von *Planung* zu verstehen als im Sinne der Erstellung eines Computerprogramms.

Bei statischen Optimierungsproblemen werden häufig folgende Klassen unterschieden:

- *Lineare Programmierung*: Die Kostenfunktion und die Beschränkungen sind linear (genauer affin).
- *Quadratische Programmierung*: Die Kostenfunktion ist quadratisch, während die Beschränkungen linear (genauer affin) sind.
- *Nichtlineare Programmierung*: Die Kostenfunktion oder mindestens eine Beschränkung ist nichtlinear.
- *Konvexe Programmierung*: Konvexität ist ein mathematischer Begriff, der im Hinblick auf die Optimierung eine besondere Bedeutung spielt. Er erlaubt es, eine Klasse von Optimierungsproblemen zu formulieren, für die die notwendigen Optimalitätsbedingungen erster Ordnung gleichzeitig hinreichende Bedingungen für ein globales Optimum sind.
- *Integer-Programmierung*: Alle Optimierungsvariablen sind diskret.
- *Mixed-Integer-Programmierung*: Es treten kontinuierliche und diskrete Optimierungsvariablen auf.

1.1.2 Beispiele

Insbesondere die *lineare Programmierung* wird häufig bei ökonomischen Fragestellungen, wie Produktions-, Planungs- oder Investitionsproblemen, eingesetzt. Das folgende Beispiel zeigt eine einfache Portfolio-Optimierung.

Beispiel 1.1 (Portfolio-Optimierung). Ein Anleger möchte 10.000 Euro gewinnbringend investieren und hat die Auswahl zwischen drei Aktienfonds mit unterschiedlicher Gewinnerwartung und Risikoeinstufung:

Fonds	Erwarteter Gewinn/Jahr	Risikoeinstufung
A	10 %	4
B	7 %	2
C	4 %	1

Der Anleger möchte nach einem Jahr mindestens 600 Euro Gewinn erzielen. Andererseits möchte er sein Geld eher konservativ anlegen, d. h. er möchte mindestens 4.000 Euro in Fonds C investieren und das Risiko gemäß der oben gegebenen Risikoeinstufung minimieren. Wie muss der Anleger die 10.000 Euro verteilen, damit diese Kriterien erfüllt werden?

Zunächst werden die Optimierungsvariablen x_1, x_2, x_3 eingeführt, die den prozentualen Anteil der investierten 10.000 Euro an den jeweiligen Fonds A, B, C kennzeichnen. Dabei kann x_3 durch die Beziehung

$$x_3 = 1 - x_1 - x_2$$

ersetzt werden. Der geforderte Mindestgewinn von 600 Euro lässt sich als die Beschränkung

$$10.000\big(0.1x_1 + 0.07x_2 + 0.04(1 - x_1 - x_2)\big) \geq 600 \quad \Rightarrow \quad 6x_1 + 3x_2 \geq 2 \tag{1.4}$$

ausdrücken. Die Mindestanlage von 4.000 Euro in Fonds C führt zu

$$10.000(1 - x_1 - x_2) \geq 4.000 \quad \Rightarrow \quad x_1 + x_2 \leq 0.6. \tag{1.5}$$

Des Weiteren müssen $x_1 \geq 0$, $x_2 \geq 0$ und $x_3 \geq 0$ erfüllt sein. Das Ziel ist die Minimierung des Anlagerisikos, was sich durch die Funktion

$$f(\mathbf{x}) = 4x_1 + 2x_2 + (1 - x_1 - x_2) = 1 + 3x_1 + x_2 \tag{1.6}$$

ausdrücken lässt.

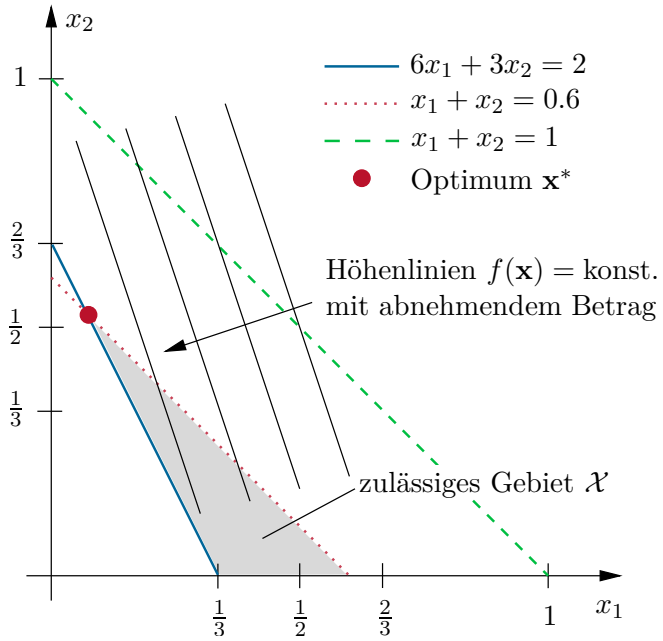


Abbildung 1.1: Veranschaulichung der Portfolio-Optimierung in Beispiel 1.1.

Somit kann das statische Optimierungsproblem in der Form

$$\begin{aligned} \min_{\mathbf{x}\in\mathbb{R}^2} \quad & f(\mathbf{x}) = 1 + 3x_1 + x_2 && \text{(1.7a)} \\ \text{u.B.v.} \quad & 6x_1 + 3x_2 \geq 2 && \text{(1.7b)} \\ & x_1 + x_2 \leq 0.6 && \text{(1.7c)} \\ & x_1 + x_2 \leq 1 && \text{(1.7d)} \\ & x_1, x_2 \geq 0 && \text{(1.7e)} \end{aligned}$$

geschrieben werden. Abbildung 1.1 stellt die einzelnen Beschränkungen sowie das zulässige Gebiet grafisch dar. Aus dem Verlauf der Höhenlinien $f(\mathbf{x}) =$ konst. der Kostenfunktion (1.7a) ist direkt ersichtlich, dass der Punkt $\mathbf{x}^*$ jene Ecke des zulässigen Gebiets $\mathcal{X}$ mit dem niedrigsten Wert von $f(\mathbf{x})$ ist. Somit ergibt sich für die optimale Verteilung der 10.000 Euro auf die einzelnen Fonds

$$x_1^* = \frac{1}{15}, \quad x_2^* = \frac{8}{15}, \quad x_3^* = \frac{6}{15}. \tag{1.8}$$

Das folgende Beispiel der quadratischen Programmierung soll den Einfluss von Beschränkungen auf eine optimale Lösung verdeutlichen.

Beispiel 1.2. Betrachtet wird das (zunächst) unbeschränkte Problem

$$\min_{\mathbf{x}\in\mathbb{R}^2} \; f(\mathbf{x}) = (x_1 - 2)^2 + (x_2 - 1)^2. \tag{1.9}$$

Die Höhenlinien $f(\mathbf{x}) = \text{konst.}$ der Funktion $f(\mathbf{x})$ sind in Abbildung 1.2 in Abhängigkeit der beiden Optimierungsvariablen $\mathbf{x} = [x_1 \quad x_2]^{\mathrm{T}}$ dargestellt. Es ist direkt ersichtlich, dass das Minimum $f(\mathbf{x}^*) = 0$ an der Stelle $\mathbf{x}^* = [2 \quad 1]^{\mathrm{T}}$ auftritt.

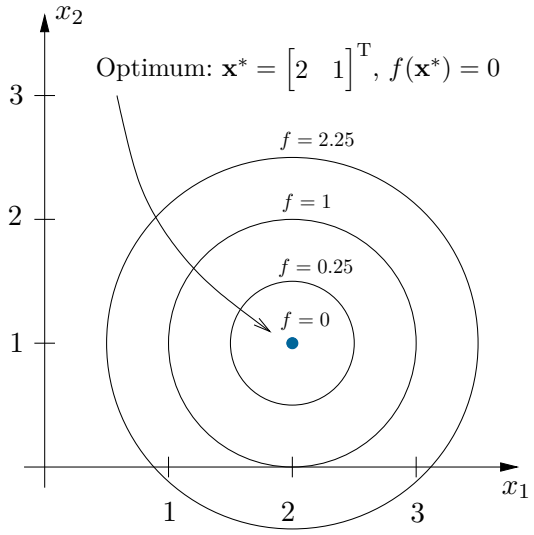


Abb. 1.2: Geometrische Darstellung des unbeschränkten Optimierungsproblems (1.9).

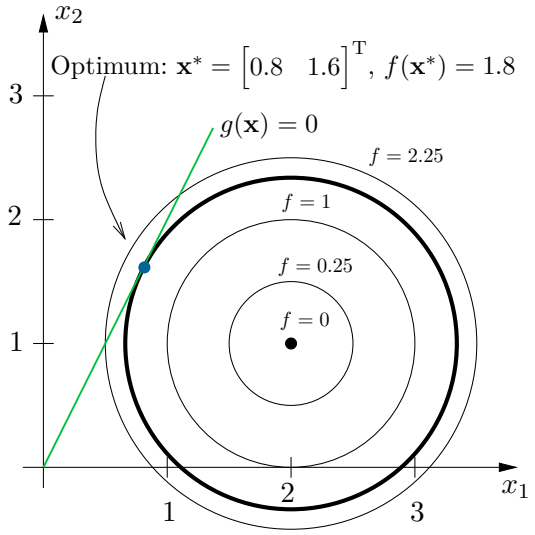


Abb. 1.3: Geometrische Darstellung des beschränkten Optimierungsproblems (1.9), (1.10).

Um den Einfluss verschiedener Beschränkungen zu untersuchen, wird zunächst eine zusätzliche Gleichungsbeschränkung der Form (1.1b) betrachtet

$$g(\mathbf{x}) = x_2 - 2x_1 = 0\,. \tag{1.10}$$

Die Gleichungsbeschränkung entspricht einer algebraischen Zwangsbedingung, wodurch lediglich noch eine Optimierungsvariable frei wählbar ist. Geometrisch interpretiert bedeutet dies, dass eine mögliche Lösung auf der Gerade liegen muss, die durch (1.10) definiert wird (siehe Abbildung 1.3). Die optimale Lösung liegt dabei auf dem tangentialen Berührpunkt der Geraden $g(\mathbf{x}) = 0$ mit der Höhenlinie $f(\mathbf{x}) = 1.8$.

Anstelle der Gleichungsbeschränkung (1.10) wird nun die Ungleichungsbeschränkung

$$h_1(\mathbf{x}) = x_1 + x_2 - 2 \leq 0 \tag{1.11}$$

betrachtet, wodurch sich die Menge der zulässigen Punkte $\mathbf{x} = [x_1 \quad x_2]^{\mathrm{T}}$ auf das Gebiet links unterhalb der Geraden $h_1(\mathbf{x}) = 0$ beschränkt (siehe Abbildung 1.2). Das Optimum $f(\mathbf{x}^*) = 0.5$ an der Stelle $\mathbf{x}^* = [1.5 \quad 0.5]^{\mathrm{T}}$ befindet sich an der Grenze des zulässigen Gebiets und liegt, wie im vorherigen Szenario, auf einer Höhenlinie, die die Gerade $h_1(\mathbf{x}) = 0$ tangential berührt.

Zusätzlich zur ersten Ungleichungsbeschränkung (1.11) soll eine weitere Ungleichung der Form

$$h_2(\mathbf{x}) = x_1^2 - x_2 \leq 0 \tag{1.12}$$

betrachtet werden, durch die sich die Menge der zulässigen Punkte weiter verkleinert (siehe Abbildung 1.2). Der optimale Punkt $\mathbf{x}^* = [1 \quad 1]^{\mathrm{T}}$ mit dem Minimum $f(\mathbf{x}^*) = 1$ liegt nun im Schnittpunkt der Kurven $h_1(\mathbf{x}) = 0$ und $h_2(\mathbf{x}) = 0$, d. h. beide Beschränkungen (1.11) und (1.12) sind aktiv.

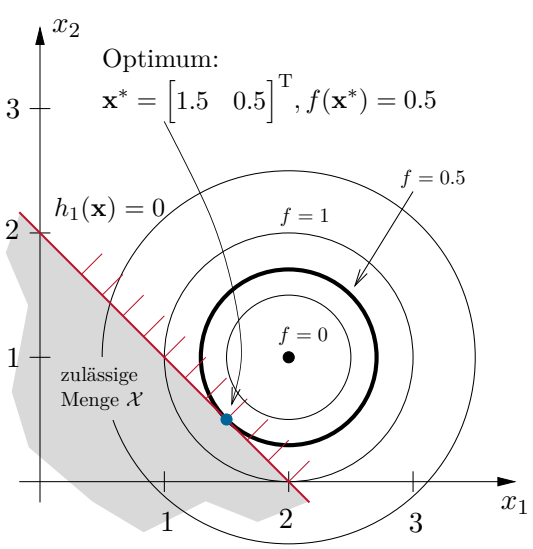


Abb. 1.4: Geometrische Darstellung des beschränkten Optimierungsproblems (1.9), (1.11).

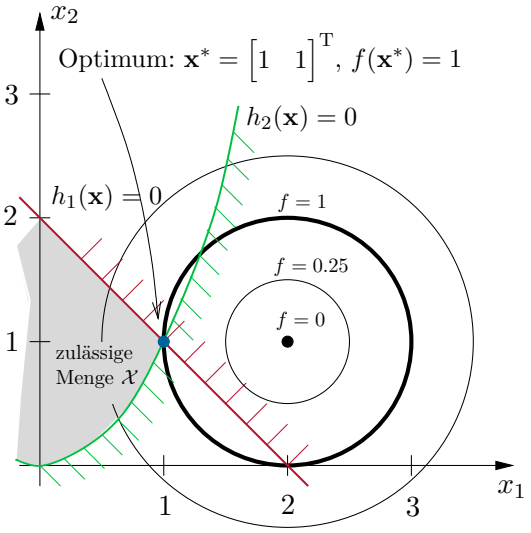


Abb. 1.5: Geometrische Darstellung des beschränkten Optimierungsproblems (1.9), (1.11), (1.12)

Das obige Beispiel 1.2 verdeutlicht den Einfluss von Gleichungs- und Ungleichungsbeschränkungen auf die Lösung (und Lösbarkeit) eines statischen Optimierungsproblems. Die systematische Untersuchung von statischen Optimierungsproblemen sowie die zugehörigen Verfahren zur numerischen Lösung werden in späteren Abschnitten behandelt.

1.2 Dynamische Optimierungsprobleme

Bei den Problemstellungen der statischen Optimierung im vorangegangenen Abschnitt stellen die Optimierungsvariablen $\mathbf{x}$ Elemente aus einem finit-dimensionalen Raum, meist dem Euklidischen Raum $\mathbb{R}^n$, dar. Bei der dynamischen Optimierung hingegen wird in einem Raum von Funktionen einer unabhängigen Variablen nach einem Optimum gesucht. Da es sich bei der unabhängigen Variablen meistens um die Zeit t handelt, wird in diesem Zusammenhang von *dynamischer Optimierung* gesprochen.

1.2.1 Mathematische Formulierung

Die generelle Struktur eines dynamischen Optimierungsproblems lautet

$$\min_{\mathbf{u}(\cdot)} \quad J(\mathbf{u}) = \varphi(t_1, \mathbf{x}(t_1)) + \int_{t_0}^{t_1} l(t, \mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t))\, \mathrm{d}t \qquad \text{Kostenfunktional} \qquad (1.13a)$$

$$\text{u.B.v.} \quad \dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(t, \mathbf{x}, \mathbf{u}) \qquad \text{Systemdynamik} \qquad (1.13b)$$

$$\mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}_0 \qquad \text{Anfangsbedingungen} \qquad (1.13c)$$

$$\boldsymbol{\psi}(t_1, \mathbf{x}(t_1)) = \mathbf{0} \qquad \text{Endbedingungen} \qquad (1.13d)$$

$$h_i(\mathbf{x}, \mathbf{u}) \leq 0, \quad i = 1, \ldots, q \qquad \text{Ungleichungsbeschr.} \qquad (1.13e)$$

Dabei stellt $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^m$ die Eingangsgröße des nichtlinearen Systems (1.13b) mit dem Zustand $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ dar. Zusätzlich zu den Anfangsbedingungen (1.13c) sind häufig Endbedingungen der Form (1.13d) gegeben, um z. B. einen gewünschten Zustand $\mathbf{x}_\mathrm{f}$ zur Endzeit t_1 zu erreichen (also $\boldsymbol{\psi}(t_1, \mathbf{x}(t_1)) = \mathbf{x}(t_1) - \mathbf{x}_\mathrm{f}$). In der Praxis treten häufig Ungleichungsbeschränkungen (1.13e) auf, die z. B. die Begrenzung einer Stellgröße oder Sicherheitsschranken eines Zustandes darstellen können.

Die Aufgabe der dynamischen Optimierung besteht nun darin, eine Eingangstrajektorie $\mathbf{u}(t)$, $t \in [t_0, t_1]$ derart zu finden, dass die Zustandstrajektorie $\mathbf{x}(t)$, $t \in [t_0, t_1]$ des dynamischen Systems (1.13b) mit den Anfangsbedingungen (1.13c) die Endbedingungen (1.13d) erfüllt, die Beschränkungen (1.13e) erfüllt werden und gleichzeitig das Kostenfunktional (1.13a) minimiert wird. Abhängig davon, ob t_1 vorgegeben oder unbekannt ist, spricht man von einer *festen* oder *freien Endzeit* t_1.

Neben der Bezeichnung dynamische Optimierung werden häufig auch die Begriffe *unendlich-dimensionale Optimierung*, *Optimalsteuerungsproblem* oder *dynamische Programmierung* verwendet. Die folgenden Beispiele erläutern die Problem- und Aufgabenstellung der dynamischen Optimierung.

1.2.2 Beispiele

Beispiel 1.3 (Inverses Pendel). Ein klassisches Problem in der Regelungstechnik ist das inverse Pendel, das an einem Wagen drehbar befestigt ist. Als Beispielproblem soll das seitliche Versetzen des Pendels betrachtet werden

$$\min_{u(\cdot), t_1} \quad J(u) = \int_0^{t_1} 1 + c\,u^2 \;\mathrm{d}t\,, \qquad (1.14a)$$

$$\text{u.B.v.} \quad \begin{bmatrix} 1 & \varepsilon\cos\theta \\ \cos\theta & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \ddot{x} \\ \ddot{\theta} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \varepsilon\dot{\theta}^2 \sin\theta + u \\ -\sin\theta \end{bmatrix}, \quad \varepsilon = m/(M+m) \qquad (1.14b)$$

$$\mathbf{x}(0) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \pi & 0 \end{bmatrix}^\mathrm{T}, \quad \mathbf{x}(t_1) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \pi & 0 \end{bmatrix}^\mathrm{T}, \qquad (1.14c)$$

$$-1 \leq u \leq 1\,. \qquad (1.14d)$$

Die vereinfachten Bewegungsgleichungen (1.14b) für die Zustände $\mathbf{x} = [x \quad \dot{x} \quad \theta \quad \dot{\theta}]^\mathrm{T}$ sind normiert. Der Eingang u stellt die am Wagen angreifende Kraft dar und ist durch (1.14d) beschränkt. Die Masse des Pendels wird mit m, diejenige des Wagens mit M bezeichnet. Abbildung 1.6 zeigt exemplarisch das seitliche Versetzen des Pendels, um die Bewegung zu verdeutlichen.

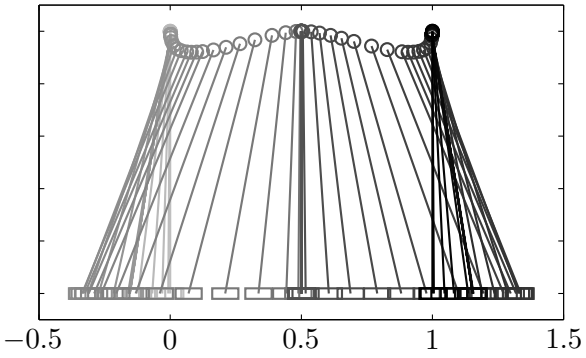


Abbildung 1.6: Momentaufnahmen beim Versetzens des inversen Pendels.

Das Kostenfunktional (1.14a) und somit der Charakter des Optimierungsproblems hängt von dem Parameter c ab. Für $c = 0$ ergibt sich die Aufgabe, die Endzeit t_1 zu minimieren

$$J(u) = \int_0^{t_1} 1 \ \mathrm{d}t = t_1 \,. \tag{1.15}$$

Für $c > 0$ wird der Eingang u im Kostenfunktional und somit der Aspekt der Energieoptimalität mitberücksichtigt.

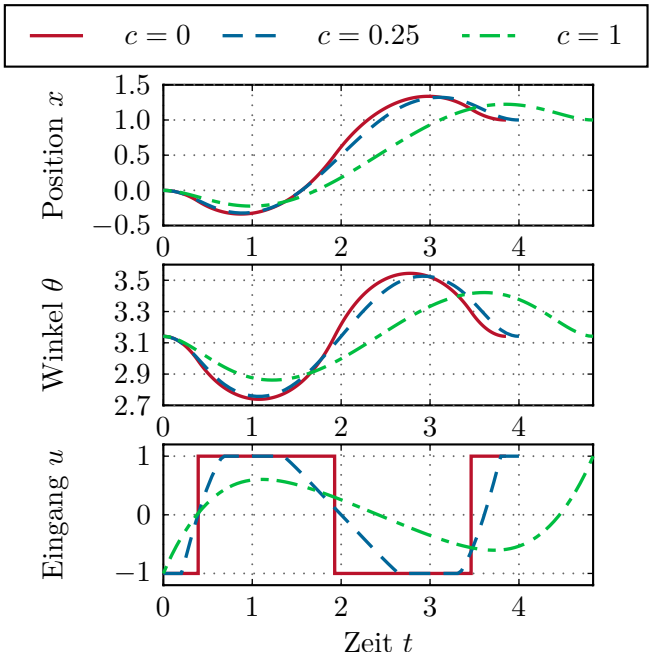


Abbildung 1.7: Optimale Trajektorien beim Versetzen des inversen Pendels.

Abbildung 1.7 zeigt die optimalen Trajektorien für den Parameterwert $\varepsilon = 0.5$

sowie für die Werte $c = 0$, $c = 0.25$ und $c = 1$. Für $c = 0$ weist der Eingang u ein Bang-bang-Verhalten auf, während für $c > 0$ die Steueramplituden kleiner werden und die benötigte Zeit t_1 zunimmt.

Dieses Beispiel verdeutlicht, dass nicht zu jedem Optimierungsproblem eine Lösung existiert, insbesondere wenn die Endzeit t_1 nicht festgelegt ist. Wie aus Abbildung 1.7 ersichtlich, vergrößert sich die Endzeit t_1 bei zunehmender Gewichtung von u^2 im Vergleich zum zeitoptimalen Anteil in dem Kostenfunktional (1.14a). Wenn reine Energieoptimalität gefordert würde, d. h.

$$J(u) = \int_0^{t_1} u^2 \ \mathrm{d}t\,, \tag{1.16}$$

hätte das Optimierungsproblem keine Lösung, da das Versetzen des Pendels dann unendlich langsam, d. h. mit mit $t_1 \to \infty$, ablaufen würde.

Beispiel 1.4 (Goddard-Rakete [1.1, 1.2]). Ein klassisches Optimierungsproblem aus der Raumfahrt ist die Maximierung der Flughöhe einer Rakete unter dem Einfluss von Luftreibung und Erdbeschleunigung. Dieses Problem wurde von Robert H. Goddard im Jahr 1919 aufgestellt und kann in der normierten Form

$$\min_{u(\cdot)} \quad -h(t_1) \tag{1.17a}$$

$$\text{u.B.v.} \quad \dot{h} = v, \quad \dot{v} = \frac{u - D(h,v)}{m} - \frac{1}{h^2}\,, \quad \dot{m} = -\frac{u}{c}\,, \tag{1.17b}$$

$$h(0) = 1, \quad v(0) = 0, \quad m(0) = 1, \quad m(t_1) = 0.6\,, \tag{1.17c}$$

$$0 \le u \le 3.5 \tag{1.17d}$$

geschrieben werden.

Die Zustandsgrößen sind die Flughöhe h, die Geschwindigkeit v und die Masse m der Rakete. Die Luftreibung $D(h, v)$ hängt über die Funktion

$$D(h,v) = D_0\, v^2 \mathrm{e}^{[\beta(1-h)]} \tag{1.18}$$

von den Zuständen h und v ab. Die Randbedingungen in (1.17c) umfassen die normierten Anfangsbedingungen sowie die Endbedingung für $m(t_1)$, die dem Leergewicht der Rakete ohne Treibstoff entspricht. Der Eingang des Systems ist der Schub u, der innerhalb der Beschränkungen (1.17d) liegen muss.

In Abbildung 1.8 sind die optimalen Trajektorien für die Goddard-Rakete dargestellt. Die verwendeten Parameterwerte lauten $c = 0.5$, $D_0 = 310$ und $\beta = 500$. Der Schub $u(t)$ ist am Anfang maximal und weist dann einen parabelförmigen Verlauf auf, bevor der Treibstoff verbraucht ist. Dieses Verhalten wird durch den Luftwiderstand $D(h, v)$ hervorgerufen, der mit zunehmender Höhe abnimmt. Es ist somit im Falle eines hohen Luftwiderstandes *optimaler* nicht permanent mit vollem Schub zu fliegen.

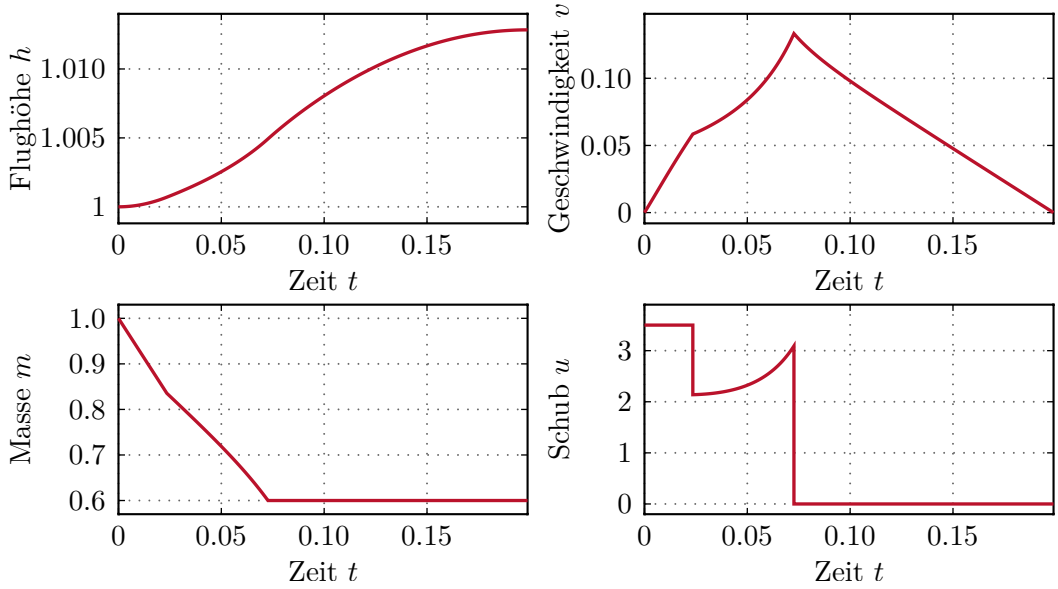


Abbildung 1.8: Trajektorien für die Goddard-Rakete in Beispiel 1.4.

Beispiel 1.5 (Ökonomisches Modell [1.3, 1.4]). Ein weiterer Anwendungszweig der dynamischen Optimierung sind wirtschaftliche Prozesse. Das folgende Beispiel beschreibt das Verhalten eines typischen Konsumenten, der Konsum, Freizeit und Bildung über die Lebensdauer optimieren will. Der Bildungsgrad B und das Kapital K eines durchschnittlichen Konsumenten lassen sich durch folgendes Modell beschreiben

$$\dot{B} = \overbrace{B^{\varepsilon} u_2 u_3}^{\text{Weiterbildung}} - \overbrace{\delta B}^{\text{Vergessen}}, \qquad B(0) = B_0 \tag{1.19a}$$

$$\dot{K} = \underbrace{iK}_{\text{Verzinsung}} + \underbrace{B u_2 g(u_3)}_{\text{Einkommen}} - \underbrace{u_1}_{\text{Konsum}}, \qquad K(0) = K_0. \tag{1.19b}$$

Die Eingangsgrößen sind der Konsum u_1, der Anteil der Arbeitszeit an der Gesamtzeit u_2 sowie der Anteil der Fortbildungszeit an der Arbeitszeit u_3. Die Eingänge unterliegen den Beschränkungen

$$u_1 > 0, \quad 0 \le u_2 \le 1, \quad 0 \le u_3 < 1. \tag{1.20}$$

Das Optimierungsziel des Konsumenten ist die Maximierung von Konsum, Freizeit und Bildung über die Lebensdauer von $t_1 = 75$ Jahren, was in dem (zu minimierenden) Kostenfunktional

$$J(\mathbf{u}) = -K^{\kappa}(t_1) - \int_{t_0}^{t_1} U(t, u_1, u_2, B) \mathrm{e}^{-\rho t} \, \mathrm{d}t \,. \tag{1.21}$$

ausgedrückt ist. Die Nutzenfunktion

$$U(t, u_1, u_2, B) = \alpha_0 u_1^{\alpha} + \beta_0 (1 - u_2)^{\beta} + \gamma_0 t B^{\gamma} \tag{1.22}$$

gewichtet dabei den Konsum u_1, die Freizeit $1 - u_2$ und den Bildungsgrad B, während der Endwert $-K^{\kappa}(t_1)$ in (1.21) zusätzlich das Vererbungskapital berücksichtigt.

Die optimalen Zeitverläufe des Bildungsgrades $B(t)$ und des Kapitals $K(t)$ sind in Abbildung 1.9 dargestellt. Die Funktion $g(u_3)$ in (1.19b) ist durch die Parabel $g(u_3) = 1 - (1 - a)u_3 - au_3^2$ gegeben. Die verwendeten Parameterwerte lauten $a = 0.3$, $\alpha = -1$, $\alpha_0 = -1$, $\beta = -0.5$, $\beta_0 = -1$, $\gamma = 0.2$, $\gamma_0 = 5$, $\kappa = 0.2$, $\rho = 0.01$, $\varepsilon = 0.35$, $\delta = 0.01$, $i = 0.04$, $B_0 = 1$ und $K_0 = 30$.

Die ersten 17 Jahre stellen die Lernphase dar (d. h. $u_3 = 1$). Daraufhin folgt eine lange Arbeitsphase von 34 Jahren mit einem hohen Maß an Weiterbildung, bevor in den nächsten 10 Jahren (52.–61. Lebensjahr) eine reine Arbeitsphase mit zusätzlich reduzierter Arbeitszeit u_2 stattfindet. Ab dem 62. Lebensjahr setzt der Ruhestand ein. Der Bildungsgrad B ist besonders hoch im Alter von 30–60 Jahren. Das Kapital K ist negativ während der ersten Lebenshälfte, was der Aufnahme eines Kredites entspricht. Im Laufe des Lebens wird dies aber durch das steigende Einkommen kompensiert.

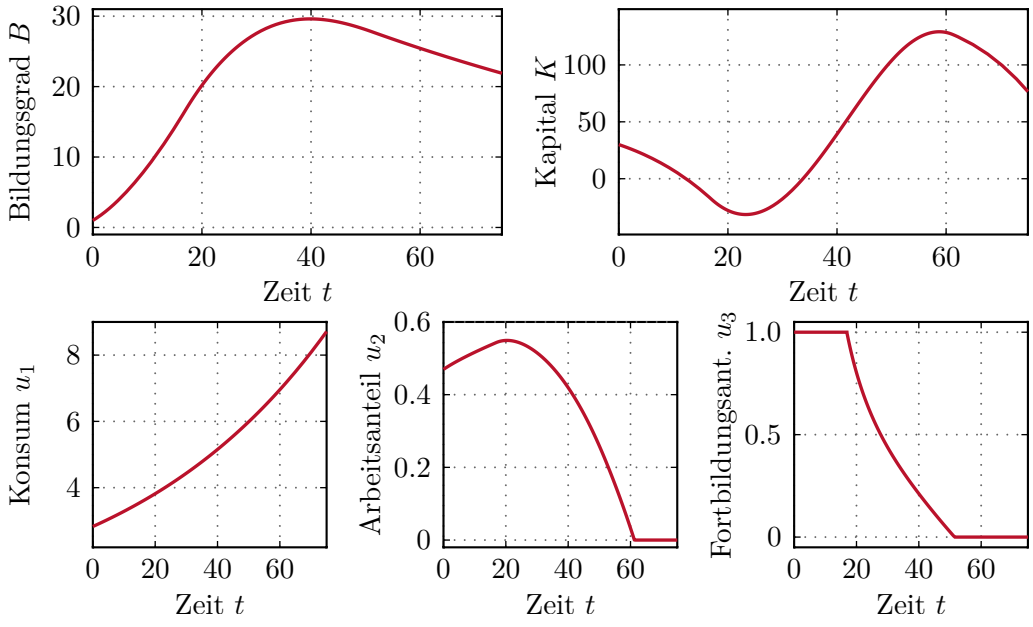


Abbildung 1.9: Optimale Trajektorien für das Konsumentenverhalten in Beispiel 1.5.

1.3 Mathematische Grundlagen

In diesem Abschnitt werden kurz einige mathematische Begriffe und Grundkonzepte erläutert, die das Verständnis der weiteren Kapitel erleichtern.

1.3.1 Infimum, Supremum, Minimum und Maximum

Definition 1.1 (Infimum und Supremum)**.** Es sei $\mathcal{Y} \subset \mathbb{R}$ eine nichtleere Menge. Das Infimum von $\mathcal{Y}$, kurz $\inf \mathcal{Y}$ geschrieben, bezeichnet die größte untere Schranke von $\mathcal{Y}$, d. h. es existiert eine Zahl $\alpha = \inf \mathcal{Y}$ so, dass gilt

(a) $x \geq \alpha$ für alle $x \in \mathcal{Y}$

(b) für alle $\bar{\alpha} > \alpha$ existiert ein $x \in \mathcal{Y}$ so, dass $x < \bar{\alpha}$.

Das Supremum von $\mathcal{Y}$, kurz $\sup \mathcal{Y}$ geschrieben, bezeichnet die kleinste obere Schranke von $\mathcal{Y}$, d. h. es existiert eine Zahl $\alpha = \sup \mathcal{Y}$ so, dass gilt

(a) $x \leq \alpha$ für alle $x \in \mathcal{Y}$

(b) für alle $\bar{\alpha} < \alpha$ existiert ein $x \in \mathcal{Y}$ so, dass $x > \bar{\alpha}$.

Existiert für eine nichtleere Menge $\mathcal{Y}$ ein Infimum oder ein Supremum, so muss dieses nicht automatisch in $\mathcal{Y}$ enthalten sein. Als Beispiel dazu betrachte man die Menge $\mathcal{Y} = (0, +\infty)$. In diesem Fall gilt offensichtlich $\inf \mathcal{Y} = 0 \notin \mathcal{Y}$.

Für die folgende Definition wird angenommen, dass $\mathcal{X} \subset \mathbb{R}^n$ die zulässige Menge des betrachteten Optimierungsproblems gemäß (1.2) bezeichnet.

Definition 1.2 (Globale und lokale Minima)**.** Die Funktion $f(\mathbf{x})$ besitzt in $\mathcal{X}$ an der Stelle $\mathbf{x}^*$

(a) ein *lokales Minimum*, falls für eine Norm $||\cdot||$ ein $\varepsilon > 0$ so existiert, dass gilt $f(\mathbf{x}^*) \leq f(\mathbf{x})$ für alle $\mathbf{x} \in \{\mathbf{x} \in \mathcal{X} \,|\, ||\mathbf{x} - \mathbf{x}^*|| < \varepsilon\}$,

(b) ein *striktes lokales Minimum*, falls für eine Norm $||\cdot||$ ein $\varepsilon > 0$ so existiert, dass gilt $f(\mathbf{x}^*) < f(\mathbf{x})$ für alle $\mathbf{x} \in \{\mathbf{x} \in \mathcal{X} \,|\, ||\mathbf{x} - \mathbf{x}^*|| < \varepsilon,\ \mathbf{x} \neq \mathbf{x}^*\}$,

(c) ein *globales (absolutes) Minimum*, falls $f(\mathbf{x}^*) \leq f(\mathbf{x})$ für alle $\mathbf{x} \in \mathcal{X}$, und

(d) ein *striktes (eindeutiges) globales Minimum*, falls $f(\mathbf{x}^*) < f(\mathbf{x})$ für alle $\mathbf{x} \in \mathcal{X} \backslash \{\mathbf{x}^*\}$.

Abbildung 1.10 zeigt unterschiedliche Arten von Minima. Definition 1.2 lässt sich direkt auf lokale und globale Maxima übertragen.

An dieser Stelle sei betont werden, dass ein Punkt $\mathbf{x}^*$, der die Funktion $f(\mathbf{x})$ in der Menge $\mathcal{X}$ minimiert bzw. maximiert, in $\mathcal{X}$ enthalten sein muss. Ein Punkt $\mathbf{x}$, dessen Funktionswert $f(\mathbf{x})$ gerade dem Infimum $\inf\{f(\mathbf{x}) \,|\, \mathbf{x} \in \mathcal{X}\}$ bzw. dem Supremum $\sup\{f(\mathbf{x}) \,|\, \mathbf{x} \in \mathcal{X}\}$ entspricht, muss jedoch nicht existieren, auch nicht außerhalb von $\mathcal{X}$.

Die Menge aller Minima wird oftmals in der Form

$$\mathcal{G} = \arg\min\{f(\mathbf{x}) \,|\, \mathbf{x} \in \mathcal{X}\} \tag{1.23}$$

angeschrieben, wobei $\mathcal{G}$ sowohl leer sein kann als auch aus endlich oder unendlich vielen Punkten bestehen kann. Im Falle eines strikten globalen Minimums in $\mathcal{X}$ versteht man unter dem Ausdruck $\bar{\mathbf{x}} = \arg\min\{f(\mathbf{x}) \,|\, \mathbf{x} \in \mathcal{X}\}$ meist jene Funktion, die gerade den Punkt $\bar{\mathbf{x}} \in \mathcal{X}$ zurückgibt, der die Funktion $f(\mathbf{x})$ global minimiert.

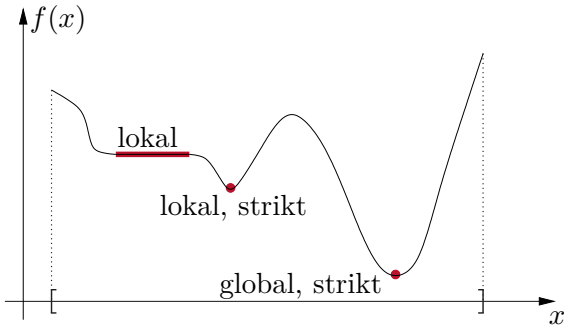


Abbildung 1.10: Verschiedene Minima einer Funktion $f(x)$ mit $x \in \mathbb{R}$.

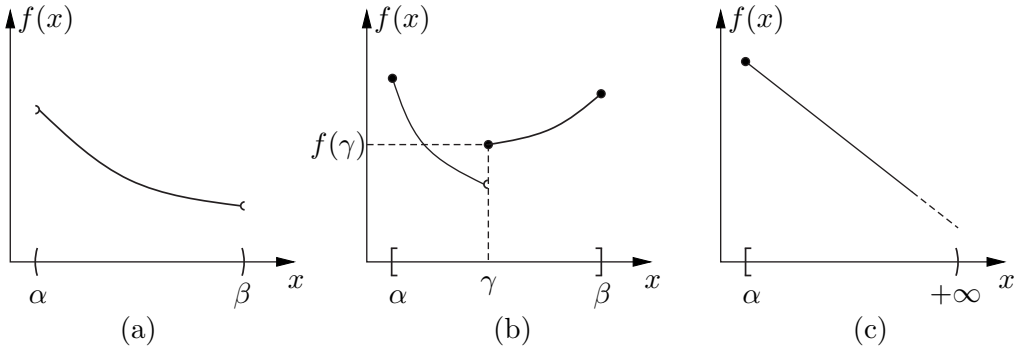


Abbildung 1.11: Nichtexistenz von Minima.

1.3.2 Existenz von Minima und Maxima

Abbildung 1.11 zeigt drei Fälle, bei denen kein Minimum existiert. In Abbildung 1.11(a) ist das Infimum von $f(x)$ in der Menge $\mathcal{X} = (\alpha, \beta)$ durch $f(\beta)$ gegeben. Da aber $\mathcal{X}$ nicht abgeschlossen ist und somit $\beta \notin \mathcal{X}$, existiert in diesem Fall kein Minimum. In Abbildung 1.11(b) ist der linksseitige Grenzwert $\lim_{x \to \gamma^-} f(x)$ das Infimum von $f(x)$ in der Menge $\mathcal{X} = [\alpha, \beta]$. Auch in diesem Fall existiert auf Grund der Unstetigkeit von $f(x)$ das Minimum nicht. Im letzten Fall, Abbildung 1.11(c), existiert das Minimum ebenfalls nicht, da $f(x)$ in der unbeschränkten Menge $\mathcal{X} = \{x \in \mathbb{R} \,|\, x \geq \alpha\}$ nach unten hin nicht beschränkt ist.

Der nachfolgende Satz gibt nun hinreichende Bedingungen für die Existenz einer Lösung von Optimierungsproblemen an.

Satz 1.1 (Satz von Weierstrass)**.** *Es sei $\mathcal{X}$ eine* nichtleere *und* kompakte (abgeschlossene und beschränkte) *Menge und $f : \mathcal{X} \to \mathbb{R}$* stetig *auf $\mathcal{X}$. Dann ist die Menge aller Minima $\mathcal{G} = \arg\min\{f(\mathbf{x}) \mid \mathbf{x} \in \mathcal{X}\}$ nichtleer und kompakt.*

Der Beweis dieses Satzes ist beispielsweise in [1.5, 1.6] zu finden. Es sei an dieser Stelle jedoch betont, dass Satz 1.1 nur eine hinreichende Bedingung für die Existenz einer optimalen Lösung angibt. Als Beispiel dazu betrachte man die Minimierungsaufgabe $\min_{x \in (-1,1)} x^2$, die zeigt, dass mit $x = 0$ ein Minimum gegeben ist, obwohl die Menge

$\mathcal{X} = (-1, 1)$ offen und damit nicht kompakt ist.

1.3.3 Gradient und Hessematrix

Die Berechnung von Ableitungen erster und zweiter Ordnung einer Kostenfunktion $f(\mathbf{x})$ ist von fundamentaler Bedeutung in der Optimierung. Da im Falle von unstetigen Funktionen oder unstetigen Ableitungen Probleme auftreten können (sowohl numerischer als auch theoretischer Natur), wird oft angenommen, dass alle Funktionen eines Optimierungsproblems stetig und hinreichend oft differenzierbar sind. So nicht anders erwähnt, gilt dies auch für diese Vorlesung. Im Rahmen der Optimierungsalgorithmen spielen der Gradient und die Hessematrix eine bedeutende Rolle.

Definition 1.3 (Gradient)**.** Es sei $f : \mathcal{X} \to \mathbb{R}$ eine stetig differenzierbare Funktion, d. h. $f \in C^1$. Dann bezeichnet

$$(\nabla f)(\mathbf{x}) = \left(\frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}}\right)^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial f}{\partial x_n} \end{bmatrix} \tag{1.24}$$

den Gradienten (also die 1. partielle Ableitung) von $f(\mathbf{x})$ an der Stelle $\mathbf{x} = [x_1 \quad \dots \quad x_n]^{\mathrm{T}}$.

Definition 1.4 (Hessematrix)**.** Es sei $f : \mathcal{X} \to \mathbb{R}$ eine zweifach stetig differenzierbare Funktion, d. h. $f \in C^2$. Dann bezeichnet

$$\left(\nabla^2 f\right)(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_1} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n^2} \end{bmatrix} \tag{1.25}$$

die Hessematrix (also die 2. partielle Ableitung) von $f(\mathbf{x})$ an der Stelle $\mathbf{x} = [x_1 \quad \dots \quad x_n]^{\mathrm{T}}$.

Im Falle von Funktionen $f(x)$ mit nur einem skalaren Argument wird die ∇-Notation häufig durch $f'(x)$ und $f''(x)$ ersetzt.

Aus der Stetigkeit der 2. partiellen Ableitungen folgt Kommutativität, d. h.

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} = \frac{\partial^2 f}{\partial x_j \partial x_i}.$$

Daraus ergibt sich $(\nabla^2 f)(\mathbf{x}) = (\nabla^2 f)^{\mathrm{T}}(\mathbf{x})$, d. h. die Hessematrix ist symmetrisch. Folglich hat sie stets rein reelle Eigenwerte. In der Optimierung ist oft von Bedeutung, ob Hessematrizen positiv (semi-)definit sind. Diese Eigenschaft kann wie folgt untersucht werden.

Satz 1.2 (Definitheit von Matrizen). *Die Definitheit einer symmetrischen Matrix* $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ *lässt sich durch folgende Bedingungen charakterisieren:*

Matrix $\mathbf{A}$ *ist*	*(a) für alle* $\mathbf{p} \in \mathbb{R}^n$ *mit* $\mathbf{p} \neq \mathbf{0}$ *gilt*	*(b) alle* n *Eigenwerte* λ_i *sind*	*(c) für alle* n *Hauptminoren* D_i *gilt*
positiv semi-definit:	$\mathbf{p}^{\mathrm{T}}\mathbf{A}\,\mathbf{p} \geq 0$	≥ 0	-
positiv definit:	$\mathbf{p}^{\mathrm{T}}\mathbf{A}\,\mathbf{p} > 0$	> 0	$D_i > 0$
negativ semi-definit:	$\mathbf{p}^{\mathrm{T}}\mathbf{A}\,\mathbf{p} \leq 0$	≤ 0	-
negativ definit:	$\mathbf{p}^{\mathrm{T}}\mathbf{A}\,\mathbf{p} < 0$	< 0	$(-1)^{i+1}D_i < 0$

Die Eigenwerte λ_i, $i = 1, \ldots, n$ der Matrix $\mathbf{A}$ sind die Lösungen der Gleichung

$$\det(\lambda\mathbf{E} - \mathbf{A}) = 0\,,$$

wobei $\mathbf{E}$ die Einheitsmatrix der Dimension n darstellt. Die Hauptminoren D_i sind die Determinanten der linken oberen Untermatrizen von $\mathbf{A}$,

$$D_1 = \det\Big(\begin{bmatrix} a_{11} \end{bmatrix}\Big), \quad D_2 = \det\left(\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{12} & a_{22} \end{bmatrix}\right), \; \cdots \, , D_n = \det\left(\begin{bmatrix} a_{11} & \ldots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{1n} & \ldots & a_{nn} \end{bmatrix}\right),$$

wobei a_{ij} das Element in der i-ten Zeile und j-ten Spalte von $\mathbf{A}$ bezeichnet, d. h. $\mathbf{A} = [a_{ij}]_{i,j=1,\ldots,n}$. Um die Definitheit einer symmetrischen Matrix $\mathbf{A}$ zu bestimmen, muss lediglich eine der drei Bedingungen (a)–(c) in Satz 1.2 ausgewertet werden, da jede für sich notwendig und hinreichend ist. Das Kriterium (c) wird auch *Sylvester-Kriterium* genannt und kann nicht für semi-definite Matrizen verwendet werden.

Die positive Definitheit einer symmetrischen Matrix $\mathbf{A}$ kann alternativ zu den Bedingungen (a)–(c) aus Satz 1.2 auch mit Hilfe der *Cholesky-Faktorisierung* überprüft werden. Gemäß dieser Methode gilt, dass eine symmetrischen Matrix $\mathbf{A}$ genau dann positiv definit ist, wenn sie sich in der Form $\mathbf{A} = \mathbf{G}\mathbf{G}^{\mathrm{T}}$ faktorisieren lässt, wobei $\mathbf{G}$ eine untere Dreiecksmatrix mit positiven Diagonaleinträgen ist.

Bei der Abschätzung von Funktionen werden häufig der Gradient und die Hessematrix im Rahmen des *Mittelwertsatzes (Satz von Taylor)* verwendet.

Satz 1.3 (Mittelwertsatz, Satz von Taylor). *Es sei* $f(\mathbf{x})$ *eine stetig differenzierbare Funktion, d. h.* $f \in C^1$*, in einer Menge* $\mathcal{X}$*, die das Liniensegment* $[\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2]$ *beinhaltet, dann existiert eine reelle Zahl* α*,* $0 \leq \alpha \leq 1$ *so, dass gilt*

$$f(\mathbf{x}_2) = f(\mathbf{x}_1) + (\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1)^{\mathrm{T}}(\nabla f)(\alpha\mathbf{x}_1 + (1-\alpha)\mathbf{x}_2)\;. \tag{1.26}$$

Ist die Funktion $f(\mathbf{x})$ zweifach stetig differenzierbar, d. h. $f \in C^2$, dann existiert eine reelle Zahl α, $0 \leq \alpha \leq 1$ so, dass die Beziehung

$$f(\mathbf{x}_2) = f(\mathbf{x}_1) + (\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1)^{\mathrm{T}} (\nabla f)(\mathbf{x}_1) + \frac{1}{2} (\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1)^{\mathrm{T}} \left(\nabla^2 f\right) (\alpha \mathbf{x}_1 + (1-\alpha)\mathbf{x}_2)(\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1) \tag{1.27}$$

gilt.

1.3.4 Berechnung von Ableitungen

Zur konkreten Berechnung von Ableitungen können verschiedene Verfahren verwendet werden.

Analytisches Differenzieren

Ist $f(\mathbf{x})$ als analytischer Ausdruck gegeben, so können Ableitungen direkt mittels analytischer Differenzierung berechnet werden.

Algorithmisches Differenzieren

In der Optimierung steht die Kostenfunktion $f(\mathbf{x})$ häufig nicht als geschlossener analytischer Ausdruck zur Verfügung sondern in Form von Funktionen (Algorithmen), die in einem Computerprogramm realisiert sind. In diesem Fall bietet das *algorithmische Differenzieren*, gelegentlich auch *automatisches Differenzieren* genannt, eine komfortable Möglichkeit Ableitungen zu berechnen. Das Verfahren nutzt die Regeln der analytischen Differentiation (Differentiationsregeln für elementare Funktionen, Kettenregel, Produktregel, Summenregel, Quotientenregel, Ableitungsregel für inverse Funktionen, etc.) um ein neues Computerprogramm zu erstellen, das die gewünschten Ableitungen von $f(\mathbf{x})$ berechnet. Die Programmschritte werden dabei so organisiert, das eine effiziente und zugleich möglichst genaue Berechnung der Ableitungen erreicht wird. Mehr Informationen über das algorithmische Differenzieren ist z. B. unter `http://www.autodiff.org` oder in [1.7] zu finden.

Ableitungsberechnung mit Differenzenquotienten

Eine näherungsweise Ableitungsberechnung ist auch numerisch durch Bildung von Differenzenquotienten möglich [1.8]. Für eine allgemeine, hinreichend oft differenzierbare Funktion $f(\mathbf{x})$ sind in Tabelle 1.1 Beispiele für Differenzenquotienten gegeben. Hierbei ist h die Schrittweite und $\mathbf{e}_i$ der Einheitsvektor mit dem Eintrag 1 an der Stelle i. Die Tabelle enthält auch die Ordnungen der Fehler, welche bei dieser näherungsweisen Ableitungsberechnung entstehen können. Das sind *Abschneidefehler* und *Rundungsfehler*, wobei e_r der maximale relative Fehler zufolge von Rundungsoperationen bei Gleitkommaarithmetik ist.

Die Herleitung von Differenzenquotienten und die Berechnung der zugehörigen Abschneidefehler können mittels Taylorreihenentwicklung am Punkt $\mathbf{x}$ bzw. dem Mittelwertsatz 1.3 erfolgen [1.9]. Der Abschneidefehler ergibt sich, weil die Taylorreihenentwicklung bei einer bestimmten Ordnung abgebrochen wird und eine finite Schrittweite $h > 0$ verwendet

Ableitung, Richtung	Formel	Abschneide-fehler	Rundungs-fehler
1. Ableitung, vorwärts	$(\nabla f)(\mathbf{x}) \approx \left[\frac{f(\mathbf{x}+h\mathbf{e}_i)-f(\mathbf{x})}{h}\right]_{i=1,\dots,n}$	$\mathcal{O}(h)$	$\mathcal{O}(e_r h^{-1})$
1. Ableitung, rückwärts	$(\nabla f)(\mathbf{x}) \approx \left[\frac{f(\mathbf{x})-f(\mathbf{x}-h\mathbf{e}_i)}{h}\right]_{i=1,\dots,n}$	$\mathcal{O}(h)$	$\mathcal{O}(e_r h^{-1})$
1. Ableitung, zentral	$(\nabla f)(\mathbf{x}) \approx \left[\frac{f(\mathbf{x}+h\mathbf{e}_i)-f(\mathbf{x}-h\mathbf{e}_i)}{2h}\right]_{i=1,\dots,n}$	$\mathcal{O}(h^2)$	$\mathcal{O}(e_r h^{-1})$
2. Ableitung, vorwärts	$\left(\nabla^2 f\right)(\mathbf{x}) \approx [f(\mathbf{x}+h\mathbf{e}_i+h\mathbf{e}_j) - f(\mathbf{x}+h\mathbf{e}_i) - f(\mathbf{x}+h\mathbf{e}_j) + f(\mathbf{x})]_{i,j=1,\dots,n}/h^2$	$\mathcal{O}(h)$	$\mathcal{O}(e_r h^{-2})$
2. Ableitung, zentral	$\left(\nabla^2 f\right)(\mathbf{x}) \approx [f(\mathbf{x}+h\mathbf{e}_i+h\mathbf{e}_j) - f(\mathbf{x}+h\mathbf{e}_i-h\mathbf{e}_j) - f(\mathbf{x}-h\mathbf{e}_i+h\mathbf{e}_j) + f(\mathbf{x}-h\mathbf{e}_i-h\mathbf{e}_j)]_{i,j=1,\dots,n}/(4h^2)$	$\mathcal{O}(h^2)$	$\mathcal{O}(e_r h^{-2})$

Tabelle 1.1: Differenzenquotienten.

werden muss. Der Abschneidefehler ist also der Methode geschuldet und entsteht selbst bei exakter Berechnung des Funktionswertes $f(\mathbf{x})$.

Der Rundungsfehler ist auf die praktisch nicht exakte numerische Berechnung von $f(\mathbf{x})$, $f(\mathbf{x}\pm h\mathbf{e}_i)$ und $f(\mathbf{x}\pm h\mathbf{e}_i\pm h\mathbf{e}_j)$ bei Verwendung von Gleitkommaarithmetik zurückzuführen. Wie auch nachfolgendes Beispiel zeigt, kann der Rundungsfehler für $h \to 0$ unbeschränkt anwachsen.

Beispiel 1.6. Beispielhaft soll nun die Herleitung und Fehlerberechnung für den Vorwärtsdifferenzenquotient zur Approximation des Gradienten (erste Zeile in Tabelle 1.1) durchgeführt werden. Eine Taylorreihenentwicklung von $f(\mathbf{x})$ liefert unter Berücksichtigung des Mittelwertsatzes 1.3

$$f(\mathbf{x}+h\mathbf{e}_i) = f(\mathbf{x}) + h\left.\frac{\partial f}{\partial x_i}\right|_{\mathbf{x}} + \left.\frac{h^2}{2}\frac{\partial^2 f}{\partial x_i^2}\right|_{\mathbf{x}+\alpha h\mathbf{e}_i} \tag{1.28}$$

mit $\alpha \in (0,1)$. Daraus folgt

$$\left.\frac{\partial f}{\partial x_i}\right|_{\mathbf{x}} = \frac{f(\mathbf{x}+h\mathbf{e}_i)-f(\mathbf{x})}{h} \underbrace{- \left.\frac{h}{2}\frac{\partial^2 f}{\partial x_i^2}\right|_{\mathbf{x}+\alpha h\mathbf{e}_i}}_{\text{Abschneidefehler, O}(h)}. \tag{1.29}$$

Geht man nun davon aus, dass e_r der maximale relative Fehler durch die in der Gleitkommaarithmetik notwendigen Rundungsoperationen bei der Auswertung der Funktionen $f(\mathbf{x}+h\mathbf{e}_i)$ und $f(\mathbf{x})$ ist, so ergibt sich im schlechtesten Fall der berechnete Wert

$$\begin{aligned}&\frac{f(\mathbf{x}+h\mathbf{e}_i)(1+e_r)-f(\mathbf{x})(1-e_r)}{h}\\ &\quad=\frac{f(\mathbf{x}+h\mathbf{e}_i)-f(\mathbf{x})}{h}\underbrace{+\frac{(f(\mathbf{x}+h\mathbf{e}_i)+f(\mathbf{x}))e_r}{h}}_{\text{Rundungsfehler, } \mathrm{O}(e_r h^{-1})}\end{aligned} \tag{1.30}$$

als Approximation von $\partial f/\partial x_i|_{\mathbf{x}}$. Der Gesamtfehler folgt daher in der Form

$$\begin{aligned}&\underbrace{\frac{f(\mathbf{x}+h\mathbf{e}_i)-f(\mathbf{x})}{h}+\frac{(f(\mathbf{x}+h\mathbf{e}_i)+f(\mathbf{x}))e_r}{h}}_{\text{Berechneter Wert}}-\underbrace{\frac{\partial f}{\partial x_i}\bigg|_{\mathbf{x}}}_{\text{Exakter Wert}}\\ &\quad=\frac{h}{2}\frac{\partial^2 f}{\partial x_i^2}\bigg|_{\mathbf{x}+\alpha h\mathbf{e}_i}+\frac{(f(\mathbf{x}+h\mathbf{e}_i)+f(\mathbf{x}))e_r}{h}\,.\end{aligned} \tag{1.31}$$

Abbildung 1.12 zeigt wie in diesem Fall Abschneide-, Rundungs- und Gesamtfehler von h abhängen. Es existiert also eine optimale Schrittweite h, um den Gesamtfehler zu minimieren.

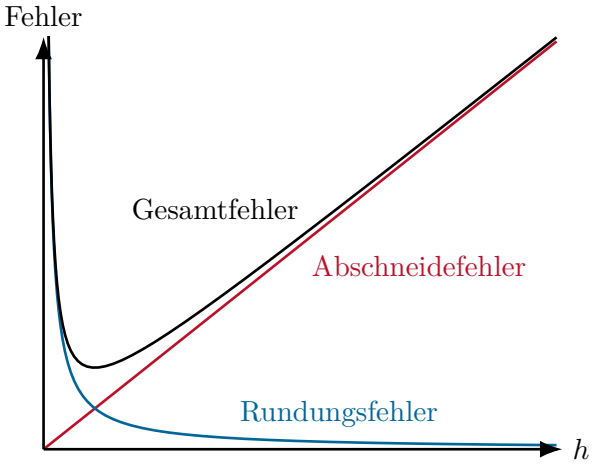


Abbildung 1.12: Fehler bei der Approximation des Gradienten durch den Vorwärtsdifferenzenquotienten in Abhängigkeit der Schrittweite h.

In Tabelle 1.1 und Beispiel 1.6 wurde nur der Rundungsfehler durch Gleitkommaarithmetik bei der Auswertung der Funktionen f berücksichtigt. Tatsächlich treten solche Rundungsfehler aber auch bei der Berechnung von Differenzenquotienten selbst auf, also z. B. bei der Auswertung von

$$\frac{f(\mathbf{x}+h\mathbf{e}_i)-f(\mathbf{x})}{h}\,. \tag{1.32}$$

Bei der Differenzbildung im Zähler dieses Ausdrucks kann es zu erheblichen Genauigkeitsverlusten durch *Auslöschungsfehler* kommen [1.10]. Beim Rechnen mit Gleitkommaarithmetik müssen alle Eingangsgrößen, Zwischenergebnisse der auftretenden Elementaroperationen und Endergebnisse auf die Zahl der Mantissenstellen gerundet werden. Als *Auslöschung* bezeichnet man das Annulieren führender Mantissenstellen bei der Subtraktion zweier (ähnlicher) Zahlen [1.11]. Geht man davon aus, dass mit M Mantissenstellen gerechnet wird und zwei zu subtrahierende Zahlen sich in m führenden Mantissenstellen gleichen, so bleiben im Ergebnis nur noch $M - m$ gültige von Null verschiedene Mantissenstellen übrig, was direkt die erzielbare Genauigkeit einschränkt. Je ähnlicher sich daher zwei zu subtrahierende Zahlen sind, desto kleiner wird $M - m$, was bei der Berechnung von Differenzenquotienten im Falle $h \to 0$ zur Unbrauchbarkeit des Ergebnisses führt.

Beispiel 1.7 (Auslöschungsfehler). Man betrachte die Rechnung

$$0.123\,456 - 0.123\,455 = 0.000\,001\ . \tag{1.33}$$

Ist in den beiden Eingangsgrößen auch nur die letzte Nachkommastelle zufolge von früheren Rundungsfehlern unsicher, so kann das Ergebnis 0.000 001 völlig falsch sein, d. h. keine einzige gültige von Null verschiedene Nachkommastelle besitzen.

Neben den Fehlerordnungen, Rundungsfehlern und Auslöschungsfehlern spielt auch der jeweilige Rechenaufwand bei der Wahl eines Differenzenquotienten eine Rolle. Bei der näherungsweisen Berechnung von $(\nabla f)(\mathbf{x})$ erfordern einseitige Differenzenquotienten $n+1$ Auswertungen der Funktion f und der zentrale Differenzenquotient $2n$ solche Auswertungen. D. h. bei der näherungsweisen Berechnung von $(\nabla f)(\mathbf{x})$ steigt der Berechnungsaufwand mit der Ordnung $\mathrm{O}(n)$. Bei der näherungsweisen Berechnung von $(\nabla^2 f)(\mathbf{x})$ steigt der Berechnungsaufwand mit der Ordnung $\mathrm{O}(n^2)$.

Ableitungsberechnung mittels komplexer Funktionsauswertung

Im Englischen ist die nachfolgend beschriebene Methode zur näherungsweisen Ableitungsberechnung als *complex step derivative* bekannt [1.12, 1.13]. Diese numerische Methode ist nur auf *holomorphe* Funktionen anwendbar. Holomorphe Funktionen werden auch als *komplex differenzierbar* bezeichnet.

Definition 1.5 (Holomorphe Funktion). Eine Funktion $f : \mathcal{X} \to \mathbb{C}$ mit $\mathcal{X} \subseteq \mathbb{C}$ nennt man *holomorph*, falls der Grenzwert

$$\lim_{h \to 0} \frac{f(z+h) - f(z)}{h} \qquad \forall\, z \in \mathcal{X} \tag{1.34}$$

mit $h \in \mathbb{C}$ existiert.

Eine Funktion $f : \mathcal{X} \to \mathbb{C}$ in mehreren Variablen, d. h. $\mathcal{X} \subseteq \mathbb{C}^n$, ist genau dann holomorph, wenn sie holomorph ist bezüglich jeder einzelnen Variable bei festgehaltenen übrigen Variablen.

Die erste Ableitung einer holomorphen reellen Funktion $f(\mathbf{x})$, d. h. $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, kann

näherungsweise mit der Formel

$$(\nabla f)(\mathbf{x}) \approx \left[\frac{\mathrm{Im}(f(\mathbf{x}+h\mathrm{I}\mathbf{e}_i))}{h}\right]_{i=1,\ldots,n} \tag{1.35}$$

berechnet werden, wobei $h > 0$ eine kleine reelle Schrittweite darstellt. Zur Herleitung von (1.35), wird $f(\mathbf{x})$ zunächst in eine Taylorreihe

$$f(\mathbf{x}+h\mathrm{I}\mathbf{e}_i) = f(\mathbf{x}) + h\mathrm{I}\frac{\partial f}{\partial x_i}\bigg|_{\mathbf{x}} - \frac{h^2}{2}\frac{\partial^2 f}{\partial x_i^2}\bigg|_{\mathbf{x}} - \frac{h^3}{6}\mathrm{I}\frac{\partial^3 f}{\partial x_i^3}\bigg|_{\mathbf{x}+\alpha h\mathrm{I}\mathbf{e}_i} \tag{1.36}$$

mit $\alpha \in (0,1)$ entwickelt. Dividiert man den Imaginärteil von (1.36) durch h, so folgen daraus

$$\frac{\partial f}{\partial x_i}\bigg|_{\mathbf{x}} = \frac{\mathrm{Im}(f(\mathbf{x}+h\mathrm{I}\mathbf{e}_i))}{h} \underbrace{+\frac{h^2}{6}\frac{\partial^3 f}{\partial x_i^3}\bigg|_{\mathbf{x}+\alpha h\mathrm{I}\mathbf{e}_i}}_{\text{Abschneidefehler, } \mathrm{O}(h^2)} \tag{1.37}$$

und somit direkt die Komponenten von (1.35). In ähnlicher Weise werden in [1.14] Formeln zur näherungsweisen Berechnung von zweiten Ableitungen mittels komplexer Funktionsauswertung hergeleitet.

$(\nabla f)(\mathbf{x})$ kann also mit nur n komplexen Auswertungen der Funktion f näherungsweise berechnet werden, wobei ein Abschneidefehler der Ordnung $\mathrm{O}(h^2)$ erzielt wird. Der Rundungsfehler besitzt die Ordnung $\mathrm{O}(e_r h^{-1})$. Ein zentraler Vorteil dieser Methode gegenüber der Ableitungsberechnung mit Differenzenquotienten ist, dass bei der Berechnung der ersten Ableitung kein Auslöschungsfehler auftritt (keine Subtraktion ähnlicher Zahlen nötig), weshalb h sehr klein gewählt werden kann. Dies gilt im Allgemeinen nicht mehr für höhere Ableitungen. Der Nachteil dieser Methode liegt im geringfügig höheren numerischen Aufwand, da mit komplexen Zahlen gerechnet werden muss. In [1.13] wird der Zusammenhang zwischen dieser Methode und dem algorithmischen Differenzieren diskutiert.

Aus dem Realteil von (1.36) folgt noch

$$f(\mathbf{x}) = \mathrm{Re}(f(\mathbf{x}+h\mathrm{I}\mathbf{e}_i)) + \mathrm{O}(h^2)\ . \tag{1.38}$$

Wird also eine Ableitung $\partial f/\partial x_i$ berechnet, so erhält man ohne zusätzliche Funktionsauswertungen auch den Wert $f(\mathbf{x})$.

1.3.5 Konvexität

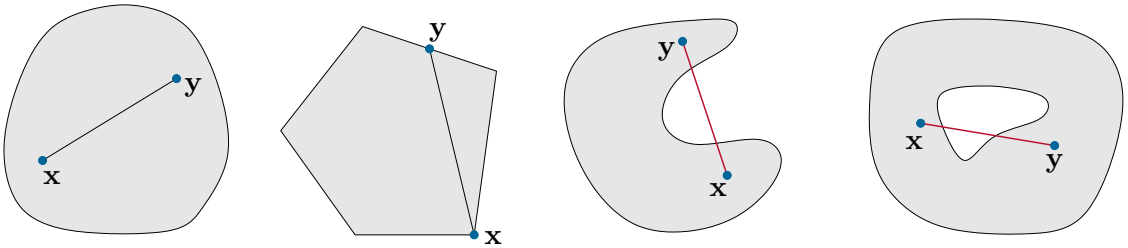
Die Eigenschaft der Konvexität ist von großer Bedeutung in der Optimierung und erlaubt häufig eine einfache (numerische) Lösung einer Optimierungsaufgabe. Der Begriff *konvex* kann sowohl auf Mengen als auch auf Funktionen angewandt werden.

1.3.5.1 Konvexe Mengen

Definition 1.6 (Konvexe Menge)**.** Eine Menge $\mathcal{X} \subseteq \mathbb{R}^n$ nennt man *konvex*, falls für alle $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathcal{X}$ und alle reellen Zahlen α mit $0 < \alpha < 1$ gilt

$$(\alpha\,\mathbf{x} + (1-\alpha)\,\mathbf{y}) \in \mathcal{X}\,. \tag{1.39}$$

Eine geometrische Interpretation dieser Definition ist, dass eine Menge $\mathcal{X} \subseteq \mathbb{R}^n$ genau dann konvex ist, falls die Verbindungslinie zwischen zwei beliebigen Punkten $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathcal{X}$ komplett in $\mathcal{X}$ enthalten ist. Abbildung 1.13 zeigt einige Beispiele konvexer und nicht-konvexer Mengen.



(a) konvex (b) konvex (c) nicht-konvex (d) nicht-konvex

Abbildung 1.13: Beispiele von konvexen und nicht-konvexen Mengen.

Konvexe Mengen besitzen folgende Eigenschaften:

(a) Die *Schnittmenge* von konvexen Mengen ist wiederum konvex.

(b) Wenn $\mathcal{X} \subseteq \mathbb{R}^n$ eine konvexe Menge ist, $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ eine feste reelle Matrix und $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$ ein fester reeller Vektor, dann ist die Menge

$$\{\mathbf{A}\mathbf{x} + \mathbf{b} \,|\, \mathbf{x} \in \mathcal{X}\} \subseteq \mathbb{R}^m \tag{1.40}$$

ebenfalls konvex. D. h. das Bild einer konvexen Menge unter einer *affinen Transformation* ist konvex.

(c) Wenn $\mathcal{X}$ und $\mathcal{Y}$ konvexe Mengen sind, dann ist die Menge

$$\{\mathbf{x} + \mathbf{y} \,|\, \mathbf{x} \in \mathcal{X},\ \mathbf{y} \in \mathcal{Y}\} \tag{1.41}$$

ebenfalls konvex.

Diese Eigenschaften sind u. a. bei der Charakterisierung der Konvexität der zulässigen Menge $\mathcal{X}$ einer Optimierungsaufgabe von Bedeutung.

1.3.5.2 Konvexe Funktionen

Definition 1.7 (Konvexe und konkave Funktionen)**.** Es sei $\mathcal{X} \subseteq \mathbb{R}^n$ eine konvexe Menge. Man nennt die Funktion $f : \mathcal{X} \to \mathbb{R}$ *konvex* auf $\mathcal{X}$, falls für alle $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathcal{X}$ und alle reellen Zahlen α mit $0 \leq \alpha \leq 1$ gilt

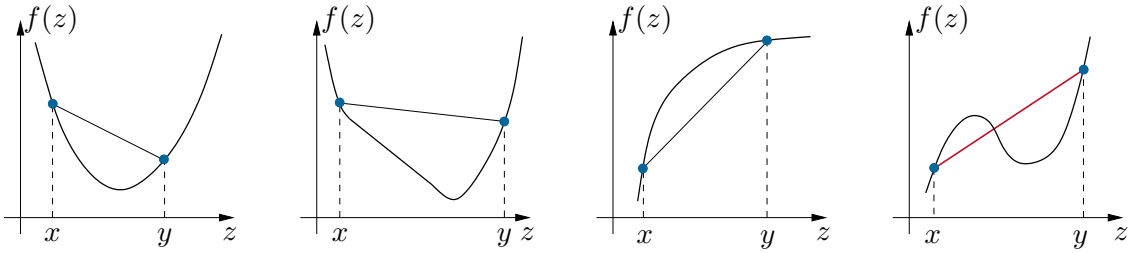
$$f(\alpha\,\mathbf{x} + (1-\alpha)\,\mathbf{y}) \leq \alpha\, f(\mathbf{x}) + (1-\alpha)\, f(\mathbf{y}). \tag{1.42}$$

Die Funktion f nennt man *strikt konvex*, falls für alle α mit $0 < \alpha < 1$ und $\mathbf{x} \neq \mathbf{y}$ gilt

$$f(\alpha\,\mathbf{x} + (1-\alpha)\,\mathbf{y}) < \alpha\,f(\mathbf{x}) + (1-\alpha)\,f(\mathbf{y}). \tag{1.43}$$

Man nennt die Funktion f *(strikt) konkav*, falls $-f$ (strikt) konvex ist.

Die Definition 1.7 kann wie folgt geometrisch interpretiert werden: Eine Funktion f ist konvex (konkav), falls für alle $\mathbf{x} \in \mathcal{X}$, $\mathbf{y} \in \mathcal{X}$ und $0 < \alpha < 1$ alle Funktionswerte $f(\alpha\,\mathbf{x} + (1-\alpha)\,\mathbf{y})$ unterhalb (oberhalb) oder auf der Verbindungslinie zwischen $f(\mathbf{x})$ und $f(\mathbf{y})$ liegen. Abbildung 1.14 zeigt einige Beispiele konvexer und konkaver Funktionen. Es ist direkt ersichtlich, dass affine Funktionen sowohl konkav als auch konvex sind.



(a) strikt konvex (b) konvex (nicht strikt) (c) konkav (d) weder konvex noch konkav

Abbildung 1.14: Beispiele von konvexen und konkaven Funktionen.

Konvexe Funktionen besitzen folgende Eigenschaften:

(a) Die Summenfunktion

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{k} a_i\,f_i(\mathbf{x}) \tag{1.44}$$

von auf der konvexen Menge $\mathcal{X}$ konvexen Funktionen $f_i(\mathbf{x})$, $i = 1, \ldots, k$ mit den reellen Koeffizienten $a_i \geq 0, i = 1, \ldots, k$ ist auf $\mathcal{X}$ ebenfalls konvex.

(b) Ist die Funktion $f(\mathbf{y})$ auf der konvexen Menge $\mathcal{Y} \subseteq \mathbb{R}^m$ konvex und existieren eine konvexe Menge $\mathcal{X} \subseteq \mathbb{R}^n$, eine feste reelle Matrix $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m\times n}$ und ein fester reeller Vektor $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$ so, dass

$$\{\mathbf{A}\mathbf{x} + \mathbf{b} \,|\, \mathbf{x} \in \mathcal{X}\} \subseteq \mathcal{Y} \tag{1.45}$$

gilt, dann ist die Funktion

$$\tilde{f}(\mathbf{x}) = f(\mathbf{A}\mathbf{x} + \mathbf{b}) \tag{1.46}$$

konvex auf $\mathcal{X}$.

(c) Ist die Funktion $f(\mathbf{x})$ auf der konvexen Menge $\mathcal{X}$ konvex, so ist die Menge

$$\{\mathbf{x} \in \mathcal{X} \,|\, f(\mathbf{x}) \leq c\} \tag{1.47}$$

für alle reellen Zahlen $c \in \mathbb{R}$ ebenfalls konvex, siehe Abbildung 1.15.

(d) *Eine stetig differenzierbare Funktion $f \in C^1$ ist genau dann konvex* auf der konvexen Menge $\mathcal{X}$, wenn für alle $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathcal{X}$ die Ungleichung

$$f(\mathbf{y}) \geq f(\mathbf{x}) + (\mathbf{y} - \mathbf{x})^{\mathrm{T}} (\nabla f)(\mathbf{x}) \tag{1.48}$$

erfüllt ist. Die geometrische Interpretation der Ungleichung (1.48) ist, dass an jedem Punkt $\mathbf{x}$ einer konvexen Funktion $f(\mathbf{x})$ eine sogenannte *stützende Hyperebene* (skalarer Fall: *stützende Tangente*) existieren muss, oberhalb oder auf der $f(\mathbf{x})$ verläuft. Dies ist in Abbildung 1.16 veranschaulicht.

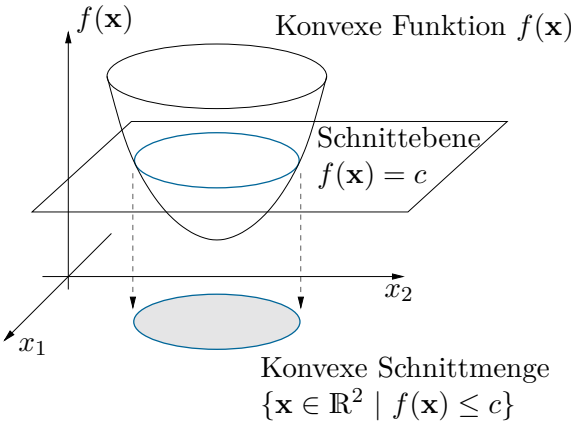


Abb. 1.15: Konvexe Menge, die durch den Schnitt einer konvexen Funktion $f(\mathbf{x})$ mit der Ebene $f(\mathbf{x}) = \text{konst.}$ entsteht.

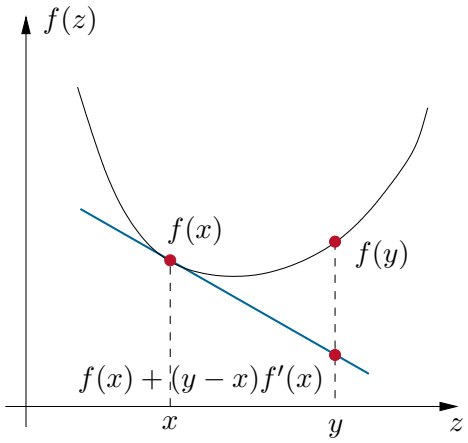


Abb. 1.16: Stützende Tangente einer konvexen Funktion $f(z)$.

(e) *Eine zweifach stetig differenzierbare Funktion $f \in C^2$ ist genau dann konvex* auf der konvexen Menge $\mathcal{X}$, wenn die Hessematrix $(\nabla^2 f)(\mathbf{x})$ positiv semi-definit für alle $\mathbf{x} \in \mathcal{X}$ ist. Falls die Hessematrix $(\nabla^2 f)(\mathbf{x})$ positiv definit ist, so folgt daraus die strikte Konvexität der Funktion $f(\mathbf{x})$. Die Umkehrung dieser Aussage ist jedoch nicht gültig, wie man sich anhand der Funktion $f(x) = x^4$ überzeugen kann. Diese Funktion ist strikt konvex, aber die zugehörige Hessematrix an der Stelle $x = 0$ ist identisch Null.

Aufgabe 1.1. Beweisen Sie die Eigenschaften (a)–(e) von konvexen Funktionen. Nutzen Sie für den Beweis der Eigenschaft (e) den Mittelwertsatz, siehe Satz 1.3, im Speziellen (1.27).

Aufgabe 1.2. Zeigen Sie, dass die Funktion $f(\mathbf{x}) = x_1^4 + x_1^2 - 2x_1x_2 + x_2^2$ mit $\mathbf{x} = [x_1 \quad x_2]^{\mathrm{T}} \in \mathbb{R}^2$ über ihrem gesamten Definitionsbereich $\mathbb{R}^2$ konvex ist.

1.4 Literatur

[1.1] A. E. Bryson, Jr., *Dynamic Optimization*. Addison-Wesley, 1999.

[1.2] R. H. Goddard, „A method of reaching extreme altitudes“, *Smithsonian Miscellaneous Collections*, Jg. 71, Nr. 2, 1919.

[1.3] K. Pohmer, *Mikroökonomische Theorie der personellen Einkommens- und Vermögensverteilung*, Ser. Studies in Contemporary Economics. Springer, 1985, Bd. 16.

[1.4] H. J. Oberle und R. Rosendahl, „Numerical computation of a singular-state subarc in an economic optimal control model“, *Optimal Control Applications and Methods*, Jg. 27, Nr. 4, S. 211–235, 2006.

[1.5] M. Bazaraa, H. Sherali und C. Shetty, *Nonlinear Programming: Theory and Algorithms*, 3. Aufl. John Wiley & Sons, 2006.

[1.6] I. Griva, S. Nash und A. Sofer, *Linear and Nonlinear Optimization*, 2. Aufl. Society for Industrial und Applied Mathematics, 2009.

[1.7] A. Griewank und A. Walther, *Evaluating Derivatives: Principles and Techniques of Algorithmic Differentiation*, 2. Aufl., Ser. Other Titles in Applied Mathematics. Society for Industrial und Applied Mathematics, 2008.

[1.8] D. Lynch, *Numerical Partial Differential Equations for Environmental Scientists and Engineers - A First Practical Course*. New York: Springer, 2005.

[1.9] M. Hanke-Bourgeois, *Grundlagen der Numerischen Mathematik und des Wissenschaftlichen Rechnens*, 3. Aufl. Vieweg+Teubner, 2009.

[1.10] P. E. Gill, W. Murray und M. H. Wright, *Practical Optimization*. Academic Press, 1981.

[1.11] H.R. Schwarz und N. Köckler, *Numerische Mathematik*, 8. Aufl. Wiesbaden: Vieweg+Teubner, 2011.

[1.12] J. Lyness und C. Moler, „Numerical differentiation of analytic functions“, *SIAM Journal on Numerical Analysis*, Jg. 4, Nr. 2, S. 202–210, 1967.

[1.13] J. Martins, P. Sturdza und J. Alonso, „The complex-step derivative approximation“, *ACM Transactions on Mathematical Software*, Jg. 29, Nr. 3, S. 245–262, 2003.

[1.14] R. Abreu, „Complex steps finite differences with applications to seismic problems“, Diss., University of Granada, Granada, Spanien, 2013.

[1.15] J. Nocedal und S. J. Wright, *Numerical Optimization*, 2. Aufl., Ser. Springer Series in Operations Research and Financial Engineering. Springer, 2006.

[1.16] S. Boyd und L. Vandenberghe, *Convex Optimization*. Cambridge University Press, 2004.

[1.17] M. Papageorgiou, M. Leibold und M. Buss, *Optimierung: Statische, dynamische, stochastische Verfahren für die Anwendung*, 4. Aufl. Springer, 2015.

[1.18] D. P. Bertsekas, *Nonlinear Programming*, 2. Aufl. Athena Scientific, 1999.

[1.19] D. G. Luenberger und Y. Ye, *Linear and Nonlinear Programming*, 3. Aufl., Ser. International Series in Operations Research & Management Science. Springer, 2008, Bd. 116.

[1.20] B. C. Chachuat, „Nonlinear and Dynamic Optimization: From Theory to Practice“, abrufbar unter http://infoscience.epfl.ch/record/111939, Laboratoire d'Automatique, École Polytechnique Fédérale de Lausanne, 2007, (besucht am 28. 09. 2017).

2 Statische Optimierung: Unbeschränkter Fall

In diesem Kapitel werden unbeschränkte statische Optimierungsprobleme der Art

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

betrachtet. Die Abschnitte 2.2 bis 2.6 behandeln numerische Verfahren zur Lösung solcher Optimierungsprobleme. Im nachfolgenden Abschnitt werden Optimalitätsbedingungen für das Problem (2.1) formuliert. Zur Definition der Begriffe lokaler und globaler Minima sei auf Abschnitt 1.3.1 und im Speziellen auf Definition 1.2 verwiesen.

2.1 Optimalitätsbedingungen

Satz 2.1 (Notwendige Optimalitätsbedingung erster Ordnung)**.** *Es sei $f \in C^1$ eine Funktion definiert auf $\mathbb{R}^n$. Wenn $\mathbf{x}^*$ ein lokales Minimum von f auf $\mathbb{R}^n$ ist, dann gilt*

$$(\nabla f)(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}. \tag{2.2}$$

Beweis. Man betrachte die Funktion $g(\alpha) = f(\mathbf{x}^* + \alpha\mathbf{d})$ mit einer beliebigen Richtung $\mathbf{d} \in \mathbb{R}^n$ und $\alpha \geq 0$. Für beliebige Werte $\alpha \geq 0$ gilt $\mathbf{x}^* + \alpha\mathbf{d} \in \mathbb{R}^n$, so dass die Funktion $g(\alpha)$ wohldefiniert ist. Diese Funktion muss am Punkt $\alpha = 0$ ein lokales Minimum besitzen. Entwickelt man $g(\alpha)$ um den Punkt $\alpha = 0$ in eine Taylorreihe und bricht diese nach dem linearen Glied ab, so erhält man

$$g(\alpha) = g(0) + g'(0)\alpha + \mathcal{O}(\alpha^2) \tag{2.3}$$

mit $g'(0) = \mathbf{d}^{\mathrm{T}}(\nabla f)(\mathbf{x}^*)$. Der Restterm $\mathcal{O}(\alpha^2)$ klingt quadratisch nach Null ab, d. h. schneller als der lineare Term $g'(0)\alpha$. Wäre nun $g'(0) < 0$, dann würde für ein hinreichend kleines $\alpha > 0$ gelten $g(\alpha) - g(0) < 0$, was im Widerspruch zu der Annahme steht, dass $\alpha = 0$ bzw. $\mathbf{x}^*$ ein Minimum ist. Daher muss gelten $g'(0) = \mathbf{d}^{\mathrm{T}}(\nabla f)(\mathbf{x}^*) \geq 0$. Dies kann aber nur dann für beliebige $\mathbf{d} \in \mathbb{R}^n$ erfüllt sein, wenn $(\nabla f)(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}$ gilt. □

Beispiel 2.1. Man betrachte das Optimierungsproblem

$$\min_{\mathbf{x}\in\mathbb{R}^2} \; f(x_1, x_2) = x_1^2 - x_1x_2 + x_2^2 - 3x_2 \; . \tag{2.4}$$

Berechnet man nun die notwendige Optimalitätsbedingung erster Ordnung gemäß (2.2)

$$2x_1 - x_2 = 0 \tag{2.5a}$$
$$-x_1 + 2x_2 = 3\ , \tag{2.5b}$$

dann erkennt man, dass $\mathbf{x}^* = [1 \quad 2]^{\mathrm{T}}$ eine eindeutige Lösung von (2.5) ist. Man kann zeigen, das $\mathbf{x}^*$ in diesem Fall sogar ein globales Minimum ist.

Die Optimalitätsbedingung gemäß Satz 2.1 ist notwendig aber nicht hinreichend. Die Bedingung gibt lediglich an, dass es sich bei dem betreffenden Punkt um einen *Extremalpunkt* (auch als *stationärer Punkt* bezeichnet) handelt, und wird von einem Minimum, Maximum oder Sattelpunkt gleichermaßen erfüllt, siehe Abbildung 2.1.

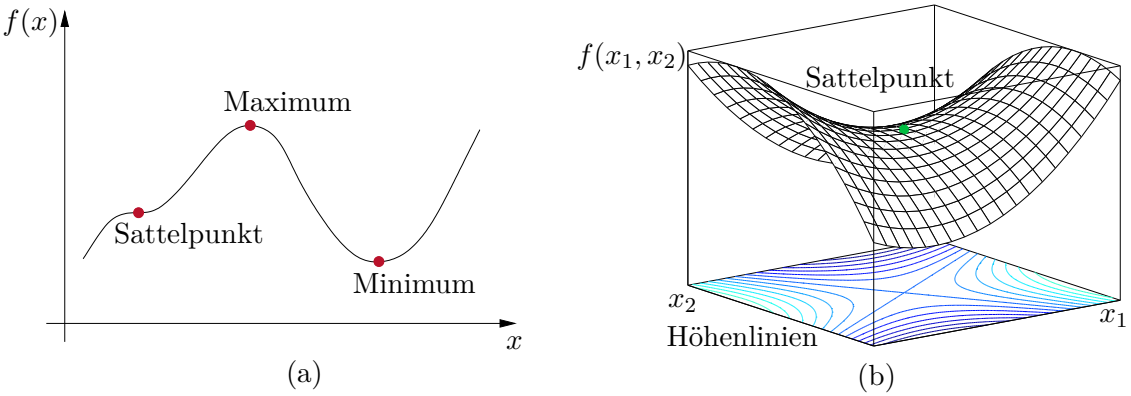


Abbildung 2.1: Beispiele von stationären Punkten im ein- und zweidimensionalen Fall.

Satz 2.2 (Notwendige Optimalitätsbedingungen zweiter Ordnung)**.** *Es sei $f \in C^2$ eine Funktion definiert auf $\mathbb{R}^n$. Wenn $\mathbf{x}^*$ ein lokales Minimum von f auf $\mathbb{R}^n$ ist, dann gelten die Bedingungen*

$$(a) \quad (\nabla f)(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0} \tag{2.6a}$$
$$(b) \quad \left(\nabla^2 f\right)(\mathbf{x}^*) \text{ ist positiv semi-definit.} \tag{2.6b}$$

Aufgabe 2.1. Beweisen Sie Satz 2.2. **Hinweis:** Orientieren Sie sich dabei am Beweis von Satz 2.1.

Auch Satz 2.2 beschreibt lediglich notwendige Optimalitätsbedingungen, wie man sich einfach anhand der Funktion $f(x) = x^3$ überzeugen kann. Diese Funktion besitzt an der Stelle $x^* = 0$ einen Extremalpunkt ($f'(x^*) = 3(x^*)^2 = 0$) und obwohl die zweite Ableitung $f''(x^*) = 6x^* = 0$ positiv semi-definit ist, ist $x^* = 0$ kein Minimum. Die Funktion hat an der Stelle $x^* = 0$ einen Sattelpunkt.

Es können nun folgende hinreichende Optimalitätsbedingungen angegeben werden.

Satz 2.3 (Hinreichende Optimalitätsbedingungen zweiter Ordnung). *Es sei $f \in C^2$ eine Funktion definiert auf $\mathbb{R}^n$. Wenn die Bedingungen*

$$(a) \quad (\nabla f)(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0} \tag{2.7a}$$

$$(b) \quad \left(\nabla^2 f\right)(\mathbf{x}^*) \text{ ist positiv definit} \tag{2.7b}$$

erfüllt sind, dann ist $\mathbf{x}^*$ ein striktes lokales Minimum *von f auf $\mathbb{R}^n$.*

Aufgabe 2.2. Beweisen Sie Satz 2.3.

Beispiel 2.2. Für das Optimierungsproblem

$$\min_{\mathbf{x}\in\mathbb{R}^2} f(\mathbf{x}) = \; x_1^2 + a x_2^2 - x_1 x_2 \tag{2.8}$$

sollen die stationären Werte $\mathbf{x}^*$ in Abhängigkeit des Parameters $a \neq \frac{1}{4}$ charakterisiert werden. Der Gradient und die Hessematrix von $f(\mathbf{x})$ ergeben sich zu

$$(\nabla f)(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} 2x_1 - x_2 \\ 2ax_2 - x_1 \end{bmatrix}, \quad \left(\nabla^2 f\right)(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 2a \end{bmatrix}. \tag{2.9}$$

Aus $(\nabla f)(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}$ folgt $\mathbf{x}^* = [0 \quad 0]^{\mathrm{T}}$ als einziger stationärer Punkt. Die Definitheit der Hessematrix $(\nabla^2 f)(\mathbf{x})$ an der Stelle $\mathbf{x}^*$ lässt sich mit Hilfe der Hauptminoren (Sylvesterkriterium, siehe (c) in Satz 1.2) untersuchen

$$D_1 = 2, \quad D_2 = 4a - 1\,. \tag{2.10}$$

Somit ist $(\nabla^2 f)(\mathbf{x}^*)$ positiv definit für $a > \frac{1}{4}$ und $\mathbf{x}^* = [0 \quad 0]^{\mathrm{T}}$ stellt ein striktes Minimum dar. Für $a < \frac{1}{4}$ ist $D_1 > 0$ und $D_2 < 0$ und $(\nabla^2 f)(\mathbf{x})$ somit *indefinit*. In diesem Fall ist $\mathbf{x}^* = [0 \quad 0]^{\mathrm{T}}$ ein *Sattelpunkt*, ähnlich wie er in Abbildung 2.1(b) für $a = -1$ dargestellt ist.

Wenn die Funktion $f(\mathbf{x})$ konvex ist, dann ist die notwendige Optimalitätsbedingung erster Ordnung gemäß Satz 2.1 auch *hinreichend*. Um dies zu sehen, beachte man, dass mit beliebigem $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$ wegen der Konvexität von $f(\mathbf{x})$ mit dem Minimum $\mathbf{x}^*$ die Ungleichung

$$f(\mathbf{y}) \geq f(\mathbf{x}^*) + (\mathbf{y} - \mathbf{x}^*)^{\mathrm{T}} \underbrace{(\nabla f)(\mathbf{x}^*)}_{=\,0} = f(\mathbf{x}^*) \tag{2.11}$$

gilt. Die Sätze 2.1 bis 2.3 liefern nur Aussagen zu lokalen Minima. Wenn die Funktion $f(\mathbf{x})$ konvex oder strikt konvex ist, dann können nachfolgende Bedingungen für globale Minima angegeben werden.

Satz 2.4 (Globale Minima einer konvexen Funktion). *Es sei $f(\mathbf{x})$ eine konvexe Funktion auf $\mathbb{R}^n$. Die Menge aller Minima $\mathcal{G} = \arg\min\{f(\mathbf{x}) \,|\, \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n\}$ ist konvex. Jedes* lokale Minimum $\mathbf{x}^* \in \mathcal{G}$ *von f ist auch ein* globales Minimum. *Ist $f(\mathbf{x})$ strikt*

konvex, so ist $\mathbf{x}^*$ *ein* striktes *globales Minimum.*

Beweis. Angenommen c beschreibt den minimalen Wert von f. Dann ist die Menge $\mathcal{G} = \{\mathbf{x} \,|\, \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n,\ f(\mathbf{x}) \leq c\}$ gemäß (1.47) konvex, womit der erste Teil des Satzes gezeigt ist.

Der zweite Teil des Satzes kann mittels Beweis durch Widerspruch gezeigt werden. Angenommen $\mathbf{x}^*$ ist ein lokales Minimum aber kein globales Minimum von f auf $\mathbb{R}^n$. Dann existiert ein Punkt $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$, der die Ungleichung $f(\mathbf{y}) < f(\mathbf{x}^*)$ erfüllt. Gemäß der Definition 1.7 für konvexe Funktionen gilt dann für alle $\alpha \in [0, 1]$

$$f(\alpha\mathbf{x}^* + (1-\alpha)\mathbf{y}) \leq \alpha f(\mathbf{x}^*) + (1-\alpha) f(\mathbf{y}) < \alpha f(\mathbf{x}^*) + (1-\alpha) f(\mathbf{x}^*) = f(\mathbf{x}^*)\ . \quad (2.12)$$

Dies zeigt, dass mit $\alpha \to 1$ Punkte $\alpha\mathbf{x}^* + (1-\alpha)\mathbf{y}$ gefunden werden können, die beliebig nahe bei $\mathbf{x}^*$ liegen, deren Funktionswerte $f(\alpha\mathbf{x}^* + (1-\alpha)\mathbf{y})$ aber strikt kleiner sind als $f(\mathbf{x}^*)$. Dies verletzt die Definition eines lokalen Minimums an der Stelle $\mathbf{x}^*$ und steht daher im Widerspruch zu Annahme. Folglich kann kein Punkt $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$ existieren, der die Ungleichung $f(\mathbf{y}) < f(\mathbf{x}^*)$ erfüllt und $\mathbf{x}^*$ ist ein globales Minimum.

In ähnlicher Weise kann der dritte Teil des Satzes gezeigt werden. Die Annahme, dass $\mathbf{x}^*$ kein striktes globales Minimum ist, also ein Punkt $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$ existiert, der die Gleichung $f(\mathbf{y}) = f(\mathbf{x}^*)$ erfüllt, führt für eine strikt konvexe Funktion $f(\mathbf{x})$ auf einen Widerspruch. □

2.2 Rechnergestützte Minimierungsverfahren: Grundlagen

Da die Bestimmung eines (lokal) optimalen Punktes $\mathbf{x}^*$ von (2.1) durch analytische Lösung der Stationaritätsbedingung $(\nabla f)(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}$ von (2.7a) (n nichtlineare Gleichungen in $\mathbf{x}^*$) nur in seltenen Fällen möglich ist, ist man im Allgemeinen auf *numerische Verfahren* zur Suche von $\mathbf{x}^*$ angewiesen. Viele der in dieser Vorlesung besprochenen Algorithmen finden den exakten Punkt $\mathbf{x}^*$ nicht in einer endlichen Anzahl von Rechenschritten, sondern generieren eine Folge $\{\mathbf{x}_k\}$, entlang welcher die zu optimierende Funktion $f(\mathbf{x})$ abnimmt, d. h.

$$f(\mathbf{x}_{k+1}) < f(\mathbf{x}_k), \quad k = 0, 1, 2, \ldots, \quad (2.13)$$

und die zumindest für $k \to \infty$ gegen $\mathbf{x}^*$ konvergieren soll, d. h.

$$\lim_{k\to\infty} \mathbf{x}_k = \mathbf{x}^*. \quad (2.14)$$

In der englischsprachigen Literatur werden solche Algorithmen auch als *iterative descent algorithms* bezeichnet. Neben der anhand von (2.14) zu beantwortenden Frage, ob ein Algorithmus prinzipiell gegen die richtige Lösung $\mathbf{x}^*$ konvergiert, interessiert, wie rasch er dies tut. Es ist also das (globale) Konvergenzverhalten des Algorithmus zu analysieren. Zumeist wird diese Analyse basierend auf einer *Fehlerfunktion* $e : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, welche $e(\mathbf{x}) \geq 0$ für alle $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ und $e(\mathbf{x}^*) = 0$ erfüllt, durchgeführt. Als Fehlerfunktion kann z. B. der Abstand

$$e(\mathbf{x}) = ||\mathbf{x} - \mathbf{x}^*|| \geq 0 \quad (2.15a)$$

im Sinne einer Norm $||\cdot||$ oder die Kostendifferenz

$$e(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}) - f(\mathbf{x}^*) \geq 0 \tag{2.15b}$$

verwendet werden [2.1]. Das Konvergenzverhalten eines Algorithmus kann nun anhand der zu $\{\mathbf{x}_k\}$ gehörenden Folge $\{e_k\}$ mit $e_k = e(\mathbf{x}_k)$ analysiert werden. Zunächst sollen dazu die Begriffe *Konvergenzordnung* und *Konvergenzrate* einer Folge von Skalaren definiert werden.

Definition 2.1 (Konvergenzordnung, Konvergenzrate)**.** Es sei $\{e_k\}$ eine Folge von Skalaren, die gegen den Grenzwert 0 konvergiert. Die *Konvergenzordnung* der Folge $\{e_k\}$ ist das Supremum der nichtnegativen Zahlen p, für die gilt

$$0 \leq \lim_{k\to\infty} \frac{|e_{k+1}|}{|e_k|^p} = \mu < \infty. \tag{2.16}$$

Als zugehörige *Konvergenzrate* bezeichnet man die Zahl μ. Es werden folgende Fälle unterschieden:

- Im Fall $p = 1$ und $\mu \in (0, 1)$ spricht man von *linearer* Konvergenz.
- Im Fall $p > 1$ mit $\mu > 0$ oder $p = 1$ mit $\mu = 0$ spricht man von *superlinearer* Konvergenz.
- Im Fall $p = 2$ mit $\mu > 0$ spricht man von *quadratischer* Konvergenz.
- Im Fall $p = 3$ mit $\mu > 0$ spricht man von *kubischer* Konvergenz.

Im Wesentlichen beschreiben die Konvergenzordnung und die Konvergenzrate das Verhalten einer Folge für $k \to \infty$. Größere Werte der Konvergenzordnung p bedeuten, dass die Folge schneller konvergiert, da die Folgenelemente e_k (zumindest für sehr große Werte von k) mit der p-ten Potenz abnehmen. Analoges gilt für kleinere Werte der Konvergenzrate μ.

Beispiel 2.3. Die Folge $\{a^k\}$ mit $0 < a < 1$ konvergiert mit der Konvergenzordnung $p = 1$ und der Konvergenzrate $\mu = a$ gegen Null. Zunächst gilt, dass nur für $p \leq 1$ die Bedingung

$$\lim_{k\to\infty} \frac{a^{k+1}}{a^{kp}} = \lim_{k\to\infty} a^{1+k(1-p)} < \infty \tag{2.17}$$

erfüllt ist. Mit $p = 1$ folgt dann

$$\lim_{k\to\infty} \frac{a^{k+1}}{a^k} = a = \mu \tag{2.18}$$

für die Konvergenzrate μ.

Aufgabe 2.3. Zeigen Sie, dass die Folge $\{a^{2^k}\}$ mit $0 < a < 1$ mit der Konvergenzordnung 2 und der Konvergenzrate 1 gegen 0 konvergiert.

Beispiel 2.4. Die Folge $\{\frac{1}{k^k}\}$ hat eine lineare Konvergenzordnung, da nur für $p \leq 1$ die Bedingung

$$\lim_{k\to\infty} \frac{k^{kp}}{(k+1)^{k+1}} < \infty \tag{2.19}$$

erfüllt ist. Mit $p = 1$ ergibt sich dann

$$\lim_{k\to\infty} \frac{k^k}{(k+1)^{k+1}} = \lim_{k\to\infty} \frac{1}{k+1}\left(\frac{k}{k+1}\right)^k = \mu = 0. \tag{2.20}$$

Folglich konvergiert die Folge $\{\frac{1}{k^k}\}$ superlinear gegen Null.

Abschließend stellt sich die Frage, ob das beobachtete Konvergenzverhalten eines Optimierungsalgorithmus von der gewählten Fehlerfunktion $e(\mathbf{x})$ abhängt. Es lässt sich zeigen (vgl. [2.2]), dass die Konvergenzordnung eines Optimierungsalgorithmus von der Wahl der Fehlerfunktion $e(\mathbf{x})$ weitgehend unabhängig ist. Dies gilt nicht für die Konvergenzrate.

Die bekanntesten numerischen Verfahren zur Lösung der unbeschränkten statischen Optimierungsaufgabe (2.1) sind die so genannten *Liniensuchverfahren* (englisch: *line search methods*). Der folgende Abschnitt gibt einen kurzen Überblick über die bekanntesten Liniensuchverfahren. Im Anschluss daran werden mit der *Methode der Vertrauensbereiche* und dem *direkten Suchverfahren* zwei alternative Lösungsmethoden für unbeschränkte statische Optimierungsaufgaben vorgestellt.

2.3 Liniensuchverfahren

Initialisierung: $\mathbf{x}_0$ (Startlösung)
$k = 0$ (Startindex)

while $\mathbf{x}_k$ ist nicht optimal
Wähle geeignete Suchrichtung $\mathbf{s}_k$
Wähle optimale Schrittweite gemäß
$\alpha_k = \arg\min_{\alpha>0} f(\mathbf{x}_k + \alpha\mathbf{s}_k)$
$\mathbf{x}_{k+1} \leftarrow \mathbf{x}_k + \alpha_k\mathbf{s}_k$
$k \leftarrow k + 1$

end

Tabelle 2.1: Genereller Ablauf eines Liniensuchverfahrens.

Tabelle 2.1 zeigt die grundsätzliche algorithmische Struktur eines Liniensuchverfahrens. Zum Iterationsschritt k ermittelt man vorerst eine geeignete *Suchrichtung* bzw. *Abstiegsrichtung* $\mathbf{s}_k$. Sie soll so gewählt werden, dass, wenn man sich hinreichend wenig vom Punkt $\mathbf{x}_k$ aus in diese Richtung bewegt, also

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_k\mathbf{s}_k \tag{2.21}$$

mit einer geeigneten *Schrittweite* $\alpha_k > 0$, die Abstiegsbedingung (2.13), d. h.

$$f(\mathbf{x}_{k+1}) = f(\mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{s}_k) < f(\mathbf{x}_k) \tag{2.22}$$

erfüllt ist. Nun wird die optimale Schrittweite $\alpha_k > 0$ durch Lösung des *skalaren Optimierungsproblems*

$$\min_{\alpha_k > 0} g(\alpha_k) = f(\mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{s}_k) \tag{2.23}$$

bestimmt. Die Iteration wird solange wiederholt, bis ein Abbruchkriterium erfüllt ist, z. B. bis eine gewählte Fehlerfunktion betraglich kleiner als ein vorgegebener Schwellwert ist.

Abbildung 2.2 veranschaulicht das Prinzip der Liniensuche anhand von einem Iterationsschritt für eine (nicht konvexe) Kostenfunktion $f(\mathbf{x})$ mit $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^2$ bei einer gegebenen Suchrichtung $\mathbf{s}_k$. In diesem Zusammenhang wird auch der Name *Liniensuchverfahren* verständlich, da sich bei gegebener Suchrichtung $\mathbf{s}_k$ die Optimierungsaufgabe, d. h. die Wahl der Schrittweite α_k, auf das Auffinden eines Minimums entlang einer Linie reduziert.

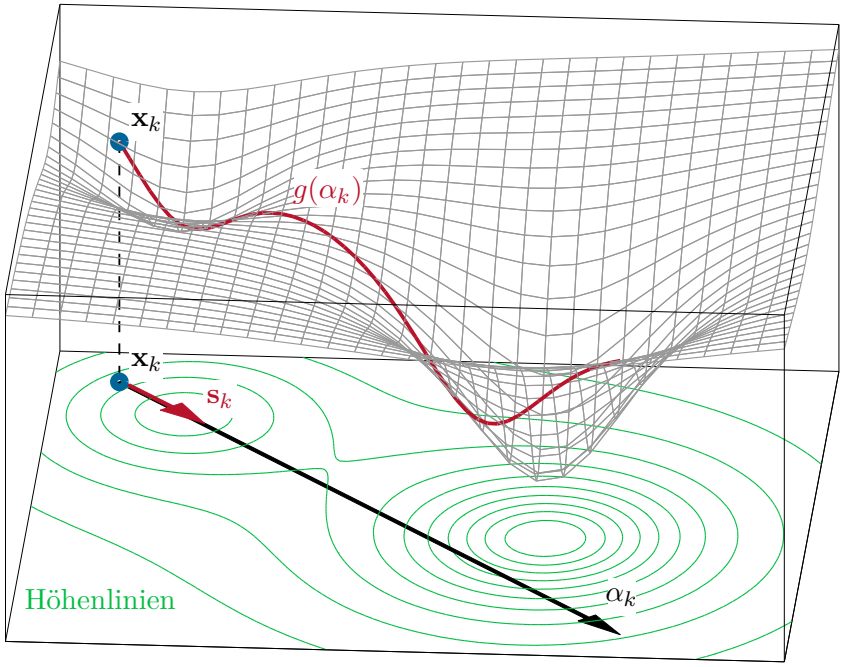


Abbildung 2.2: Veranschaulichung der Wahl der Schrittweite gemäß (2.23).

2.3.1 Wahl der Schrittweite

2.3.1.1 Intervallschachtelungsverfahren („Goldener Schnitt“)

Das *Intervallschachtelungsverfahren* generiert für das skalare Optimierungsproblem (2.23) eine konvergierende Folge von Intervallschachtelungen, um das Minimum von $g(\alpha_k)$ einzugrenzen.

Zunächst muss ein Intervall $[l_0, r_0]$ gefunden werden, in dem die Funktion $g(\alpha_k)$ ein Minimum aufweist, siehe Abbildung 2.3. Dies kann z. B. dadurch erreicht werden, dass mit

einem hinreichend kleinen l_0 gestartet und r_0 (ausgehend von l_0) sukzessive vergrößert wird, bis der Funktionswert $g(r_0)$ anfängt zuzunehmen. Für das Folgende wird vorausgesetzt, dass die Funktion $g(\alpha_k)$ stetig und *strikt unimodal* im Intervall $[l_0, r_0]$ ist, d. h. die Funktion $g(\alpha_k)$ hat im Intervall $[l_0, r_0]$ genau ein eindeutiges Minimum.

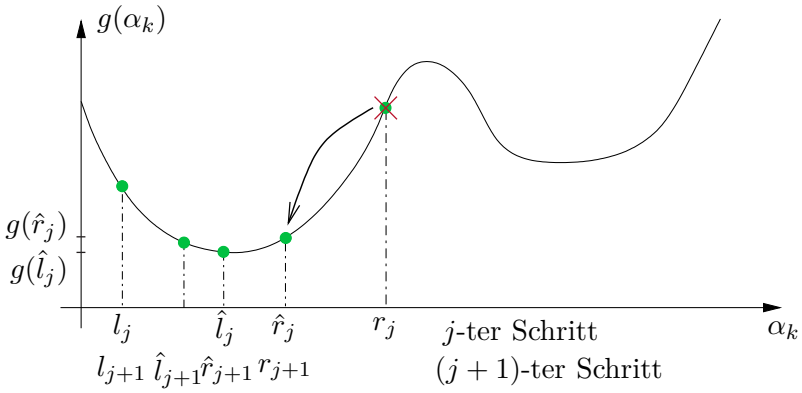


Abbildung 2.3: Veranschaulichung des Intervallschachtelungsverfahrens nach dem Prinzip des „Goldenen Schnittes“.

Zum Iterationsschritt j liege das Intervall $[l_j, r_j]$ vor, das nach wie vor jenen Wert α_k^* beinhaltet, der die Funktion $g(\alpha_k)$ minimiert. Nun werden zwei neue Punkte $\hat{l}_j$ und $\hat{r}_j$, $l_j < \hat{l}_j < \hat{r}_j < r_j$ in der Form

$$\hat{l}_j = l_j + (1-a)(r_j - l_j) = a l_j + (1-a) r_j \tag{2.24a}$$
$$\hat{r}_j = l_j + a(r_j - l_j) \qquad = (1-a) l_j + a r_j \tag{2.24b}$$

mit dem Parameter $a \in (\frac{1}{2}, 1)$ berechnet. Es gilt nun folgender Satz:

Satz 2.5 (Zur Intervallschachtelung). *Es sei $l_j < \hat{l}_j < \hat{r}_j < r_j$ und $g(\alpha_k)$ eine stetige strikt unimodale Funktion auf dem Intervall $[l_j, r_j]$. Bezeichnet man mit α_k^* das Minimum auf (l_j, r_j), dann gilt $\alpha_k^* \in [l_j, \hat{r}_j]$, wenn $g(\hat{l}_j) \leq g(\hat{r}_j)$ bzw. $\alpha_k^* \in [\hat{l}_j, r_j]$, wenn $g(\hat{l}_j) \geq g(\hat{r}_j)$.*

Beweis. Man betrachte den Fall $g(\hat{l}_j) \leq g(\hat{r}_j)$. Angenommen, $\alpha_k^* > \hat{r}_j$, dann gilt $\hat{l}_j < \alpha_k^*$. Da $g(\hat{l}_j) \leq g(\hat{r}_j)$ und $g(\alpha_k^*) \leq g(\hat{r}_j)$ ist, muss ein Punkt $\bar{\alpha}_k \in (\hat{l}_j, \alpha_k^*)$ so existieren, dass gilt $g(\bar{\alpha}_k) = \max_{\alpha_k \in [\hat{l}_j, \alpha_k^*]} g(\alpha_k)$, womit $\bar{\alpha}_k$ ein lokales Maximum von $g(\alpha_k)$ im Intervall $[l_j, r_j]$ beschreibt. Die Existenz eines lokalen Maximums ist aber aufgrund der geforderten Unimodalität von $g(\alpha_k)$ nicht möglich. Für $g(\hat{l}_j) \geq g(\hat{r}_j)$ folgt der Beweis auf analoge Art und Weise. □

Gemäß Satz 2.5 wird zum nächsten Iterationsschritt $j+1$ für den Fall $g(\hat{l}_j) \leq g(\hat{r}_j)$ der äußere Punkt r_j verworfen und das Intervall ergibt sich demnach zu $[l_{j+1}, r_{j+1}]$ mit $l_{j+1} = l_j,\ r_{j+1} = \hat{r}_j$, siehe Abbildung 2.3. Für $g(\hat{l}_j) \geq g(\hat{r}_j)$ folgt das Intervall zum Iterationsschritt $j+1$ zu $[l_{j+1}, r_{j+1}]$ mit $l_{j+1} = \hat{l}_j,\ r_{j+1} = r_j$.

Für die weitere Betrachtung nehme man an, dass, wie in Abbildung 2.3 dargestellt, $g(\hat{l}_j) \leq g(\hat{r}_j)$ ist. Die nachfolgenden Schritte lassen sich direkt auf den anderen Fall übertragen. Man führt zunächst eine weitere Iteration zur Berechnung der Zwischenpunkte gemäß (2.24) in der Form

$$\hat{l}_{j+1} = al_{j+1} + (1-a)r_{j+1} = (1-a+a^2)l_j + (1-a)ar_j \tag{2.25a}$$

$$\hat{r}_{j+1} = (1-a)l_{j+1} + ar_{j+1} = (1-a^2)l_j + a^2 r_j \tag{2.25b}$$

durch. Aus einem Koeffizientenvergleich von (2.24a) und (2.25b) folgt, dass $\hat{r}_{j+1} = \hat{l}_j$ genau dann erreicht wird, wenn $a^2 = 1 - a$ gilt, d. h. wenn

$$a = \frac{\sqrt{5}-1}{2} \approx 0.618. \tag{2.26}$$

Diese Wahl von a hat den Vorteil, dass je Iteration nur ein neuer Zwischenpunkt berechnet werden muss. Man beachte, dass die Berechnung jedes Zwischenpunktes mit einer Auswertung der Kostenfunktion $g(\alpha_k)$ verbunden ist. Die Zahl $1/a = 1 + a \approx 1.618$ ist bekannt als die Verhältniszahl des *Goldenen Schnittes*. Tabelle 2.2 fasst den Algorithmus nochmals zusammen.

Abschließend kann der optimale Wert α_k^* entweder aus der *Mittelung* der letzten Intervallgrenzen $\alpha_k^* = (l_j + r_j)/2$ oder aus einer *quadratischen Interpolation* (siehe nachfolgender Abschnitt) zwischen den kleinsten drei Funktionswerten gewonnen werden. Das Intervallschachtelungsverfahren ist ein *einfaches und robustes* Verfahren, das allerdings im Vergleich zu anderen Verfahren meist mehr Iterationen benötigt.

2.3.1.2 Quadratische Interpolation

Eine sehr effiziente Methode zur Lösung des skalaren Optimierungsproblems (2.23) besteht darin, durch drei Punkte eine quadratische Interpolationsfunktion zu legen. Dieser Ansatz wird gelegentlich auch als Newton-Methode bezeichnet. Es wird angenommen, dass die voneinander paarweise verschiedenen Punkte $\alpha_{k,1}$, $\alpha_{k,2}$ und $\alpha_{k,3}$ sowie deren Funktionswerte $g_1 = g(\alpha_{k,1})$, $g_2 = g(\alpha_{k,2})$ und $g_3 = g(\alpha_{k,3})$ bekannt sind. Die quadratische Interpolationsfunktion $q(\alpha_k)$ durch diese Punkte lautet dann

$$q(\alpha_k) = \sum_{i=1}^{3} g_i \frac{\prod_{j \neq i}(\alpha_k - \alpha_{k,j})}{\prod_{j \neq i}(\alpha_{k,i} - \alpha_{k,j})} \tag{2.27}$$

und der optimale Wert α_k^* folgt in der Form

$$\alpha_k^* = \frac{1}{2} \frac{g_1\left(\alpha_{k,2}^2 - \alpha_{k,3}^2\right) + g_2\left(\alpha_{k,3}^2 - \alpha_{k,1}^2\right) + g_3\left(\alpha_{k,1}^2 - \alpha_{k,2}^2\right)}{g_1(\alpha_{k,2} - \alpha_{k,3}) + g_2(\alpha_{k,3} - \alpha_{k,1}) + g_3(\alpha_{k,1} - \alpha_{k,2})} \,. \tag{2.28}$$

Der so errechnete Wert α_k^* sollte als optimale Schrittweite nur akzeptiert werden, wenn die Interpolationsfunktion $q(\alpha_k)$ strikt konvex ist (nur dann ist α_k^* tatsächlich ein Minimum von $q(\alpha_k)$) und wenn die Bedingungen $\alpha_k^* > 0$, $g(\alpha_k^*) \leq g_1$, $g(\alpha_k^*) \leq g_2$, $g(\alpha_k^*) \leq g_3$ und $g(\alpha_k^*) \leq g(0)$ gelten.

Initialisierung: $l_0,\, r_0$ (Startintervall mit Minimum im Inneren)
$j = 0$ (Startindex)
$a = 0.618$ (Goldener Schnitt-Parameter)
ε_{lr} (Schranke für Abbruch)
$\hat{l}_0 \leftarrow al_0 + (1-a)r_0$ (innere Punkte)
$\hat{r}_0 \leftarrow (1-a)l_0 + ar_0$

repeat
  if $g(\hat{l}_j) > g(\hat{r}_j)$
    $l_{j+1} \leftarrow \hat{l}_j$
    $r_{j+1} \leftarrow r_j$
    $\hat{l}_{j+1} \leftarrow \hat{r}_j$
    $\hat{r}_{j+1} \leftarrow (1-a)l_{j+1} + ar_{j+1}$
  else (d. h. $g(\hat{l}_j) \leq g(\hat{r}_j)$)
    $r_{j+1} \leftarrow \hat{r}_j$
    $l_{j+1} \leftarrow l_j$
    $\hat{r}_{j+1} \leftarrow \hat{l}_j$
    $\hat{l}_{j+1} \leftarrow al_{j+1} + (1-a)r_{j+1}$
  end if
  $j \leftarrow j + 1$
until $|r_j - l_j| \leq \varepsilon_{lr}$
$\alpha_k^* = (l_j + r_j)/2$

Tabelle 2.2: Intervallschachtelungsverfahren („Goldener Schnitt“).

Aufgabe 2.4. Zeigen Sie die Gültigkeit von (2.28).

2.3.1.3 Heuristische Wahl der Schrittweite

In der Praxis muss bei der Wahl der Schrittweite häufig ein Kompromiss zwischen numerischem Aufwand und erreichter Genauigkeit in Kauf genommen werden. Ungenauigkeiten treten z. B. auf, wenn ein iterativer Algorithmus zur Bestimmung der optimalen Schrittweite vorzeitig abgebrochen wird. Es gibt nun unterschiedliche *heuristische Abbruchkriterien*, die im Folgenden kurz erläutert werden. Den weiteren Betrachtungen liege das *skalare Optimierungsproblem*, siehe (2.23),

$$\min_{\alpha_k > 0} g(\alpha_k) = f(\mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{s}_k) \tag{2.29}$$

zugrunde.

Armijo-Bedingung: Entwickelt man $g(\alpha_k)$ um $\alpha_k = 0$ in eine Taylorreihe und bricht

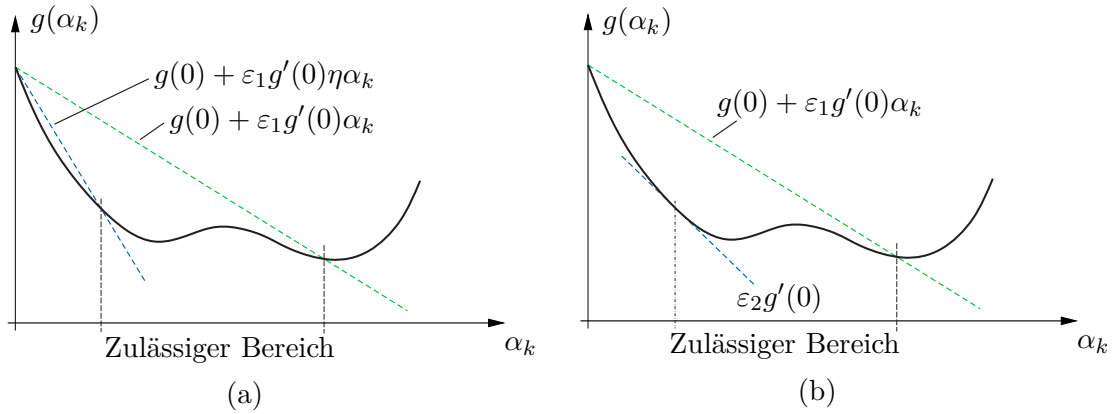


Abbildung 2.4: Veranschaulichung der Armijo- und Wolfe-Bedingung.

nach dem linearen Glied ab, so erhält man

$$g(\alpha_k) \approx g(0) + g'(0)\alpha_k \ . \tag{2.30}$$

Bei der *Armijo-Bedingung* wird nun die Schrittweite α_k so gewählt, dass für ein festes ε_1, $0 < \varepsilon_1 < 1$, die Ungleichung

$$g(\alpha_k) \leq g(0) + \varepsilon_1 g'(0)\alpha_k \tag{2.31}$$

erfüllt ist. Dies garantiert, dass die Schrittweite α_k nach oben hin beschränkt ist. Um sicherzustellen, dass die Schrittweite nicht zu klein wird, führt man einen Parameter $\eta > 1$ ein und fordert zusätzlich, dass die Schrittweite α_k der Ungleichung

$$g(\alpha_k) > g(0) + \varepsilon_1 g'(0)\eta\alpha_k \tag{2.32}$$

genügt. Abbildung 2.4(a) gibt eine grafische Veranschaulichung dieses Sachverhaltes. In der Praxis geht man häufig so vor, dass man in einem ersten Schritt einen (weitgehend beliebigen) Startwert für α_k wählt. Ist für dieses α_k die Ungleichung (2.31) erfüllt, dann erhöht man α_k sukzessive um den Faktor η solange, bis die Ungleichung (2.31) erstmals verletzt wird. Der vorletzte Wert von α_k wird dann als geeignete Schrittweite gewählt. Umgekehrt, wenn der Startwert von α_k die Ungleichung (2.31) nicht erfüllt, dann wird α_k sukzessive durch den Faktor η dividiert, bis erstmals die Ungleichung (2.31) erfüllt ist. Typische Parameterwerte sind $\varepsilon_1 = 0.1$ und $\eta = 2$. Man beachte jedoch, dass bei zu großem ε_1 die Abstiegsbedingung zu restriktiv wird.

Wolfe-Bedingung: Wenn die Ableitungen der Kostenfunktion $g(\alpha_k)$ sehr einfach berechnet werden können, eignet sich als Alternative zur Armijo-Bedingung die so genannte *Wolfe-Bedingung*. Dabei wird ein weiterer Parameter ε_2 mit $0 < \varepsilon_1 < \varepsilon_2 < 1$ eingeführt und von der Schrittweite α_k wird gefordert, dass sie die Ungleichungen (2.31) und

$$g'(\alpha_k) \geq \varepsilon_2 g'(0) \tag{2.33}$$

erfüllt. Abbildung 2.4(b) gibt eine grafische Veranschaulichung dieses Sachverhaltes. Typische Werte für ε_2 sind 0.9, wenn die Suchrichtung $\mathbf{s}_k$ über die Newton-Methode oder die Quasi-Newton-Methode und 0.1, wenn $\mathbf{s}_k$ über die konjugierte Gradientenmethode bestimmt wurde.

2.3.2 Wahl der Suchrichtung

2.3.2.1 Gradientenmethode

Bei der *Gradientenmethode*, sie wird auch *Methode des steilsten Abstiegs* (englisch: *steepest descent method*) genannt, wählt man als Suchrichtung $\mathbf{s}_k$ in (2.21) den *negativen Gradienten* an der Stelle $\mathbf{x}_k$, d. h. die Abstiegsrichtung

$$\mathbf{s}_k = -(\nabla f)(\mathbf{x}_k) \ . \tag{2.34}$$

Wird $g(\alpha_k) = f(\mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{s}_k)$ um den Punkt $\alpha_k = 0$ in eine Taylorreihe mit $\mathbf{s}_k$ gemäß (2.34) entwickelt

$$g(\alpha_k) = f(\mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{s}_k) = f(\mathbf{x}_{k+1}) = f(\mathbf{x}_k) - \alpha_k \|(\nabla f)(\mathbf{x}_k)\|_2^2 + \mathcal{O}\Big(\alpha_k^2\Big) \ , \tag{2.35}$$

wobei $\mathcal{O}(\alpha_k^2)$ den quadratischen Restterm bezeichnet, so zeigt sich, dass für hinreichend kleines α_k die Ungleichungsbedingung (2.13) für $(\nabla f)(\mathbf{x}_k) \neq \mathbf{0}$ erfüllt ist.

Um die Konvergenzeigenschaften der Gradientenmethode näher zu untersuchen, betrachte man das quadratische Minimierungsproblem

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \mathbf{x}^{\mathrm{T}} \mathbf{Q} \mathbf{x} - \mathbf{x}^{\mathrm{T}} \mathbf{b} \tag{2.36}$$

mit der positiv definiten Matrix $\mathbf{Q} \in \mathbb{R}^{n \times n}$. Da die Hessematrix $(\nabla^2 f)(\mathbf{x}) = \mathbf{Q}$ von $f(\mathbf{x})$ positiv definit ist, folgt aus der Eigenschaft (e) konvexer Funktionen von Abschnitt 1.3.5.2 die strikte Konvexität von $f(\mathbf{x})$. Auf Grund der Sätze 2.1 und 2.4 ergibt sich daher das strikte globale Minimum $\mathbf{x}^*$ von $f(\mathbf{x})$ aus der Beziehung

$$(\nabla f)(\mathbf{x}^*) = \mathbf{g}(\mathbf{x}^*) = \mathbf{Q}\mathbf{x}^* - \mathbf{b} = \mathbf{0} \tag{2.37}$$

in der Form

$$\mathbf{x}^* = \mathbf{Q}^{-1} \mathbf{b} \ . \tag{2.38}$$

Die Iterationsvorschrift gemäß Gradientenmethode lautet in diesem Fall, siehe (2.21)

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \alpha_k \mathbf{g}_k \qquad \text{mit} \qquad \mathbf{g}_k = \mathbf{g}(\mathbf{x}_k) = \mathbf{Q}\mathbf{x}_k - \mathbf{b} \ . \tag{2.39}$$

Die optimale Schrittweite α_k^* kann durch explizites Lösen des Optimierungsproblems gemäß (2.23)

$$\min_{\alpha_k > 0} f(\mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{s}_k) = \frac{1}{2} (\mathbf{x}_k - \alpha_k \mathbf{g}_k)^{\mathrm{T}} \mathbf{Q} (\mathbf{x}_k - \alpha_k \mathbf{g}_k) - (\mathbf{x}_k - \alpha_k \mathbf{g}_k)^{\mathrm{T}} \mathbf{b} \tag{2.40}$$

in der Form

$$\alpha_k^* = \frac{\mathbf{g}_k^{\mathrm{T}} \mathbf{g}_k}{\mathbf{g}_k^{\mathrm{T}} \mathbf{Q} \mathbf{g}_k} \tag{2.41}$$

berechnet werden.

Aufgabe 2.5. Zeigen Sie die Gültigkeit von (2.41).

Zusammenfassend lässt sich damit die Gradientenmethode für die quadratische Kostenfunktion (2.36) wie folgt

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \frac{\mathbf{g}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{g}_k}{\mathbf{g}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{Q}\mathbf{g}_k}\mathbf{g}_k \ , \quad \mathbf{g}_k = \mathbf{Q}\mathbf{x}_k - \mathbf{b} \tag{2.42}$$

anschreiben.

Für die weiteren Überlegungen ist es vorteilhaft, anstelle von $f(\mathbf{x})$ die Kostenfunktion

$$F(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}) + \frac{1}{2}(\mathbf{x}^*)^{\mathrm{T}}\mathbf{Q}\mathbf{x}^* = \frac{1}{2}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^*)^{\mathrm{T}}\mathbf{Q}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^*) \tag{2.43}$$

zu betrachten. Da sich die beiden Kostenfunktionen $f(\mathbf{x})$ und $F(\mathbf{x})$ lediglich um eine Konstante unterscheiden, sind ihre Formen und Minima $\mathbf{x}^*$ identisch.

Lemma 2.1 (Zur Konvergenzrate des Gradientenverfahrens)**.** *Mit der Iterationsvorschrift des Gradientenverfahrens* (2.42) *gilt für die Kostenfunktion* $F(\mathbf{x})$ *die Beziehung*

$$F(\mathbf{x}_{k+1}) = \left(1 - \frac{(\mathbf{g}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{g}_k)^2}{\mathbf{g}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{Q}\mathbf{g}_k\mathbf{g}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{g}_k}\right)F(\mathbf{x}_k) \ . \tag{2.44}$$

Beweis. Aus (2.38) und (2.42) erhält man

$$\mathbf{g}_k = \mathbf{Q}\mathbf{x}_k - \mathbf{b} = \mathbf{Q}(\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*). \tag{2.45}$$

Folglich gilt

$$F(\mathbf{x}_k) = \frac{1}{2}\mathbf{g}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{g}_k. \tag{2.46}$$

Aus diesen Beziehungen und der Iterationsvorschrift (2.42) lässt sich nun direkt (2.44) berechnen.

$$\begin{aligned} F(\mathbf{x}_{k+1}) &= \frac{1}{2}\left(\mathbf{x}_k - \frac{\mathbf{g}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{g}_k}{\mathbf{g}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{Q}\mathbf{g}_k}\mathbf{g}_k - \mathbf{x}^*\right)^{\mathrm{T}}\mathbf{Q}\left(\mathbf{x}_k - \frac{\mathbf{g}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{g}_k}{\mathbf{g}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{Q}\mathbf{g}_k}\mathbf{g}_k - \mathbf{x}^*\right) \\ &= \frac{1}{2}(\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*)^{\mathrm{T}}\mathbf{Q}(\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*) - \frac{1}{2}\frac{(\mathbf{g}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{g}_k)^2}{\mathbf{g}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{Q}\mathbf{g}_k} \\ &= \left(1 - \frac{(\mathbf{g}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{g}_k)^2}{\mathbf{g}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{Q}\mathbf{g}_k\mathbf{g}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{g}_k}\right)F(\mathbf{x}_k) \end{aligned} \tag{2.47}$$

□

Um nun die Konvergenzrate der Gradientenmethode für die quadratische Kostenfunktion abschätzen zu können, benötigt man noch folgendes Lemma.

Lemma 2.2 (Ungleichung von Kantorovich). *Es sei* $\mathbf{Q} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ *eine symmetrische positiv definite Matrix. Für jeden Vektor* $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ *mit* $\mathbf{x} \neq \mathbf{0}$ *gilt dann die Ungleichung*

$$\frac{\left(\mathbf{x}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}\right)^2}{(\mathbf{x}^{\mathrm{T}}\mathbf{Q}\mathbf{x})(\mathbf{x}^{\mathrm{T}}\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{x})} \geq \frac{4\lambda_{\min}\lambda_{\max}}{(\lambda_{\min}+\lambda_{\max})^2} \ , \tag{2.48}$$

wobei $\lambda_{\min}$ *und* $\lambda_{\max}$ *den kleinsten und größten (reellen und positiven) Eigenwert der Matrix* $\mathbf{Q}$ *bezeichnen.*

Aufgabe 2.6. Beweisen Sie Lemma 2.2. **Hinweis:** Dieser Beweis ist z. B. in [2.2] skizziert.

Damit lässt sich folgender Satz angeben.

Satz 2.6 (Konvergenz der Gradientenmethode — Quadratische Kostenfunktion). *Für jeden Anfangswert* $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^n$ *konvergiert die Iterationsvorschrift* (2.42) *der Gradientenmethode gegen das eindeutige globale Minimum* $\mathbf{x}^*$ *der Kostenfunktion* $f(\mathbf{x})$ *gemäß* (2.36) *bzw.* $F(\mathbf{x})$ *gemäß* (2.43) linear mit der Konvergenzrate

$$F(\mathbf{x}_{k+1}) \leq \left(\frac{\kappa-1}{\kappa+1}\right)^2 F(\mathbf{x}_k) \ , \tag{2.49}$$

wobei $\kappa = \lambda_{\max}/\lambda_{\min}$ *die* spektrale Konditionszahl *der Matrix* $\mathbf{Q}$*, also das Verhältnis des größten zum kleinsten (reellen und positiven) Eigenwert* $\lambda_{\max}$ *und* $\lambda_{\min}$ *der Matrix* $\mathbf{Q}$*, bezeichnet.*

Beweis. Aus den Lemmas 2.1 und 2.2 folgt unmittelbar

$$F(\mathbf{x}_{k+1}) \leq \left\{1 - \frac{4\lambda_{\min}\lambda_{\max}}{(\lambda_{\min}+\lambda_{\max})^2}\right\} F(\mathbf{x}_k) = \left(\frac{\lambda_{\max}-\lambda_{\min}}{\lambda_{\max}+\lambda_{\min}}\right)^2 F(\mathbf{x}_k) \ . \tag{2.50}$$

□

Satz 2.6 lässt sich nun wie folgt interpretieren. Auf Grund der positiven Definitheit der Matrix $\mathbf{Q}$ sind die Höhenlinien ($f(\mathbf{x}) = \text{konst.}$) der Kostenfunktion (2.36) n-dimensionale Ellipsoide, deren Achsen mit den Richtungen der n paarweise orthogonalen Eigenvektoren der Matrix $\mathbf{Q}$ zusammenfallen und deren Längen invers proportional zum jeweiligen (positiv reellen) Eigenwert sind. Der Gradient $(\nabla f)(\mathbf{x}_k)$ steht orthogonal zur Höhenlinie durch den Punkt $\mathbf{x}_k$, siehe Abbildungen 2.5 und 2.6 für Beispiele mit $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^2$. Wenn die Eigenwerte von $\mathbf{Q}$ in (2.36) alle in der gleichen Größenordnung liegen, weist die Gradientenmethode ein gutes Konvergenzverhalten auf, im Falle von $\lambda_{\min} = \lambda_{\max}$ bzw. $\kappa = 1$ konvergiert das Verfahren sogar in einem einzigen Schritt, siehe Abbildung 2.5. Bei schlecht konditionierten Problemen (κ sehr groß) konvergiert die Gradientenmethode sehr langsam, siehe Abbildung 2.6.

Die Gradientenmethode kann natürlich auch auf nichtquadratische Kostenfunktionen angewandt werden. Für diesen Fall beschreibt der nachfolgende Satz das Konvergenzverhalten

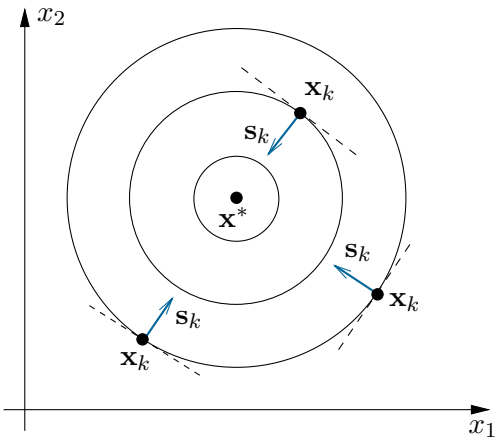


Abb. 2.5: Beispiel eines ideal konditionierten Problems für die Gradientenmethode.

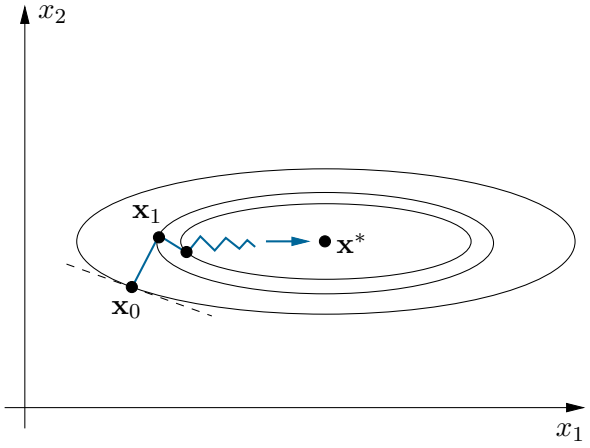


Abb. 2.6: Beispiel eines schlecht konditionierten Problems für die Gradientenmethode.

der Gradientenmethode. Sein Beweis findet sich z. B. in [2.2].

Satz 2.7 (Konvergenz der Gradientenmethode — Allgemeine Kostenfunktion)**.** *Gegeben sei die Kostenfunktion $f \in C^2$ definiert im $\mathbb{R}^n$ mit $\mathbf{x}^*$ als lokales Minimum. Angenommen, die Hessematrix $(\nabla^2 f)(\mathbf{x}^*)$ hat den kleinsten und größten Eigenwert $\lambda_{\min} > 0$ und $\lambda_{\max} > 0$ und die spektrale Konditionszahl $\kappa = \lambda_{\max}/\lambda_{\min}$. Wenn die Folge $\{\mathbf{x}_k\}$ generiert durch die Gradientenmethode*

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \alpha_k (\nabla f)(\mathbf{x}_k) \tag{2.51}$$

für eine geeignete Schrittweite α_k gegen das lokale Minimum $\mathbf{x}^*$ konvergiert, dann konvergiert die Folge $\{f(\mathbf{x}_k)\}$ linear gegen $f(\mathbf{x}^*)$ mit einer Konvergenzrate von maximal $\left(\frac{\kappa-1}{\kappa+1}\right)^2$.

Schlecht konditionierte Problemstellungen bei der Gradientenmethode können mitunter durch eine geeignete *Skalierung* oder *Transformation* verbessert werden. Die Idee beruht darauf, dass die Aufgabe, ein Minimum der Kostenfunktion $f(\mathbf{x})$ zu finden, äquivalent dazu ist, für die Funktion $h(\mathbf{y}) = f(\mathbf{T}\mathbf{y})$ mit $\mathbf{x} = \mathbf{T}\mathbf{y}$ und der regulären Matrix $\mathbf{T} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ ein Minimum zu suchen. Entwickelt man die Funktion $h(\mathbf{y})$ um den optimalen Punkt $\mathbf{y}^* = \mathbf{T}^{-1}\mathbf{x}^*$ in eine Taylorreihe

$$\begin{aligned} h(\mathbf{y}) &= h(\mathbf{y}^*) + (\nabla h)^{\mathrm{T}}(\mathbf{y}^*)(\mathbf{y}-\mathbf{y}^*) + \frac{1}{2}(\mathbf{y}-\mathbf{y}^*)^{\mathrm{T}}\Big(\nabla^2 h\Big)(\mathbf{y}^*)(\mathbf{y}-\mathbf{y}^*) + \dots \\ &= h(\mathbf{y}^*) + (\nabla f)^{\mathrm{T}}(\mathbf{x}^*)\mathbf{T}(\mathbf{y}-\mathbf{y}^*) + \frac{1}{2}(\mathbf{y}-\mathbf{y}^*)^{\mathrm{T}}\mathbf{T}^{\mathrm{T}}\Big(\nabla^2 f\Big)(\mathbf{x}^*)\mathbf{T}(\mathbf{y}-\mathbf{y}^*) + \dots \,, \end{aligned} \tag{2.52}$$

so erkennt man, dass durch geeignete Wahl von $\mathbf{T}$ die Verteilung der Eigenwerte der Hessematrix

$$\Big(\nabla^2 h\Big)(\mathbf{y}^*) = \mathbf{T}^{\mathrm{T}}\Big(\nabla^2 f\Big)(\mathbf{x}^*)\mathbf{T} \tag{2.53}$$

gegenüber der Verteilung der Eigenwerte von $(\nabla^2 f)(\mathbf{x}^*)$ verbessert werden kann. Aus (2.53) folgt, dass mit der idealen Wahl $\mathbf{T} = (\nabla^2 f)^{-\frac{1}{2}}(\mathbf{x}^*)$ für die Hessematrix $(\nabla^2 h)(\mathbf{y}^*) = \mathbf{E}$ mit der Einheitsmatrix $\mathbf{E} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ folgen würde und das Gradientenverfahren bei quadratischen Optimierungsproblemen nach einem Schritt konvergieren würde (vgl. Abbildung 2.5). Praktisch ist diese Vorgehensweise sehr ähnlich zur später beschriebenen Newton-Methode. Sie hat aber den Nachteil, dass die Hessematrix explizit berechnet werden muss. Um diesen Rechenaufwand zu vermeiden, wird alternativ häufig eine Diagonalmatrix $\mathbf{T}$ verwendet, deren Diagonaleinträge beispielsweise in der Form $T_{ii} = \left((\nabla^2 f)_{ii}(\mathbf{x}^*)\right)^{-\frac{1}{2}}$, $i = 1, \ldots, n$ gewählt werden können. Wird eine Diagonalmatrix $\mathbf{T}$ verwendet, so führt dies zu einer reinen Skalierung oder Normierung der Optimierungsvariablen.

Die Vor- und Nachteile der Gradientenmethode lassen sich wie folgt zusammenfassen:

+ einfaches Verfahren
+ Hessematrix $(\nabla^2 f)(\mathbf{x}_k)$ (Berechnungsaufwand $\mathcal{O}(n^2)$) nicht erforderlich, nur der Gradient $(\nabla f)(\mathbf{x}_k)$ (Berechnungsaufwand $\mathcal{O}(n)$) wird benötigt
+ Konvergenz auch für Startwerte, die weiter vom Minimum entfernt sind
– langsame Konvergenz bei schlecht konditionierten und schlecht skalierten Problemen
– lediglich lineare Konvergenzordnung

2.3.2.2 Konjugierte Gradientenmethode

Die konjugierte Gradientenmethode (englisch: *conjugate gradient method* oder kurz *CG method*) versucht nun bei nur geringfügig erhöhtem Rechenaufwand, eine schnellere Konvergenz als die Gradientenmethode zu erreichen. Ursprünglich wurde diese Methode für hochdimensionale quadratische Probleme der Form (siehe auch (2.36))

$$\min_{\mathbf{x}\in\mathbb{R}^n} f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}\mathbf{x}^{\mathrm{T}}\mathbf{Q}\mathbf{x} - \mathbf{x}^{\mathrm{T}}\mathbf{b} \tag{2.54}$$

mit der positiv definiten Matrix $\mathbf{Q} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ entwickelt. Bevor nun die Methode genauer erläutert wird, sollen einige Grundlagen dazu erarbeitet werden.

Definition 2.2 (**Q**-Orthogonalität)**.** Zwei Vektoren $\mathbf{d}_1$ und $\mathbf{d}_2$ heißen *konjugiert bezüglich einer positiv definiten Matrix* $\mathbf{Q}$ bzw. $\mathbf{Q}$*-orthogonal*, wenn gilt $\mathbf{d}_1^{\mathrm{T}}\mathbf{Q}\mathbf{d}_2 = 0$.

Für $\mathbf{Q} = \mathbf{E}$ fällt der Begriff der $\mathbf{Q}$-Orthogonalität mit dem klassischen Begriff der Orthogonalität zusammenfällt. Eine Menge von Vektoren $\mathbf{d}_0, \mathbf{d}_1, \ldots, \mathbf{d}_r$ ist $\mathbf{Q}$-orthogonal, wenn $\mathbf{d}_i^{\mathrm{T}}\mathbf{Q}\mathbf{d}_j = 0$ für alle $i \neq j$. Es gilt nun folgendes Lemma.

Lemma 2.3 (**Q**-Orthogonalität positiv definiter Matrizen)**.** *Wenn die Matrix* $\mathbf{Q}$ *positiv definit ist und eine Menge von nichttrivialen Vektoren* $\mathbf{d}_0, \mathbf{d}_1, \ldots, \mathbf{d}_r$ $\mathbf{Q}$*-orthogonal ist, dann sind die Vektoren* $\mathbf{d}_j$, $j = 0, \ldots, r$ *linear unabhängig.*

Aufgabe 2.7. Beweisen Sie das Lemma 2.3.

Für das Folgende sei angenommen, dass $\mathbf{d}_0, \mathbf{d}_1, \ldots, \mathbf{d}_{n-1}$ nichttriviale $\mathbf{Q}$-orthogonale Vektoren der Matrix $\mathbf{Q}$ der Kostenfunktion des Optimierungsproblems (2.54) sind. Nach

Lemma 2.3 sind die n Vektoren linear unabhängig und spannen daher den $\mathbb{R}^n$ auf. Die optimale Lösung $\mathbf{x}^*$ des Optimierungsproblems (2.54) lässt sich somit als Linearkombination der $\mathbf{Q}$-orthogonalen Vektoren in der Form

$$\mathbf{x}^* = \underbrace{\begin{bmatrix}\mathbf{d}_0 & \mathbf{d}_1 & \dots & \mathbf{d}_{n-1}\end{bmatrix}}_{=\mathbf{D}} \boldsymbol{\eta} \tag{2.55}$$

mit $\boldsymbol{\eta} \in \mathbb{R}^n$ darstellen. Alternativ zur direkten Berechnung von $\boldsymbol{\eta}$ aus (2.55) erhält man mit $\mathbf{Q}\mathbf{x}^* = \mathbf{b}$ aus (2.37) durch linksseitige Multiplikation von (2.55) mit $\mathbf{D}^{\mathrm{T}}\mathbf{Q}$

$$\mathbf{D}^{\mathrm{T}}\mathbf{Q}\mathbf{x}^* = \mathbf{D}^{\mathrm{T}}\mathbf{b} = \mathbf{D}^{\mathrm{T}}\mathbf{Q}\mathbf{D}\boldsymbol{\eta}. \tag{2.56}$$

Der sich daraus ergebende Wert für $\boldsymbol{\eta}$ wird wieder in (2.55) eingesetzt und man erhält für die optimale Lösung

$$\mathbf{x}^* = \mathbf{D}\underbrace{(\mathbf{D}^{\mathrm{T}}\mathbf{Q}\mathbf{D})^{-1}\mathbf{D}^{\mathrm{T}}\mathbf{b}}_{=\boldsymbol{\eta}} = \sum_{i=0}^{n-1}\mathbf{d}_i \underbrace{\frac{\mathbf{d}_i^{\mathrm{T}}\mathbf{b}}{\mathbf{d}_i^{\mathrm{T}}\mathbf{Q}\mathbf{d}_i}}_{=\eta_i}, \tag{2.57}$$

wobei hier die $\mathbf{Q}$-Orthogonalität der Vektoren $\mathbf{d}_j$ (Diagonalität der Matrix $\mathbf{D}^{\mathrm{T}}\mathbf{Q}\mathbf{D}$) ausgenützt wurde. Diese Darstellung bildet auch die Grundlage für den nächsten Satz.

Satz 2.8 (Konjugierte Richtung). *Die Vektoren $\mathbf{d}_0, \mathbf{d}_1, \dots, \mathbf{d}_{n-1}$ seien nichttriviale $\mathbf{Q}$-orthogonale Vektoren der Matrix $\mathbf{Q}$ der Kostenfunktion des Optimierungsproblems (2.54). Für jeden Anfangswert $\mathbf{x}_0$ konvergiert die Folge*

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_k\mathbf{d}_k, \quad \alpha_k = -\frac{\mathbf{g}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{d}_k}{\mathbf{d}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{Q}\mathbf{d}_k}, \quad \mathbf{g}_k = \mathbf{Q}\mathbf{x}_k - \mathbf{b} \tag{2.58}$$

nach spätestens n Iterationsschritten gegen die eindeutige optimale Lösung $\mathbf{x}^*$, d. h. $\mathbf{x}_n = \mathbf{x}^*$.

Beweis. Nach Lemma 2.3 sind die Vektoren $\mathbf{d}_0, \mathbf{d}_1, \dots, \mathbf{d}_{n-1}$ linear unabhängig. Folglich existieren geeignete Skalare α_j so, dass

$$\mathbf{x}^* - \mathbf{x}_0 = \alpha_0\mathbf{d}_0 + \alpha_1\mathbf{d}_1 + \ldots + \alpha_{n-1}\mathbf{d}_{n-1} \tag{2.59}$$

gilt. Wird (2.59) linksseitig mit $\mathbf{d}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{Q}$ multipliziert, so ergibt sich

$$\alpha_k = \frac{\mathbf{d}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{Q}(\mathbf{x}^* - \mathbf{x}_0)}{\mathbf{d}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{Q}\mathbf{d}_k}. \tag{2.60}$$

Aus (2.58) folgt durch rekursives Einsetzen

$$\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_0 = \alpha_0\mathbf{d}_0 + \alpha_1\mathbf{d}_1 + \ldots + \alpha_{k-1}\mathbf{d}_{k-1} \tag{2.61}$$

und auf Grund der $\mathbf{Q}$-Orthogonalität der Vektoren $\mathbf{d}_j$ gilt

$$\mathbf{d}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{Q}(\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_0) = 0 \ . \tag{2.62}$$

Einsetzen von (2.62) in (2.60) liefert unmittelbar das Ergebnis (2.58)

$$\alpha_k = \frac{\mathbf{d}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{Q}(\mathbf{x}^* - \mathbf{x}_k)}{\mathbf{d}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{Q}\mathbf{d}_k} = -\frac{\mathbf{d}_k^{\mathrm{T}}(\mathbf{Q}\mathbf{x}_k - \mathbf{b})}{\mathbf{d}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{Q}\mathbf{d}_k} = -\frac{\mathbf{d}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{g}_k}{\mathbf{d}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{Q}\mathbf{d}_k} \ . \tag{2.63}$$

Folglich sind nach spätestens n Iterationsschritten alle benötigten Koeffizienten $\alpha_0, \ldots, \alpha_{n-1}$ berechnet. □

Es ist zu beachten, dass, anders als es die Bezeichnung *konjugierte Gradientenmethode* erwarten lässt, nicht die lokalen Gradienten $\mathbf{g}_k$ der Kostenfunktion $\mathbf{Q}$-orthogonal im Sinne der Definition 2.2 sind, sondern die als Suchrichtungen dienenden Vektoren $\mathbf{d}_k$. Eine noch zu klärende Frage ist, wie die Vektoren $\mathbf{d}_k$ festgelegt werden. Im ersten Iterationsschritt wird bei der konjugierten Gradientenmethode der Wert $\mathbf{d}_0 = -\mathbf{g}_0$ verwendet, d. h. es wird ein reiner Gradientenschritt ausgeführt. Die Vektoren $\mathbf{d}_{k+1}$ mit $k \geq 0$ werden dann iterativ als Linearkombination der jeweiligen Richtung des steilsten Abstieges (negativer Gradient) und dem vorangegangenen Vektor $\mathbf{d}_k$ festgelegt, d. h. in der Form

$$\mathbf{d}_{k+1} = -\mathbf{g}_{k+1} + \beta_k \mathbf{d}_k \tag{2.64}$$

mit $\mathbf{g}_{k+1}$ gemäß (2.58) und dem noch zu bestimmenden Skalar β_k. Er wird genau so gewählt, dass $\mathbf{d}_{k+1}$ $\mathbf{Q}$-orthogonal zu $\mathbf{d}_k$ ist, also $\mathbf{d}_{k+1}^{\mathrm{T}}\mathbf{Q}\mathbf{d}_k = 0$ gilt. Wird dazu (2.64) linksseitig mit $\mathbf{d}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{Q}$ multipliziert, so ergibt sich

$$\beta_k = \frac{\mathbf{g}_{k+1}^{\mathrm{T}}\mathbf{Q}\mathbf{d}_k}{\mathbf{d}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{Q}\mathbf{d}_k} \ . \tag{2.65}$$

Zusammengefasst ergibt sich daraus folgender Satz für die konjugierte Gradientenmethode.

Satz 2.9 (Konjugierte Gradientenmethode)**.** *Für jeden Anfangswert $\mathbf{x}_0$ konvergiert die Folge*

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{d}_k \tag{2.66a}$$

$$\alpha_k = -\frac{\mathbf{d}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{g}_k}{\mathbf{d}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{Q}\mathbf{d}_k} \tag{2.66b}$$

$$\mathbf{d}_{k+1} = -\mathbf{g}_{k+1} + \beta_k \mathbf{d}_k \tag{2.66c}$$

$$\beta_k = \frac{\mathbf{g}_{k+1}^{\mathrm{T}}\mathbf{Q}\mathbf{d}_k}{\mathbf{d}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{Q}\mathbf{d}_k} \tag{2.66d}$$

mit $\mathbf{g}_k = \mathbf{Q}\mathbf{x}_k - \mathbf{b}$ und $\mathbf{d}_0 = -\mathbf{g}_0 = \mathbf{b} - \mathbf{Q}\mathbf{x}_0$ in höchstens n Iterationsschritten gegen die eindeutige optimale Lösung $\mathbf{x}^*$ des Optimierungsproblems (2.54).

Beweisskizze: Die Beziehungen (2.66a) und (2.66b) und die Konvergenzaussage wurden bereits im Beweis von Satz 2.8 hergeleitet. Es verbleibt also zu zeigen, dass mit der Iterationsvorschrift (2.66c) und (2.66d) eine Folge von $\mathbf{Q}$-orthogonalen Vektoren $\mathbf{d}_k$ konstruiert wird.

Vorbereitend betrachte man die linearen Unterräume $\mathcal{B}_k = \text{span}\{\mathbf{d}_0, \mathbf{d}_1, \ldots, \mathbf{d}_{k-1}\}$ mit $\mathbf{Q}$-orthogonalen Vektoren $\mathbf{d}_j$, $j = 0, 1, \ldots, k-1$. Es wird nun mit Hilfe der vollständigen Induktion gezeigt, dass der Gradient $\mathbf{g}_k$ zu einem beliebigen Iterationsschritt k orthogonal auf den Unterraum $\mathcal{B}_k$ steht, d. h. $\mathbf{g}_k \perp \mathcal{B}_k$. Da $\mathcal{B}_0 = \{\ \}$, ist diese Aussage trivialerweise für $k = 0$ (Induktionsbeginn) erfüllt. Basierend auf der Induktionsannahme, dass $\mathbf{g}_k \perp \mathcal{B}_k$ gilt, soll im nächsten Schritt gezeigt werden, dass auch $\mathbf{g}_{k+1} \perp \mathcal{B}_{k+1}$ erfüllt ist. Aus (2.58) und (2.66a) folgt

$$\mathbf{g}_{k+1} = \mathbf{Q}\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{b} = \mathbf{Q}\mathbf{x}_k - \mathbf{b} + \alpha_k \mathbf{Q}\mathbf{d}_k = \mathbf{g}_k + \alpha_k \mathbf{Q}\mathbf{d}_k \tag{2.67}$$

und damit gilt wegen der Definition von α_k gemäß (2.66b)

$$\mathbf{d}_k^{\mathrm{T}} \mathbf{g}_{k+1} = \mathbf{d}_k^{\mathrm{T}} \mathbf{g}_k + \alpha_k \mathbf{d}_k^{\mathrm{T}} \mathbf{Q}\mathbf{d}_k = 0\ . \tag{2.68}$$

Basierend auf diesem Ergebnis und der $\mathbf{Q}$-Orthogonalität der Vektoren $\mathbf{d}_j$ kann nun rekursiv für $j = k-1$, $j = k-2$, $\ldots$, $j = 0$

$$\mathbf{d}_j^{\mathrm{T}} \mathbf{g}_{k+1} = \mathbf{d}_j^{\mathrm{T}} \mathbf{g}_k + \alpha_k \mathbf{d}_j^{\mathrm{T}} \mathbf{Q}\mathbf{d}_k = 0 \tag{2.69}$$

gezeigt werden, womit $\mathbf{g}_{k+1} \perp \mathcal{B}_{k+1}$ bewiesen ist.

Nun kann wieder mit Hilfe der vollständigen Induktion gezeigt werden, dass die Iterationsvorschrift (2.66c) und (2.66d) eine Folge von $\mathbf{Q}$-orthogonalen Vektoren $\mathbf{d}_k$ liefert. Zunächst folgt für $k = 0$ (Induktionsbeginn) die $\mathbf{Q}$-Orthogonalität der Vektoren $\mathbf{d}_0$ und $\mathbf{d}_1$ aus

$$\mathbf{d}_0^{\mathrm{T}} \mathbf{Q}\mathbf{d}_1 = -\mathbf{d}_0^{\mathrm{T}} \mathbf{Q}\mathbf{g}_1 + \frac{\mathbf{g}_1^{\mathrm{T}} \mathbf{Q}\mathbf{d}_0}{\mathbf{d}_0^{\mathrm{T}} \mathbf{Q}\mathbf{d}_0} \mathbf{d}_0^{\mathrm{T}} \mathbf{Q}\mathbf{d}_0 = 0\ , \tag{2.70}$$

wobei hier (2.66c) und (2.66d) mit $k = 0$ eingesetzt wurden. Unter der Induktionsannahme, dass $\mathbf{d}_k$ $\mathbf{Q}$-orthogonal zu allen Vektoren $\mathbf{d}_0, \mathbf{d}_1, \ldots, \mathbf{d}_{k-1}$ ist, wird nun gezeigt, dass $\mathbf{d}_{k+1}$ $\mathbf{Q}$-orthogonal zu allen Vektoren $\mathbf{d}_0, \mathbf{d}_1, \ldots, \mathbf{d}_k$ ist. Der Skalar β_k wird mit (2.66d) genau so gewählt, dass $\mathbf{d}_{k+1}$ $\mathbf{Q}$-orthogonal zu $\mathbf{d}_k$ ist. Wird (2.66c) linksseitig mit $\mathbf{d}_j^{\mathrm{T}}\mathbf{Q}$ multipliziert, so ergibt sich für alle $j = 0, 1, \ldots, k-1$

$$\mathbf{d}_j^{\mathrm{T}} \mathbf{Q}\mathbf{d}_{k+1} = -\mathbf{d}_j^{\mathrm{T}} \mathbf{Q}\mathbf{g}_{k+1} + \beta_k \mathbf{d}_j^{\mathrm{T}} \mathbf{Q}\mathbf{d}_k = 0\ . \tag{2.71}$$

Hierbei wurden die oben bewiesene Orthogonalität $\mathbf{g}_{k+1} \perp \mathcal{B}_{k+1}$ und die Induktionsannahme ($\mathbf{d}_k$ ist $\mathbf{Q}$-orthogonal zu allen Vektoren $\mathbf{d}_0, \mathbf{d}_1, \ldots, \mathbf{d}_{k-1}$) ausgenützt. □

Die Iterationsschritte der konjugierten Gradientenmethode können geometrisch so interpretiert werden, dass $\mathbf{x}_k$ die Kostenfunktion $f(\mathbf{x})$ jeweils im affinen Unterraum

$\mathbf{x}_0 + \mathcal{B}_k$ minimiert. Um dies zu sehen wird die aus (2.61) folgende Beziehung

$$\mathbf{x}_k = \mathbf{x}_0 + \underbrace{\begin{bmatrix}\mathbf{d}_0 & \mathbf{d}_1 & \dots & \mathbf{d}_{k-1}\end{bmatrix}}_{=\mathbf{D}_k} \underbrace{\begin{bmatrix}\alpha_0 \\ \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_{k-1}\end{bmatrix}}_{=\boldsymbol{\alpha}_k} \tag{2.72}$$

in das Optimierungsproblem (2.54) eingesetzt. Dies führt auf die quadratische Kostenfunktion

$$\begin{aligned}&\frac{1}{2}(\mathbf{x}_0 + \mathbf{D}_k\boldsymbol{\alpha}_k)^{\mathrm{T}}\mathbf{Q}(\mathbf{x}_0 + \mathbf{D}_k\boldsymbol{\alpha}_k) - (\mathbf{x}_0 + \mathbf{D}_k\boldsymbol{\alpha}_k)^{\mathrm{T}}\mathbf{b} \\ &= \frac{1}{2}\boldsymbol{\alpha}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{D}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{Q}\mathbf{D}_k\boldsymbol{\alpha}_k - \boldsymbol{\alpha}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{D}_k^{\mathrm{T}}(\mathbf{b} - \mathbf{Q}\mathbf{x}_0) + \frac{1}{2}\mathbf{x}_0^{\mathrm{T}}\mathbf{Q}\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}_0^{\mathrm{T}}\mathbf{b}\ ,\end{aligned} \tag{2.73}$$

deren Optimum sich in der Form

$$\boldsymbol{\alpha}_k = (\mathbf{D}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{Q}\mathbf{D}_k)^{-1}\mathbf{D}_k^{\mathrm{T}}(\mathbf{b} - \mathbf{Q}\mathbf{x}_0) \tag{2.74}$$

ergibt. Einsetzen der aus (2.58) und (2.62) folgenden Identitäten $\mathbf{b} = \mathbf{Q}\mathbf{x}_j - \mathbf{g}_j$ und $\mathbf{d}_j^{\mathrm{T}}\mathbf{Q}(\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_0) = 0$ für $j = 0, \dots, k-1$ liefert

$$\boldsymbol{\alpha}_k = -(\mathbf{D}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{Q}\mathbf{D}_k)^{-1}\begin{bmatrix}\mathbf{d}_0^{\mathrm{T}}\mathbf{g}_0 \\ \mathbf{d}_1^{\mathrm{T}}\mathbf{g}_1 \\ \vdots \\ \mathbf{d}_{k-1}^{\mathrm{T}}\mathbf{g}_{k-1}\end{bmatrix}. \tag{2.75}$$

Dies entspricht genau der Berechnungsvorschrift (2.66b), womit gezeigt ist, dass $\mathbf{x}_k$ bei der konjugierten Gradientenmethode jeweils das Minimum der Kostenfunktion $f(\mathbf{x})$ im affinen Unterraum $\mathbf{x}_0 + \mathcal{B}_k$ darstellt.

Für viele praktische Fragestellungen zeigt die sogenannte *partielle konjugierte Gradientenmethode* Vorteile im Vergleich zum Basisalgorithmus gemäß Satz 2.9. Bei der partiellen konjugierten Gradientenmethode wird dieser Basisalgorithmus lediglich für $m + 1 < n$ Iterationsschritte ausgeführt ehe das Verfahren mit dem so erhaltenen Punkt als Anfangslösung neu gestartet wird. Bei jedem Aufruf des Verfahrens werden $m + 1$ Iterationen durchgeführt. In diesem Zusammenhang kann folgender Satz angegeben werden, welcher z. B. in [2.2] bewiesen wird.

Satz 2.10 (Partielle konjugierte Gradientenmethode)**.** *Gegeben ist das Optimierungsproblem (2.54) mit der Kostenfunktion $f(\mathbf{x})$ oder äquivalent dazu mit der Kostenfunktion $F(\mathbf{x})$ gemäß (2.43). Wenn nun die positiv definite Matrix $\mathbf{Q}$ $n-m$ Eigenwerte im Intervall $[l, r]$ $(l > 0)$ und m Eigenwerte größer als r besitzt, dann zeigt die partielle konjugierte Gradientenmethode, welche alle $m + 1$ Schritte neu gestartet wird, das*

Konvergenzverhalten

$$F(\mathbf{x}_{k+1}) \leq \left(\frac{r-l}{r+l}\right)^2 F(\mathbf{x}_k) \ . \tag{2.76}$$

Man beachte, dass der Punkt $\mathbf{x}_{k+1}$ durch $(m+1)$-fache Zwischeniteration nach Satz 2.9 mit dem Anfangswert $\mathbf{x}_k$ entsteht. Satz 2.10 zeigt, dass durch Anwendung der partiellen konjugierten Gradientenmethode das schlechte Konvergenzverhalten der Gradientenmethode bei schlecht konditionierten Systemen (vergleiche dazu Satz 2.7) umgangen werden kann.

Für *nichtquadratische Kostenfunktionen* $f(\mathbf{x})$ müssen in Satz 2.9 lediglich die Substitutionen

$$\mathbf{g}_k \leftrightarrow (\nabla f)(\mathbf{x}_k) \quad \text{und} \quad \mathbf{Q} \leftrightarrow \left(\nabla^2 f\right)(\mathbf{x}_k) \tag{2.77}$$

vorgenommen werden. An dieser Stelle ist jedoch zu erwähnen, dass der Algorithmus im Allgemeinen nicht wie im quadratischen Fall in n Schritten terminieren wird. Um die aufwändige Berechnung der Hessematrix $(\nabla^2 f)(\mathbf{x}_k)$ zu vermeiden, kann die Bestimmung von α_k in (2.66b) nach Satz 2.9 über ein Verfahren aus Abschnitt 2.3.1 erfolgen und β_k in (2.66d) wird beispielsweise durch die sogenannte *Formel von Fletcher-Reeves*

$$\beta_k = \frac{\mathbf{g}_{k+1}^{\mathrm{T}} \mathbf{g}_{k+1}}{\mathbf{g}_k^{\mathrm{T}} \mathbf{g}_k} \tag{2.78}$$

ersetzt.

Die Vor- und Nachteile der Konjugierten Gradientenmethode können wie folgt zusammengefasst werden:

+ einfaches Verfahren, geringer Rechenaufwand und Speicherbedarf, geeignet für große Optimierungsprobleme
+ nur der Gradient $(\nabla f)(\mathbf{x}_k)$ (Berechnungsaufwand $\mathcal{O}(n)$) wird benötigt
+ konvergiert bei quadratischen Optimierungsproblemen nach spätestens n Iterationsschritten
– Konvergenzverhalten variiert je nach Problemstellung, Konvergenzverhalten besser als jenes der Gradientenmethode

2.3.2.3 Newton-Methode

Die Idee der Newton-Methode besteht darin, die allgemeine Kostenfunktion $f(\mathbf{x})$ lokal durch eine quadratische Funktion zu approximieren und diese zu minimieren. Entwickelt man $f(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}_k + \mathbf{s}_k)$ um den Iterationspunkt $\mathbf{x}_k$ in eine Taylorreihe und bricht diese nach dem quadratischen Term ab, so erhält man

$$f(\mathbf{x}) \approx f(\mathbf{x}_k) + \mathbf{s}_k^{\mathrm{T}} (\nabla f)(\mathbf{x}_k) + \frac{1}{2} \mathbf{s}_k^{\mathrm{T}} \left(\nabla^2 f\right)(\mathbf{x}_k) \mathbf{s}_k \ , \tag{2.79}$$

siehe Abbildung 2.7. Die so genannte *Newton-Richtung* $\mathbf{s}_k$ ergibt sich unmittelbar durch Minimierung der rechten Seite von (2.79) bezüglich $\mathbf{s}_k$ in der Form

$$\mathbf{s}_k = -\left(\nabla^2 f\right)^{-1}(\mathbf{x}_k)(\nabla f)(\mathbf{x}_k) \ . \tag{2.80}$$

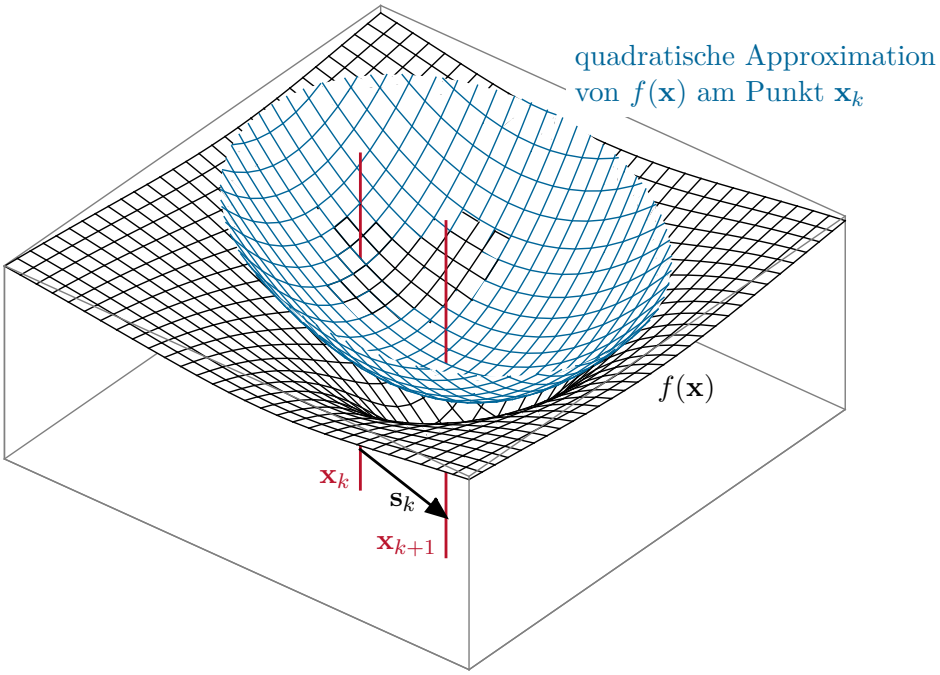


Abbildung 2.7: Lokale quadratische Approximation der Kostenfunktion im Zuge der Newton-Iteration (bei Schrittweite $\alpha_k = 1$).

Falls die Hessematrix $(\nabla^2 f)(\mathbf{x}^*)$ am Minimum positiv definit ist, existiert in einer Umgebung um das Minimum die Inverse $(\nabla^2 f)^{-1}(\mathbf{x}_k)$ und die Methode ist wohldefiniert. Man beachte, dass die Berechnung von $\mathbf{s}_k$ gemäß (2.80) keine tatsächliche Inversion von $(\nabla^2 f)(\mathbf{x}_k)$ erfordert. Der nachfolgende Satz gibt die Konvergenzordnung der Newton-Methode an. Sein Beweis ist z. B. in [2.2–2.4] zu finden.

Satz 2.11 (Konvergenzordnung der Newton-Methode)**.** *Gegeben sei die Kostenfunktion $f \in C^3$ definiert im $\mathbb{R}^n$ mit dem lokalen Minimum $\mathbf{x}^*$. Wenn die Hessematrix $(\nabla^2 f)(\mathbf{x}^*)$ positiv definit ist und der Anfangswert $\mathbf{x}_0$ in einer hinreichend nahen Umgebung des Minimums liegt, dann konvergiert die* Newton-Iteration

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \Big(\nabla^2 f\Big)^{-1}(\mathbf{x}_k)(\nabla f)(\mathbf{x}_k) \tag{2.81}$$

mit der Konvergenzordnung 2 *gegen das Minimum $\mathbf{x}^*$.*

Für die praktische Anwendung der Methode führt man noch eine geeignete Schrittweite α_k ein, so dass die Iterationsvorschrift

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \alpha_k\Big(\nabla^2 f\Big)^{-1}(\mathbf{x}_k)(\nabla f)(\mathbf{x}_k) \tag{2.82}$$

lautet und die Abstiegsbedingung (2.22) erfüllt ist. Das Verfahren wird dann häufig *gedämpfte Newton-Methode* genannt und α_k wird als *Dämpfungsparameter* bezeichnet. Gelegentlich wird die Einschränkung $\alpha_k \leq 1$ verwendet. Es ist zu erwarten, dass in der

Nähe des Minimums die optimale Schrittweite $\alpha_k \approx 1$ ist, weshalb man typischerweise eine iterative Schrittweitensuche mit dem Wert $\alpha_k = 1$ beginnt. Strategien zur Berechnung der Schrittweite α_k wurden bereits im Abschnitt 2.3.1 erläutert.

Ein Problem, das in diesem Zusammenhang gelegentlich auftritt, besteht im Verlust der positiven Definitheit von $(\nabla^2 f)(\mathbf{x}_k)$, wenn $\mathbf{x}_k$ zu weit vom Minimum entfernt ist. Dann besitzt die rechte Seite von (2.79) kein oder kein eindeutiges Minimum und die Invertierbarkeit von $(\nabla^2 f)(\mathbf{x}_k)$ kann verloren gehen. Ist $(\nabla^2 f)(\mathbf{x}_k)$ nicht positiv definit, so kann statt (2.82) die Iterationsvorschrift

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \alpha_k \mathbf{M}_k (\nabla f)(\mathbf{x}_k) \ , \quad \mathbf{M}_k = \Big(\big(\nabla^2 f\big)(\mathbf{x}_k) + \varepsilon_k \mathbf{E} \Big)^{-1} \tag{2.83}$$

mit einem geeigneten positiven Parameter ε_k verwendet werden. Die Iterationsvorschrift (2.83) geht für $\varepsilon_k = 0$ in die Newton-Methode gemäß (2.81) und für sehr große ε_k in die Gradientenmethode gemäß (2.51) über. Eine geeignete Wahl von ε_k erweist sich jedoch als nicht sehr einfach. Typischerweise wird ε_k beginnend bei einem Startwert $\varepsilon_k > 0$ sukzessive erhöht, bis die Matrix $(\nabla^2 f)(\mathbf{x}_k) + \varepsilon_k \mathbf{E}$ positiv definit ist.

Aufgabe 2.8. Zeigen Sie, dass die Newton-Methode für quadratische Kostenfunktionen

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \ \frac{1}{2} \mathbf{x}^{\mathrm{T}} \mathbf{Q} \mathbf{x} - \mathbf{b}^{\mathrm{T}} \mathbf{x} \tag{2.84}$$

mit der positiv definiten Matrix $\mathbf{Q}$ unabhängig vom Startpunkt $\mathbf{x}_0$ innerhalb von nur einem Iterationsschritt konvergiert.

Die Vor- und Nachteile der Newton-Methode können wie folgt zusammengefasst werden:

+ Konvergenzordnung von 2, wenn die Hessematrix $(\nabla^2 f)(\mathbf{x}_k)$ positiv definit ist, was zumindest in der Nähe des Minimums $\mathbf{x}^*$ der Fall ist
+ Konvergenzverhalten besser als jenes der konjugierten Gradientenmethode
– außerhalb einer hinreichend kleinen Umgebung um das Minimum ist $(\nabla^2 f)(\mathbf{x}_k)$ im Allgemeinen nicht positiv definit
– Berechnungsaufwand $\mathcal{O}(n^2)$ für die benötigte Hessematrix $(\nabla^2 f)(\mathbf{x}_k)$, Berechnungsaufwand $\mathcal{O}(n^3)$ für die Suchrichtung $\mathbf{s}_k$

2.3.2.4 Quasi-Newton-Methode

Einer der Hauptnachteile der Newton-Methode liegt in der aufwändigen Berechnung der Hessematrix $(\nabla^2 f)(\mathbf{x}_k)$. Aus diesem Grund versucht man bei der Quasi-Newton-Methode die *inverse* Hessematrix iterativ zu bestimmen. Für das Weitere sei angenommen, dass die Kostenfunktion $f \in C^2$ ist und für die Punkte $\mathbf{x}_{k+1}$ und $\mathbf{x}_k$ gilt $\mathbf{g}_{k+1} = (\nabla f)(\mathbf{x}_{k+1})$ und $\mathbf{g}_k = (\nabla f)(\mathbf{x}_k)$. Aus einer Taylorreihenentwicklung folgt die Näherung

$$\mathbf{g}_{k+1} - \mathbf{g}_k \approx \big(\nabla^2 f\big)(\mathbf{x}_k) \mathbf{p}_k \tag{2.85}$$

mit $\mathbf{p}_k = \mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k$. Nimmt man nun an, dass die Hessematrix $(\nabla^2 f)(\mathbf{x}_k) = \mathbf{K}$ konstant ist, dann gilt

$$\mathbf{q}_k = \mathbf{g}_{k+1} - \mathbf{g}_k = \mathbf{K} \mathbf{p}_k \ . \tag{2.86}$$

Wenn n linear unabhängige Vektoren $\mathbf{p}_0, \mathbf{p}_1, \ldots, \mathbf{p}_{n-1}$ mit den zugehörigen $\mathbf{q}_0, \mathbf{q}_1, \ldots, \mathbf{q}_{n-1}$ zur Verfügung stehen, dann lässt sich die Hessematrix in der Form

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} \mathbf{q}_0 & \mathbf{q}_1 & \ldots & \mathbf{q}_{n-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{p}_0 & \mathbf{p}_1 & \ldots & \mathbf{p}_{n-1} \end{bmatrix}^{-1} \tag{2.87}$$

berechnen. Das Ziel ist es nun, unter der Annahme einer konstanten Hessematrix $\mathbf{K}$ in n Iterationsschritten die inverse Hessematrix $\mathbf{K}^{-1}$ iterativ in der Form

$$\mathbf{H}_{k+1}\mathbf{q}_j = \mathbf{p}_j, \quad j = 0, \ldots, k \tag{2.88}$$

zu konstruieren, dass $\mathbf{H}_n = \mathbf{K}^{-1}$ gilt. Diese iterative Konstruktion kann auf unterschiedliche Art und Weise erfolgen. Eine mögliche Variante wird im Folgenden beschrieben. Da die Hessematrix und ihre Inverse symmetrisch sind, ist es naheliegend, auch eine symmetrische Matrix für die Rekursion

$$\mathbf{H}_{k+1} = \mathbf{H}_k + \gamma_k \mathbf{z}_k \mathbf{z}_k^{\mathrm{T}} \tag{2.89}$$

anzusetzen. Das dyadische Produkt $\mathbf{z}_k\mathbf{z}_k^{\mathrm{T}}$ erhält die Symmetrie und hat höchstens den Rang 1, weshalb diese Korrektur auch als *Rang 1 Korrektur* bezeichnet wird. Setzt man (2.89) in (2.88) ein, so erhält man für $j = k$

$$\mathbf{p}_k = \mathbf{H}_{k+1}\mathbf{q}_k = \mathbf{H}_k\mathbf{q}_k + \gamma_k \mathbf{z}_k \mathbf{z}_k^{\mathrm{T}} \mathbf{q}_k \ . \tag{2.90}$$

Mit

$$(\mathbf{p}_k - \mathbf{H}_k\mathbf{q}_k)(\mathbf{p}_k - \mathbf{H}_k\mathbf{q}_k)^{\mathrm{T}} = \gamma_k^2 \mathbf{z}_k \mathbf{z}_k^{\mathrm{T}} \mathbf{q}_k \Big(\mathbf{z}_k \mathbf{z}_k^{\mathrm{T}} \mathbf{q}_k \Big)^{\mathrm{T}} = \gamma_k^2 \mathbf{z}_k \underbrace{\mathbf{z}_k^{\mathrm{T}} \mathbf{q}_k \mathbf{q}_k^{\mathrm{T}} \mathbf{z}_k}_{\left(\mathbf{z}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{q}_k\right)^2} \mathbf{z}_k^{\mathrm{T}} \tag{2.91}$$

lässt sich (2.89) in der Form

$$\mathbf{H}_{k+1} = \mathbf{H}_k + \frac{(\mathbf{p}_k - \mathbf{H}_k\mathbf{q}_k)(\mathbf{p}_k - \mathbf{H}_k\mathbf{q}_k)^{\mathrm{T}}}{\gamma_k \left(\mathbf{z}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{q}_k\right)^2} \tag{2.92}$$

anschreiben. Bildet man von (2.90) das Skalarprodukt mit $\mathbf{q}_k$

$$\mathbf{q}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{p}_k = \mathbf{q}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{H}_k\mathbf{q}_k + \gamma_k (\mathbf{z}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{q}_k)^2 \ , \tag{2.93}$$

dann kann (2.92) wie folgt

$$\mathbf{H}_{k+1} = \mathbf{H}_k + \frac{(\mathbf{p}_k - \mathbf{H}_k\mathbf{q}_k)(\mathbf{p}_k - \mathbf{H}_k\mathbf{q}_k)^{\mathrm{T}}}{\mathbf{q}_k^{\mathrm{T}}(\mathbf{p}_k - \mathbf{H}_k\mathbf{q}_k)} \tag{2.94}$$

geschrieben werden. Damit lässt sich folgender Satz formulieren.

Satz 2.12 (Quasi-Newton-Methode — Rang 1 Korrektur). *Angenommen* $\mathbf{K}$ *ist eine konstante symmetrische Matrix und* $\mathbf{p}_0, \mathbf{p}_1, \ldots, \mathbf{p}_k$ *sind linear unabhängige Vektoren. Mit* $\mathbf{q}_j = \mathbf{K}\mathbf{p}_j$, $j = 0, \ldots, k$ *gilt für jede symmetrische Startmatrix* $\mathbf{H}_0$ *und die Iterationsvorschrift*

$$\mathbf{H}_{j+1} = \mathbf{H}_j + \frac{(\mathbf{p}_j - \mathbf{H}_j\mathbf{q}_j)(\mathbf{p}_j - \mathbf{H}_j\mathbf{q}_j)^{\mathrm{T}}}{\mathbf{q}_j^{\mathrm{T}}(\mathbf{p}_j - \mathbf{H}_j\mathbf{q}_j)} \tag{2.95}$$

die Beziehung

$$\mathbf{p}_j = \mathbf{H}_{k+1}\mathbf{q}_j, \quad j = 0, \ldots, k \ . \tag{2.96}$$

Aufgabe 2.9. Beweisen Sie Satz 2.12 mit vollständiger Induktion. **Hinweis:** Dieser Beweis ist z. B. in [2.4] skizziert.

Ein zentraler Nachteil der Rang 1 Korrektur ist, dass die positive Definitheit von $\mathbf{H}_{k+1}$ nur gesichert ist, wenn $\mathbf{q}_k^{\mathrm{T}}(\mathbf{p}_k - \mathbf{H}_k\mathbf{q}_k) > 0$ gilt. Aus diesem Grund wurden weitere iterative Korrekturformeln für $\mathbf{H}_k$ entwickelt. Beispiele dafür sind die Korrekturformel nach Davidon-Fletcher-Powell (DFP)

$$\mathbf{H}_{k+1} = \mathbf{H}_k + \frac{\mathbf{p}_k\mathbf{p}_k^{\mathrm{T}}}{\mathbf{q}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{p}_k} - \frac{\mathbf{H}_k\mathbf{q}_k\mathbf{q}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{H}_k}{\mathbf{q}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{H}_k\mathbf{q}_k} \tag{2.97}$$

und die etwas häufiger verwendete Korrekturformel nach Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno (BFGS)

$$\mathbf{H}_{k+1} = \left(\mathbf{E} - \frac{\mathbf{p}_k\mathbf{q}_k^{\mathrm{T}}}{\mathbf{q}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{p}_k}\right)\mathbf{H}_k\left(\mathbf{E} - \frac{\mathbf{q}_k\mathbf{p}_k^{\mathrm{T}}}{\mathbf{q}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{p}_k}\right) + \frac{\mathbf{p}_k\mathbf{p}_k^{\mathrm{T}}}{\mathbf{q}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{p}_k} \ . \tag{2.98}$$

Beide werden als *Rang* 2 *Korrekturformeln* bezeichnet, da die aktuelle Approximation der inversen Hessematrix jeweils durch eine Matrix mit Rang 2 korrigiert wird. Linearkombinationen der obigen beiden Formeln in der Art $\mathbf{H}_{k+1} = \phi\mathbf{H}_{k+1}^{\mathrm{DFP}} + (1-\phi)\mathbf{H}_{k+1}^{\mathrm{BFGS}}$ mit $\phi \in (0,1)$ können ebenfalls verwendet werden. Alle so erhaltenen Rang 2 Korrekturformeln bilden die sogenannte *Broyden Familie*. Diese Korrekturformeln erhalten natürlich die Symmetrie von $\mathbf{H}_k$. Ferner lässt sich zeigen (siehe [2.1, 2.3, 2.5]), dass sie die positive Definitheit von $\mathbf{H}_k$ erhalten, wenn

$$\mathbf{q}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{p}_k > 0 \tag{2.99}$$

erfüllt ist.

Basierend auf der aktuellen Schätzung $\mathbf{H}_k$ der inversen Hessematrix wird bei der Quasi-Newton-Methode die Suchrichtung in der Form

$$\mathbf{s}_k = -\mathbf{H}_k(\nabla f)(\mathbf{x}_k) \tag{2.100}$$

gewählt. Man beachte, dass hierfür, anders als bei der Newton-Methode (siehe (2.80)), lediglich die Kenntnis des Gradienten $(\nabla f)(\mathbf{x}_k)$ und eine Matrixmultiplikation von Nöten sind. Der Algorithmus der Quasi-Newton-Methode ist unter Verwendung der BFGS-Korrekturformel in Tabelle 2.3 zusammengefasst.

Die Erfüllung der Bedingung (2.99) lässt sich durch eine geeignete Wahl der Schrittweite α_k in $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_k\mathbf{s}_k$ sicherstellen. Genügt die Wahl der Schrittweite beispielsweise der Wolfe-Bedingung gemäß Abschnitt 2.3.1.3, so ist (2.99) automatisch erfüllt. Um dies zu sehen, beachte man, dass aus (2.33)

$$g'(\alpha_k) = \mathbf{g}_{k+1}^{\mathrm{T}}\mathbf{s}_k \geq \varepsilon_2 g'(0) = \varepsilon_2\mathbf{g}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{s}_k \tag{2.101}$$

mit $0 < \varepsilon_2 < 1$ folgt. Daraus erhält man

$$(\mathbf{g}_{k+1} - \mathbf{g}_k)^{\mathrm{T}}\mathbf{s}_k = \mathbf{q}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{s}_k \geq \underbrace{(\varepsilon_2 - 1)\mathbf{g}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{s}_k}_{>0} \ , \tag{2.102}$$

Initialisierung:

$\mathbf{H}_0$	(Startwert, positiv definite Matrix)
$k = 0$	(Startindex)
$\mathbf{x}_0$	(Startlösung)
$\mathbf{g}_0 = (\nabla f)(\mathbf{x}_0)$	(Gradient an der Stelle $\mathbf{x}_0$)
ε_x	(Schwellwert für Abbruchkriterium)

repeat

Schritt 1: Berechne die Suchrichtung $\mathbf{s}_k = -\mathbf{H}_k \mathbf{g}_k$

Schritt 2: Löse die Minimierungsaufgabe $\min_{\alpha_k \geq 0} f(\mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{s}_k)$

Schritt 3:
$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{s}_k$$
$$\mathbf{p}_k = \mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k = \alpha_k \mathbf{s}_k$$
$$\mathbf{g}_{k+1} = (\nabla f)(\mathbf{x}_{k+1})$$
$$\mathbf{q}_k = \mathbf{g}_{k+1} - \mathbf{g}_k$$

Schritt 4: BFGS-Korrekturformel

$$\mathbf{H}_{k+1} = \left(\mathbf{E} - \frac{\mathbf{p}_k \mathbf{q}_k^{\mathrm{T}}}{\mathbf{q}_k^{\mathrm{T}} \mathbf{p}_k}\right) \mathbf{H}_k \left(\mathbf{E} - \frac{\mathbf{q}_k \mathbf{p}_k^{\mathrm{T}}}{\mathbf{q}_k^{\mathrm{T}} \mathbf{p}_k}\right) + \frac{\mathbf{p}_k \mathbf{p}_k^{\mathrm{T}}}{\mathbf{q}_k^{\mathrm{T}} \mathbf{p}_k}$$

until $\|\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k\| \leq \varepsilon_x$

Tabelle 2.3: Quasi-Newton-Methode mit der BFGS-Korrekturformel.

wobei die rechte Seite dieser Ungleichung (abseits des optimalen Punktes $\mathbf{x}^*$) strikt positiv sein muss, da $\mathbf{s}_k$ eine Abstiegsrichtung ist. Mit $\mathbf{p}_k = \mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k = \alpha_k \mathbf{s}_k$ folgt schließlich aus (2.102), dass

$$\mathbf{q}_k^{\mathrm{T}} \mathbf{p}_k = \alpha_k \mathbf{q}_k^{\mathrm{T}} \mathbf{s}_k \geq \alpha_k (\varepsilon_2 - 1) \mathbf{g}_k^{\mathrm{T}} \mathbf{s}_k > 0 \tag{2.103}$$

gilt und (2.99) somit erfüllt ist.

Für unbeschränkte nichtlineare Optimierungsprobleme mit konvexer Kostenfunktion $f(\mathbf{x})$ konvergiert die Quasi-Newton-Methode mit superlinearer Konvergenzordnung. Für das unbeschränkte quadratische Optimierungsproblem (2.54) konvergiert die Quasi-Newton-Methode nach spätestens n Iterationsschritten. Konvergiert die Methode in diesem Fall genau nach n Iterationsschritten, so kann gezeigt werden (siehe [2.1]), dass $\mathbf{H}_n = (\nabla^2 f)^{-1}(\mathbf{x}^*) = \mathbf{Q}^{-1}$, d. h. der Algorithmus liefert die exakte inverse Hessematrix.

Die Vor- und Nachteile der Quasi-Newton-Methode können wie folgt zusammengefasst werden:

+ einfaches Verfahren mit moderatem Rechenaufwand
+ nur der Gradient $(\nabla f)(\mathbf{x}_k)$ (Berechnungsaufwand $\mathcal{O}(n)$) wird benötigt
+ konvergiert bei quadratischen Optimierungsproblemen nach spätestens n Iterationsschritten
+ generell superlineares Konvergenzverhalten
– Matrix $\mathbf{H}_k$ muss gespeichert werden (Speicherplatzbedarf $\mathcal{O}(n^2)$)

2.3.2.5 Gauss-Newton-Methode

Bei der Gauss-Newton-Methode wird die aufwändige Berechnung der Hessematrix $(\nabla^2 f)(\mathbf{x}_k)$ durch eine weniger rechenintensive näherungsweise Berechnung ersetzt. Diese Optimierungsmethode ist nur anwendbar, wenn die Kostenfunktion $f(\mathbf{x})$ die Struktur

$$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}\|\mathbf{r}(\mathbf{x})\|_2^2 = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m} r_i^2(\mathbf{x}) \tag{2.104}$$

mit einer beliebigen Funktion $\mathbf{r} : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ besitzt. Die Komponenten $r_i(\mathbf{x})$ von $\mathbf{r}(\mathbf{x})$ sollen $r_i \in C^2$ erfüllen. Die exakte Hessematrix von $f(\mathbf{x})$ lautet in diesem Fall

$$\Big(\nabla^2 f\Big)(\mathbf{x}) = (\nabla \mathbf{r})(\mathbf{x})(\nabla \mathbf{r})^{\mathrm{T}}(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^{m} r_i(\mathbf{x})\Big(\nabla^2 r_i\Big)(\mathbf{x}) \ , \tag{2.105}$$

wobei die Spalten der Jacobi-Matrix $(\nabla \mathbf{r})(\mathbf{x}) \in \mathbb{R}^{n\times m}$ die Gradienten $(\nabla r_i)(\mathbf{x})$ enthalten.

> *Aufgabe* 2.10. Rechnen Sie (2.105) ausgehend von (2.104) nach.

Bei der Gauss-Newton-Methode wird der zweite Summand in (2.105) vernachlässigt, so dass sich die Näherung

$$\Big(\nabla^2 f\Big)(\mathbf{x}) \approx (\nabla \mathbf{r})(\mathbf{x})(\nabla \mathbf{r})^{\mathrm{T}}(\mathbf{x}) \tag{2.106}$$

ergibt. Der damit verbundene Näherungsfehler ist also klein, wenn $r_i(\mathbf{x})$ oder $(\nabla^2 r_i)(\mathbf{x})$ $\forall\, i = 1, \ldots, m$ betraglich kleine Werte annimmt. Ist z. B. bekannt, dass $f(\mathbf{x}^*) = 0$, so folgt daraus $r_i(\mathbf{x}^*) = 0\ \forall\, i = 1, \ldots, m$. Der Fall $(\nabla^2 r_i)(\mathbf{x}) = \mathbf{0}\ \forall\, i = 1, \ldots, m$ tritt ein, wenn $\mathbf{r}(\mathbf{x})$ affin in $\mathbf{x}$ ist (vgl. Aufgabe 2.11).

Unter Verwendung des Gradienten $(\nabla f)(\mathbf{x}) = (\nabla \mathbf{r})(\mathbf{x})\mathbf{r}(\mathbf{x})$ und der Approximation (2.106) ergibt sich der Gauss-Newton-Schritt

$$\begin{aligned} \mathbf{s}_k &= -((\nabla \mathbf{r})(\mathbf{x}_k)(\nabla \mathbf{r})^{\mathrm{T}}(\mathbf{x}_k))^{-1}(\nabla f)(\mathbf{x}_k) \\ &= -((\nabla \mathbf{r})(\mathbf{x}_k)(\nabla \mathbf{r})^{\mathrm{T}}(\mathbf{x}_k))^{-1}(\nabla \mathbf{r})(\mathbf{x}_k)\mathbf{r}(\mathbf{x}_k) \end{aligned} \tag{2.107}$$

Die Iterationsvorschrift der Gauss-Newton-Methode lautet damit

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - ((\nabla \mathbf{r})(\mathbf{x}_k)(\nabla \mathbf{r})^{\mathrm{T}}(\mathbf{x}_k))^{-1}(\nabla \mathbf{r})(\mathbf{x}_k)\mathbf{r}(\mathbf{x}_k) \ . \tag{2.108}$$

Für die praktische Anwendung der Methode führt man noch eine geeignete Schrittweite α_k ein, so dass die Iterationsvorschrift

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \alpha_k((\nabla \mathbf{r})(\mathbf{x}_k)(\nabla \mathbf{r})^{\mathrm{T}}(\mathbf{x}_k))^{-1}(\nabla \mathbf{r})(\mathbf{x}_k)\mathbf{r}(\mathbf{x}_k) \tag{2.109}$$

lautet und die Abstiegsbedingung (2.22) erfüllt ist. Das Verfahren wird dann häufig *gedämpfte Gauss-Newton-Methode* genannt und α_k wird als *Dämpfungsparameter* bezeichnet. Gelegentlich wird die Einschränkung $\alpha_k \leq 1$ verwendet.

Man beachte, dass die Berechnung von $\mathbf{s}_k$ gemäß (2.107) keine tatsächliche Inversion von $(\nabla \mathbf{r})(\mathbf{x}_k)(\nabla \mathbf{r})^{\mathrm{T}}(\mathbf{x}_k)$ erfordert. Die Wahl der Suchrichtung gemäß (2.107) ist nur sinnvoll, wenn die $n \times n$ Matrix $(\nabla \mathbf{r})(\mathbf{x})(\nabla \mathbf{r})^{\mathrm{T}}(\mathbf{x})$ positiv definit ist. Ist sie singulär

(oder zumindest schlecht konditioniert), kann ähnlich wie bei der Newton-Methode die alternative Iterationsvorschrift

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \alpha_k \mathbf{M}_k (\nabla f)(\mathbf{x}_k) \ , \quad \mathbf{M}_k = \Big((\nabla \mathbf{r})(\mathbf{x}_k) (\nabla \mathbf{r})^{\mathrm{T}}(\mathbf{x}_k) + \varepsilon_k \mathbf{E} \Big)^{-1} \tag{2.110}$$

mit einem geeigneten positiven Parameter ε_k verwendet werden. Das Verfahren wird dann als *Levenberg-Marquardt-Methode* bezeichnet. Die Iterationsvorschrift (2.110) geht für $\varepsilon_k = 0$ in die Gauss-Newton-Methode gemäß (2.109) und für sehr große ε_k in die Gradientenmethode gemäß (2.51) über.

Der nachfolgende Satz liefert eine Aussage über die Konvergenzordnung der Gauss-Newton-Methode. Sein Beweis ist z. B. in [2.6] zu finden.

Satz 2.13 (Konvergenzordnung der Gauss-Newton-Methode)**.** *Gegeben sei die Kostenfunktion* $f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}\|\mathbf{r}(\mathbf{x})\|_2^2$ *mit* $\mathbf{r} \in C^2$ *definiert im* $\mathbb{R}^n$ *und dem lokalen Minimum* $\mathbf{x}^*$*. Wenn die Jacobi-Matrix* $(\nabla \mathbf{r})(\mathbf{x}^*)$ *zeilenregulär ist,* $\sum_{i=1}^m r_i(\mathbf{x}^*)(\nabla^2 r_i)(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}$ *gilt und der Anfangswert* $\mathbf{x}_0$ *in einer hinreichend nahen Umgebung des Minimums liegt, dann konvergiert die* Gauss-Newton-Iteration

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - ((\nabla \mathbf{r})(\mathbf{x}_k)(\nabla \mathbf{r})^{\mathrm{T}}(\mathbf{x}_k))^{-1} (\nabla \mathbf{r})(\mathbf{x}_k) \mathbf{r}(\mathbf{x}_k) \tag{2.111}$$

mit der Konvergenzordnung 2 *gegen das Minimum* $\mathbf{x}^*$*.*

Ist der Term $\sum_{i=1}^m r_i(\mathbf{x}^*)(\nabla^2 r_i)(\mathbf{x}^*) \neq \mathbf{0}$ aber klein gegenüber $(\nabla \mathbf{r})(\mathbf{x}_k)(\nabla \mathbf{r})^{\mathrm{T}}(\mathbf{x}_k)$, so kann zumindest lineares Konvergenzverhalten nachgewiesen werden. Wenn jedoch $\sum_{i=1}^m r_i(\mathbf{x}^*)(\nabla^2 r_i)(\mathbf{x}^*)$ betraglich zu große Werte annimmt, kann es sein, dass die Gauss-Newton-Methode nicht konvergiert [2.6].

Aufgabe 2.11. Zeigen Sie, dass die Gauss-Newton-Methode für die Optimierungsaufgabe

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \ \frac{1}{2}\|\mathbf{r}(\mathbf{x})\|_2^2 \qquad \text{mit} \qquad \mathbf{r}(\mathbf{x}) = \mathbf{A}\mathbf{x} + \mathbf{b} \tag{2.112}$$

und einer spaltenregulären Matrix $\mathbf{A}$ (dies impliziert $m \geq n$) unabhängig vom Startpunkt $\mathbf{x}_0$ innerhalb von nur einem Iterationsschritt zum optimalen Punkt $\mathbf{x}^* = -(\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{A})^{-1}\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{b}$ konvergiert.

Kostenfunktionen wie in der Optimierungsaufgabe (2.112) treten z. B. bei der Methode der kleinsten Fehlerquadrate mit parametrisch linearem Modell (lineare Regressionsanalyse) [2.7] auf. Kostenfunktionen der Art (2.104) treten z. B. bei der Methode der kleinsten Fehlerquadrate mit parametrisch nichtlinearem Modell (nichtlineare Regressionsanalyse) [2.8] auf.

Aufgabe 2.12. Zeigen Sie, dass die iterative Lösung der nichtlinearen Gleichung

$$\mathbf{r}(\mathbf{x}) = \mathbf{0} \tag{2.113}$$

mit $\mathbf{r} : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ gemäß dem Newton-Raphson-Verfahren genau dem Gauss-Newton-Verfahren angewandt auf die Optimierungsaufgabe

$$\min_{\mathbf{x}\in\mathbb{R}^n} \ \frac{1}{2}\|\mathbf{r}(\mathbf{x})\|_2^2 \tag{2.114}$$

entspricht.

Die Vor- und Nachteile der Gauss-Newton-Methode können wie folgt zusammengefasst werden:

+ keine zweiten Ableitungen nötig, nur der Gradient $(\nabla\mathbf{r})(\mathbf{x}_k)$ wird benötigt
+ konvergiert im ersten Iterationsschritt, wenn $\mathbf{r}(\mathbf{x})$ affin in $\mathbf{x}$ ist
+ unter bestimmten Voraussetzungen kann quadratisches Konvergenzverhalten erreicht werden
– Konvergenz hängt vom jeweiligen Problem ab und ist nicht garantiert
– Berechnungsaufwand $\mathcal{O}(mn)$ für die Jacobi-Matrix $(\nabla\mathbf{r})(\mathbf{x}_k)$, Berechnungsaufwand $\mathcal{O}(n^3)$ für die Suchrichtung $\mathbf{s}_k$

2.4 Methode der Vertrauensbereiche

Bei den Liniensuchverfahren wird eine geeignete Abstiegsrichtung (Suchrichtung) $\mathbf{s}_k$ (beispielsweise der *negative Gradient* an der Stelle $\mathbf{x}_k$ gemäß (2.34) bei der Gradientenmethode oder die *Newton-Richtung* gemäß (2.80) bei der Newton-Methode) gewählt und anschließend wird über das skalare Optimierungsproblem (2.23) die (optimale) Schrittweite $\alpha_k > 0$ in diese Abstiegsrichtung bestimmt. Bei der Methode der Vertrauensbereiche (englisch: *trust region method*) wird die zu minimierende Kostenfunktion $f(\mathbf{x})$ in der Umgebung von $\mathbf{x}_k$ durch eine quadratische Ansatzfunktion m_k in der Form

$$f(\mathbf{x}_k + \mathbf{s}_k) \approx m_k(\mathbf{s}_k) = f(\mathbf{x}_k) + \mathbf{s}_k^{\mathrm{T}}(\nabla f)(\mathbf{x}_k) + \frac{1}{2}\mathbf{s}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{B}_k\mathbf{s}_k \tag{2.115}$$

mit einer geeigneten symmetrischen Matrix $\mathbf{B}_k$ approximiert. Der Approximationsfehler der quadratischen Ansatzfunktion ist in der Größenordnung von $\|\mathbf{s}_k\|^2$ und wenn $\mathbf{B}_k$ mit der Hessematrix $(\nabla^2 f)(\mathbf{x}_k)$ übereinstimmt sogar von $\|\mathbf{s}_k\|^3$. Der *Vertrauensbereich* wird durch einen skalaren Parameter Δ_k charakterisiert und definiert eine Umgebung um den Punkt $\mathbf{x}_k$, in der die Kostenfunktion $f(\mathbf{x}_k + \mathbf{s}_k)$ hinreichend genau durch die quadratische Ansatzfunktion $m_k(\mathbf{s}_k)$ beschrieben wird. Dabei wird in jedem Iterationsschritt das Optimierungsproblem

$$\begin{aligned} \min_{\mathbf{s}_k\in\mathbb{R}^n} \quad & m_k(\mathbf{s}_k) = f(\mathbf{x}_k) + \mathbf{s}_k^{\mathrm{T}}(\nabla f)(\mathbf{x}_k) + \frac{1}{2}\mathbf{s}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{B}_k\mathbf{s}_k \\ \text{u.B.v.} \quad & \|\mathbf{s}_k\| \le \Delta_k \end{aligned} \tag{2.116}$$

für ein geeignetes $\Delta_k > 0$ gelöst. Man beachte, dass (im Gegensatz zu den meisten Liniensuchverfahren) die Abstiegsrichtung und die Schrittweite *gleichzeitig* bestimmt werden.

Initialisierung: $\bar{\Delta}, \Delta_0 \in (0, \bar{\Delta})$ (Vertrauensbereich: Grenz- & Startwert)
$\eta \in [0, \frac{1}{4})$ (Parameter)
$k \leftarrow 0$ (Startindex)
$\mathbf{x}_0$ (Startlösung)
ε_x (Schwellwert für Abbruchkriterium)

repeat

$m_k(\mathbf{s}_k)$ nach (2.115) (Modell)
$\mathbf{s}_k$ Lösung von (2.116) (evtl. approximativ gelöst)
ρ_k nach (2.117) (Modellgüte)

if $\rho_k < \frac{1}{4}$
$\Delta_{k+1} \leftarrow \frac{1}{4}\Delta_k$ (Reduktion)
else if $\rho_k > \frac{3}{4}$ **and** $||\mathbf{s}_k|| = \Delta_k$
$\Delta_{k+1} \leftarrow \min\{2\Delta_k, \bar{\Delta}\}$ (Vergrößerung)
else
$\Delta_{k+1} \leftarrow \Delta_k$
end if

if $\rho_k > \eta$
$\mathbf{x}_{k+1} \leftarrow \mathbf{x}_k + \mathbf{s}_k$ (nächster Schritt)
$\mathbf{B}_{k+1} \leftarrow \mathbf{B}_k + \ldots$ (Aktualisierung der Ansatzfunktion)
else
$\mathbf{x}_{k+1} \leftarrow \mathbf{x}_k$ (Schritt mit $\Delta_{k+1} < \Delta_k$ wiederholen)
end if

$k \leftarrow k + 1$

until $\|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_{k-1}\| \leq \varepsilon_x$

Tabelle 2.4: Methode der Vertrauensbereiche.

Ein wesentlicher Entwurfsfreiheitsgrad dieser Methode liegt nun in der Wahl von Δ_k. Dazu wird in jedem Iterationsschritt *die Übereinstimmung der quadratischen Ansatzfunktion m_k mit der Kostenfunktion f* überprüft, indem das Verhältnis

$$\rho_k(\mathbf{s}_k) = \frac{f(\mathbf{x}_k) - f(\mathbf{x}_k + \mathbf{s}_k)}{m_k(\mathbf{0}) - m_k(\mathbf{s}_k)} \tag{2.117}$$

berechnet wird. Der Zählerterm in (2.117) beschreibt die *tatsächliche Reduktion* der Kostenfunktion während der Nennerterm die *prädizierte Reduktion* wiedergibt. Der Nennerterm von $\rho_k(\mathbf{s}_k)$ ist stets größer gleich Null, da $\mathbf{s}_k$ die Funktion m_k gemäß (2.116) innerhalb des Vertrauensbereiches minimiert und der Punkt $\mathbf{s}_k = \mathbf{0}$ im Vertrauensbereich

liegt. Ist nun $\rho_k(\mathbf{s}_k) < 0$, so bedeutet dies, dass der Wert der Kostenfunktion am nächsten Iterationspunkt $f(\mathbf{x}_k + \mathbf{s}_k)$ größer als am vorigen Iterationspunkt $f(\mathbf{x}_k)$ ist, weshalb dieser Iterationsschritt verworfen und der Vertrauensbereich verkleinert werden muss. Andererseits kann bei $\rho_k(\mathbf{s}_k) \approx 1$ der Vertrauensbereich vergrößert werden, da die Kostenfunktion $f(\mathbf{x}_k)$ in diesem Fall gut von der Ansatzfunktion beschrieben wird. Für den Fall, dass $\rho_k(\mathbf{s}_k)$ positiv und deutlich kleiner als 1 ist, wird der Vertrauensbereich im nächsten Schritt verkleinert.

Ein Algorithmus zur Methode der Vertrauensbereiche ist in Tabelle 2.4 aufgelistet. Man beachte, dass hier $\bar{\Delta}$ eine obere Schranke für Δ_k darstellt und dass eine Vergrößerung des Vertrauensbereiches im nächsten Iterationsschritt nur dann stattfindet, wenn $\mathbf{s}_k$ durch die Grenze des Vertrauensbereiches beschränkt wurde (Bedingung $\|\mathbf{s}_k\| = \Delta_k$).

Vorschläge für die in Tabelle 2.4 nicht dargestellte Iterationsvorschrift der Matrix $\mathbf{B}_k$ werden z. B. in [2.1, 2.3, 2.4] beschrieben. Eine Möglichkeit ist die Berechnung von $\mathbf{B}_k$ in der Form (2.106), d. h. $\mathbf{B}_k = (\nabla \mathbf{r})(\mathbf{x}_k)(\nabla \mathbf{r})^{\mathrm{T}}(\mathbf{x}_k)$ gemäß der Gauss-Newton-Methode. Es kann gezeigt werden, dass dann die Methode der Vertrauensbereiche mit der Levenberg-Marquardt-Methode übereinstimmt [2.6].

2.5 Direkte Suchverfahren

Die bisher betrachteten sogenannten *ableitungsbehafteten* Lösungsverfahren verwenden den Gradienten $(\nabla f)(\mathbf{x}_k)$ (und mitunter die Hessematrix $(\nabla^2 f)(\mathbf{x}_k)$), um mittels einer geeigneten Iterationsvorschrift einen neuen Punkt $\mathbf{x}_{k+1}$ zu bestimmen. Es soll dabei eine hinreichend gute Reduktion der Kostenfunktion $f(\mathbf{x}_{k+1}) < f(\mathbf{x}_k)$ erreicht werden.

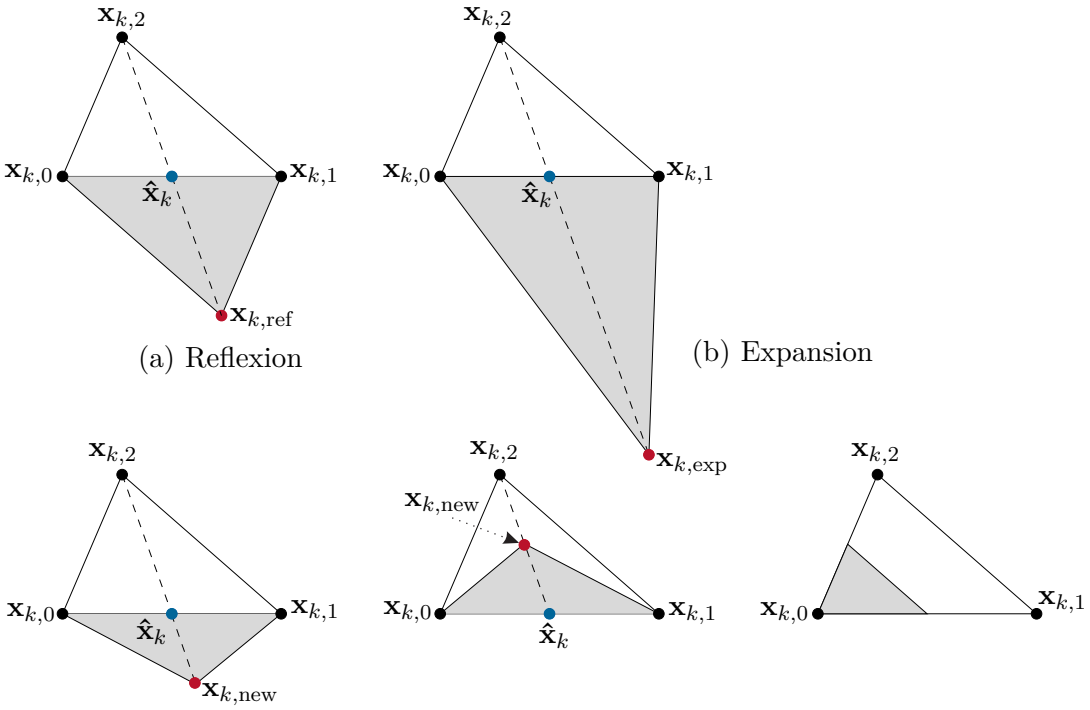
Allerdings sind in manchen praktischen Fällen die dazu erforderlichen Ableitungen nicht verfügbar oder mit vertretbarem Aufwand berechenbar, da das betrachtete Problem *zu komplex* oder *nicht stetig differenzierbar* ist. Abhilfe verschaffen in diesem Fall sogenannte *direkte* oder *ableitungsfreie Suchverfahren*, die mit Hilfe von Stichproben eine Reihe von Funktionswerten berechnen, um daraus einen neuen Iterationspunkt $\mathbf{x}_{k+1}$ zu bestimmen.

Ein bekanntes und gleichzeitig einfaches Verfahren in der nichtlinearen Optimierung ist das *Simplex-Verfahren* nach *Nelder* und *Mead*. Dieses Verfahren unterscheidet sich grundsätzlich vom Simplex-Algorithmus in der *Linearen Programmierung* und sollte nicht mit ihm verwechselt werden.

Der Algorithmus basiert auf der Iteration eines sogenannten *Simplex* im n-dimensionalen Raum der Optimierungsvariablen. Unter einem Simplex versteht man in diesem Zusammenhang jene konvexe Hülle, die von $n+1$ Punkten $\mathbf{x}_{k,i},\ i = 0, \ldots, n$ zum Iterationsschritt k im n-dimensionalen Suchraum aufgespannt wird (für $n = 1$ ist dies eine Linie, für $n = 2$ ein Dreieck, etc.). Im Weiteren werden mit $\mathbf{x}_{k,\min}$ und $\mathbf{x}_{k,\max}$ jene Eckpunkte des Simplex bezeichnet die den kleinsten und größten Kostenfunktion f aufweisen, d. h. es gilt

$$\begin{aligned} f(\mathbf{x}_{k,\min}) &= \min_{i=0,\ldots,n} f(\mathbf{x}_{k,i}) \\ f(\mathbf{x}_{k,\max}) &= \max_{i=0,\ldots,n} f(\mathbf{x}_{k,i}) \ . \end{aligned} \tag{2.118}$$

Der *Schwerpunkt* oder Mittelpunkt des Simplex $\hat{\mathbf{x}}_k$ gebildet durch alle Eckpunkte außer



(a) Reflexion (b) Expansion

(c) Äußere Kontraktion (d) Innere Kontraktion (e) Schrumpfung

Abbildung 2.8: Operationen des Simplex-Verfahrens nach Nelder und Mead für $\beta = 1$, $\gamma = 1$ und $\theta = 1/2$.

$\mathbf{x}_{k,\max}$ errechnet sich zu

$$\hat{\mathbf{x}}_k = \frac{1}{n}\left(\sum_{i=0}^{n} \mathbf{x}_{k,i} - \mathbf{x}_{k,\max}\right) . \tag{2.119}$$

Der Algorithmus beruht nun auf der Idee, den Punkt $\mathbf{x}_{k,\max}$ im Simplex durch einen anderen Punkt mit einem niedrigeren Kostenfunktionswert zu ersetzen. Eine wichtige Operationen dabei ist die Berechnung des *Reflexionspunktes*

$$\mathbf{x}_{k,\text{ref}} = \hat{\mathbf{x}}_k + (\hat{\mathbf{x}}_k - \mathbf{x}_{k,\max}) , \tag{2.120}$$

der auf einer Geraden durch die Punkte $\mathbf{x}_{k,\max}$ und $\hat{\mathbf{x}}_k$ liegt und symmetrisch bezüglich $\hat{\mathbf{x}}_k$ zu $\mathbf{x}_{k,\max}$ ist, siehe Abbildung 2.8(a). Abhängig von $f(\mathbf{x}_{k,\text{ref}})$ im Vergleich zu den Funktionswerten der anderen Punkte des Simplex wird ein neuer Punkt $\mathbf{x}_{k,\text{new}}$ konstruiert, der im nächsten Iterationsschritt den Punkt $\mathbf{x}_{k,\max}$ ersetzt. Der Algorithmus ist in seiner Grundfunktion in Tabelle 2.5 aufgelistet und die unterschiedlichen Operationen sind grafisch in Abbildung 2.8 dargestellt. Man beachte, dass die Schrumpfung im Algorithmus von Tabelle 2.5 stets bezüglich des Eckpunktes $\mathbf{x}_{k,\min}$ mit dem kleinsten Kostenfunktionswert ausgeführt wird, d. h. in Abbildung 2.8(e) gilt $\mathbf{x}_{k,1} = \mathbf{x}_{k,\min}$. Während der Iteration wandert der Simplex in Richtung des Optimums und zieht sich sukzessive zusammen. Allerdings ist die Konvergenz im Allgemeinen nicht garantiert und es kann vorkommen, dass das Simplex-Verfahren zu einem *nicht-optimalen Punkt* konvergiert. In der Praxis

führt das Simplex-Verfahren dennoch häufig zu guten Ergebnissen und akzeptablem Konvergenzverhalten.

Initialisierung:
- $\mathbf{x}_{0,i},\ i = 0, \ldots, n$ (Startsimplex)
- $k \leftarrow 0$ (Iterationsindex)
- $\beta > 0$ (Reflexionskoeffizient, typisch $\beta = 1$)
- $\gamma > 0$ (Expansionskoeffizient, typisch $\gamma = 1$)
- $\theta \in (0, 1)$ (Kontraktionskoeffizient, typisch $\theta = 1/2$)
- ε_x (Schwellwert für Abbruchkriterium)

repeat

$\mathbf{x}_{k,\min}$, $\mathbf{x}_{k,\max}$ gemäß (2.118) (Punkte mit min. und max. Kostenfunktionswert)

$\hat{\mathbf{x}}_k$ gemäß (2.119) (Schwerpunkt)

$\mathbf{x}_{k,\text{ref}} = \hat{\mathbf{x}}_k + \beta(\hat{\mathbf{x}}_k - \mathbf{x}_{k,\max})$ (Reflexionsschritt, Abb. 2.8(a))

if $f(\mathbf{x}_{k,\text{ref}}) < f(\mathbf{x}_{k,\min})$

  $\mathbf{x}_{k,\text{exp}} = \mathbf{x}_{k,\text{ref}} + \gamma(\mathbf{x}_{k,\text{ref}} - \hat{\mathbf{x}}_k)$ (Expansionsschritt, Abb. 2.8(b))

  if $f(\mathbf{x}_{k,\text{exp}}) < f(\mathbf{x}_{k,\text{ref}})$

    $\mathbf{x}_{k,\text{new}} = \mathbf{x}_{k,\text{exp}}$

  else

    $\mathbf{x}_{k,\text{new}} = \mathbf{x}_{k,\text{ref}}$ (Reflexionspunkt beibehalten)

  end if

else if $f(\mathbf{x}_{k,\text{ref}}) > \max_{\mathbf{x}_{k,i} \neq \mathbf{x}_{k,\max},\ i=0,\ldots,n} f(\mathbf{x}_{k,i})$

  if $f(\mathbf{x}_{k,\max}) \leq f(\mathbf{x}_{k,\text{ref}})$

    $\mathbf{x}_{k,\text{new}} = \theta\mathbf{x}_{k,\max} + (1-\theta)\hat{\mathbf{x}}_k$ (Innere Kontraktion, Abb. 2.8(d))

  else

    $\mathbf{x}_{k,\text{new}} = \theta\mathbf{x}_{k,\text{ref}} + (1-\theta)\hat{\mathbf{x}}_k$ (Äußere Kontraktion, Abb. 2.8(c))

  end if

else

  $\mathbf{x}_{k,\text{new}} = \mathbf{x}_{k,\text{ref}}$ (Reflexionspunkt beibehalten)

end if

if $f(\mathbf{x}_{k,\text{new}}) \geq f(\mathbf{x}_{k,\max})$ (ev. bei nichtkonv. Kostenfkt.)

  $\mathbf{x}_{k+1,i} \leftarrow \frac{1}{2}(\mathbf{x}_{k,i} + \mathbf{x}_{k,\min}),\ i = 0, \ldots, n$ (Schrumpfung, Abb. 2.8(e))

else

  $\mathbf{x}_{k,\max} \leftarrow \mathbf{x}_{k,\text{new}}$

  $\mathbf{x}_{k+1,i} \leftarrow \mathbf{x}_{k,i},\ i = 0, \ldots, n$

end if

$k \leftarrow k + 1$

until $\|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_{k-1}\| \leq \varepsilon_x$

Tabelle 2.5: Simplex-Verfahren nach Nelder und Mead.

2.6 Beispiel: Rosenbrock's „Bananenfunktion“

Ein bekanntes Beispiel in der Optimierung ist das *Rosenbrock*-Problem

$$\min_{\mathbf{x}\in\mathbb{R}^2} f(\mathbf{x}) \quad \text{mit} \quad f(\mathbf{x}) = 100(x_2 - x_1^2)^2 + (x_1 - 1)^2 \,. \tag{2.121}$$

Abbildung 2.9 zeigt das Profil und die Höhenlinien der Funktion, die auch als *Bananenfunktion* bezeichnet wird. Das Rosenbrock-Problem soll als Beispiel verwendet werden, um die *Konvergenzeigenschaften der behandelten Verfahren* numerisch mit Hilfe von MATLAB zu untersuchen.

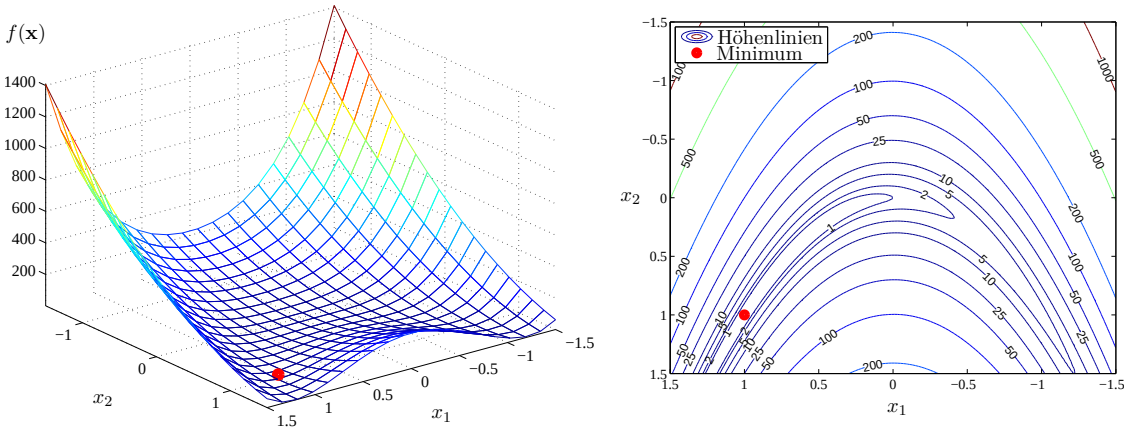


Abbildung 2.9: Profil und Höhenlinien von Rosenbrock's Bananenfunktion.

> *Aufgabe* 2.13. Verifizieren Sie, dass der Punkt $\mathbf{x}^* = [1 \quad 1]^{\mathrm{T}}$ ein Minimum darstellt. Ist das Minimum $\mathbf{x}^*$ global und eindeutig? Sind die Funktion $f(\mathbf{x})$ und das Optimierungsproblem (2.121) konvex?

Zur Lösung von unbeschränkten Optimierungsproblemen stellt die *Optimization Toolbox* von MATLAB die folgenden Funktionen zur Verfügung

- fminunc: Liniensuche: Gradientenverfahren, Quasi-Newton-Verfahren
  Methode der Vertrauensbereiche: Newton-Verfahren
- fminsearch: Simplex-Verfahren nach Nelder-Mead.

Eine empfehlenswerte Alternative ist die frei zugängliche MATLAB-Funktion minFunc [2.9], die eine große Auswahl an Liniensuchverfahren bietet. Tabelle 2.6 zeigt einige Vergleichsdaten für die numerische Lösung des Rosenbrock-Problems (ausgehend vom Startwert $\mathbf{x}_0 = [-1 \quad -1]^{\mathrm{T}}$), die mit Hilfe von fminunc, fminsearch und minFunc berechnet wurden.

Abbildung 2.11 stellt zusätzlich die Iterationsverläufe für die Verfahren dar, die unter fminunc und fminsearch implementiert sind. In der Code-Auflistung 2.1 am Ende dieses Abschnitts ist der MATLAB-Code für das Rosenbrock-Problem (2.121) angegeben, um zu verdeutlichen, wie die einzelnen Optimierungsverfahren mit fminunc und fminsearch angesprochen werden können.

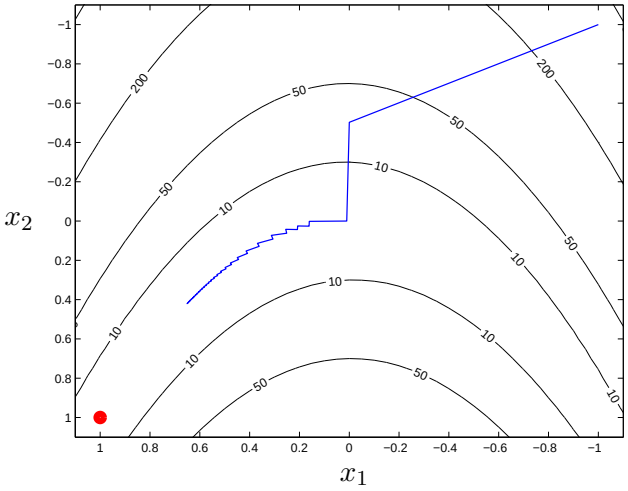


Abbildung 2.10: Darstellung der Iterationen des Gradientenverfahrens.

Verfahren	Funktion	Iter.	$f(\mathbf{x}^*)$	$\|(\nabla f)(\mathbf{x}^*)\|$	Funktionsaufrufe $f(\mathbf{x})$	$(\nabla f)(\mathbf{x})$	$\left(\nabla^2 f\right)(\mathbf{x})$
LS: Gradientenverfahren	fminunc	57	0.1232	1.1978	200	200	–
LS: Konj. Gradientenm.	minFunc	28	$6.9 \cdot 10^{-18}$	$9.6 \cdot 10^{-8}$	68	68	–
LS: Newton-Verfahren	minFunc	20	$3.8 \cdot 10^{-16}$	$7.3 \cdot 10^{-7}$	32	32	26
LS: Quasi-Newton (BFGS)	fminunc	23	$5.4 \cdot 10^{-12}$	$9.2 \cdot 10^{-6}$	29	29	–
LS: Gauss-Newton-Verf.	minFunc	4	$2.8 \cdot 10^{-29}$	$1.1 \cdot 10^{-14}$	9	9	–
VB: Newton-Verfahren	fminunc	25	$2.2 \cdot 10^{-18}$	$2.1 \cdot 10^{-8}$	26	26	26
Nelder-Mead Simplex-Verf.	fminsearch	67	$5.3 \cdot 10^{-10}$	–	125	–	–

Tabelle 2.6: Vergleich der numerischen Verfahren für das Rosenbrock-Problem (LS=Liniensuche, VB=Methode der Vertrauensbereiche).

Beim *Gradientenverfahren* fällt die *langsame Konvergenz* auf, weil auch nach dem Erreichen der maximalen Anzahl an Funktionsauswertungen von 200 das Minimum noch immer nicht erreicht ist. In Abbildung 2.10 ist der Iterationsverlauf des Gradientenverfahrens über den Höhenlinien der Rosenbrock-Funktion (2.121) dargestellt. Erkennbar ist, dass sich das Gradientenverfahren an der maximalen Abstiegsrichtung orientiert, die orthogonal zur jeweiligen Höhenlinie verläuft. In Richtung des Minimums werden die Iterationsschritte immer kleiner. Die niedrige Konvergenzgeschwindigkeit wurde bereits in Abbildung 2.6 veranschaulicht und soll in der folgenden Aufgabe näher untersucht werden.

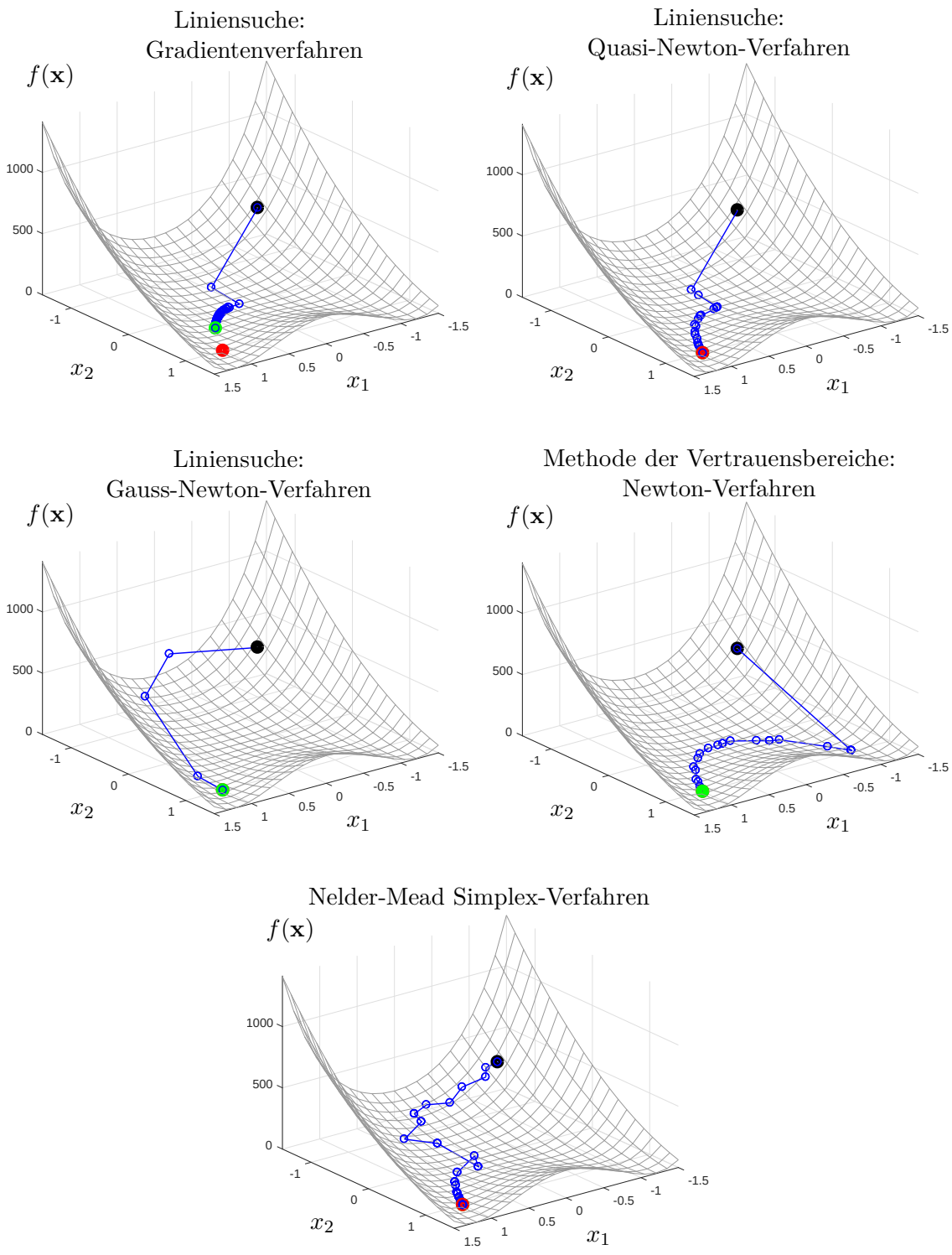


Abbildung 2.11: Rosenbrock's Bananenfunktion: Vergleich der numerischen Verfahren mit fminunc, fminsearch und minFunc.

Aufgabe 2.14. Berechnen Sie für das Minimum $\mathbf{x}^* = [1 \quad 1]^{\mathrm{T}}$ des Rosenbrock-Problems (2.121) die Konvergenzrate des Gradientenverfahrens gemäß Satz 2.7.

Das Konvergenzverhalten des *Quasi-Newton-Verfahrens* in Abbildung 2.11 ist wesentlich besser als beim Gradientenverfahren. Das *Newton-Verfahren (Methode der Vertrauensbereiche)* in Abbildung 2.11 startet zunächst in die „falsche“ Richtung, was durch die *quadratische Approximation* (2.115) am Startpunkt $\mathbf{x}_0 = [-1 \quad -1]^{\mathrm{T}}$ zu erklären ist, deren Minimum in der Nähe von $\mathbf{x} \approx [-1 \quad 1]^{\mathrm{T}}$ liegt. Allerdings sind die einzelnen Schritte entlang des Tales der Rosenbrock-Funktion deutlich größer, da das Newton-Verfahren die *Hessematrix explizit verwendet* und nicht auf eine Approximation angewiesen ist wie im Fall des Quasi-Newton-Verfahrens. Das *Gauss-Newton-Verfahren* weist für die Rosenbrock-Funktion ein sehr gutes Konvergenzverhalten auf. Trotz der Approximation der Hessematrix kann auch im Tal der Kostenfunktion mit großer Schrittweite das Minimum gefunden werden. Dieses besonders gute Verhalten ist aber auf die Form der Kostenfunktion zurückzuführen, welche Terme enthält, die affin in $\mathbf{x}$ sind (vgl. dazu Aufgabe 2.11).

Zusätzlich sind in Tabelle 2.6 und Abbildung 2.11 die Ergebnisse für das *Simplex-Verfahren von Nelder-Mead* angegeben, die mit der MATLAB-Funktion fminsearch erzielt wurden. Allerdings bietet die Grafikausgabe unter fminsearch nicht die Möglichkeit, die einzelnen Simplexe darzustellen. In der nächsten Aufgabe soll das Simplex-Verfahren deshalb näher untersucht werden, um einen Eindruck von den Simplex-Operationen und der Robustheit des Verfahrens zu erhalten.

Aufgabe 2.15. Schreiben Sie eine MATLAB-Funktion, die das Rosenbrock-Problem (2.121) mit Hilfe des Simplex-Verfahrens nach Nelder-Mead numerisch löst (siehe den Algorithmus von Tabelle 2.5). Konstruieren Sie den ersten Simplex mit den Eckpunkten

$$\mathbf{x}_{0,1} = \begin{bmatrix} -1 \\ -1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{x}_{0,2} = \mathbf{x}_{0,1} + s \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{x}_{0,3} = \mathbf{x}_{0,1} + s \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \tag{2.122}$$

in Abhängigkeit der Seitenlänge $s = 1$. Verwenden Sie für die Abbruchbedingung in Tabelle 2.5 die Schranke $\varepsilon_f = 10^{-9}$ und vergleichen Sie Ihre Ergebnisse mit jenen von fminsearch in Tabelle 2.6. Stellen Sie die Simplexe aus den einzelnen Iterationen grafisch dar. Untersuchen Sie die Robustheit und das Konvergenzverhalten des Simplex-Verfahrens für verschiedene Seitenlängen s des Startsimplex und unterschiedliche Startpunkte $\mathbf{x}_{0,1}$.

Aufgabe 2.16. Schreiben Sie eine MATLAB-Funktion, die das Rosenbrock-Problem (2.121) mit Hilfe des Newton-Verfahrens (Liniensuche) löst, siehe Abschnitt 2.3.2.3. Verwenden Sie die heuristischen Bedingungen von Abschnitt 2.3.1.3 für die Schrittweitenbestimmung von α_k. Vergleichen Sie die Konvergenzergebnisse mit den Werten in Tabelle 2.6. Stellen Sie die einzelnen Iterationen grafisch dar und variieren Sie die Startpunkte $\mathbf{x}_0$.

Listing 2.1: MATLAB-Code für das Rosenbrock-Problem (fminunc, fminsearch, minFunc).

```
function Xopt = rosenbrock_problem(Xinit,methodQ)
% ------------------------------------------------------------
% Xinit:  Startpunkt
% methodQ: 1 - fminunc: Liniensuche: Gradientenverfahren
%          2 - fminunc: Liniensuche: Quasi-Newton
%          3 - fminunc: Methode der Vertrauensbereiche: Newton-Verfahren
%          4 - fminsearch: Nelder-Mead Simplex-Verfahren
%          5 - minFunc: CG-Verfahren
%          6 - minFunc: Newton-Verfahren
%          7 - minFunc: Gauss-Newton-Verfahren
global old
old = [Xinit; rosenbrock(Xinit)];

% Optionen für fminunc:
opt_fminu = optimoptions('fminunc','Display','iter','PlotFcns',@plot_iterates);
% Optionen für fminsearch:
opt_fmins = optimset('Display','iter','PlotFcns',@plot_iterates);
% Optionen für minFunc:
opt=struct('display','iter','outputFcn',@plot_iterates);

% Generelles: GradObj gibt an, dass die Funktion zur Berechnung der
% Kostenfunktion auch den Wert des Gradienten retourniert,
% ist auch Hessian auf on, muss zusätzlich die Hessematrix zurückgegeben
% werden
switch methodQ
  case 1     % fminunc: Liniensuche: Gradientenverfahren
    opt_fminu = optimoptions(opt_fminu,'Algorithm','quasi-newton','HessUpdate','steepdesc',...
        'GradObj','on');
    [Xopt,fopt,exitflag,output] = fminunc(@rosenbrock,Xinit,opt_fminu);
  case 2     % fminunc: Liniensuche: Quasi-Newton
    opt_fminu = optimoptions(opt_fminu,'Algorithm','quasi-newton','HessUpdate','bfgs',...
        'GradObj','on');
    [Xopt,fopt,exitflag,output] = fminunc(@rosenbrock,Xinit,opt_fminu);
  case 3     % fminunc: Methode der Vertrauensbereiche: Newton-Verfahren
    opt_fminu = optimoptions(opt_fminu,'Algorithm','trust-region','Hessian','on','GradObj','on');
    [Xopt,fopt,exitflag,output] = fminunc(@rosenbrock,Xinit,opt_fminu);
  case 4     % fminsearch: Nelder-Mead Simplex-Verfahren
    [Xopt,fopt,exitflag,output] = fminsearch(@rosenbrock,Xinit,opt_fmins);
  case 5     % minFunc: CG-Verfahren
    figure
    opt.Method = 'cg';
    [Xopt,fopt,exitflag,output] = minFunc(@rosenbrock,Xinit,opt);
  case 6     % minFunc: Newton-Verfahren
    figure
    opt.Method = 'newton';
    [Xopt,fopt,exitflag,output] = minFunc(@rosenbrock,Xinit,opt);
  case 7    % minFunc: Gauss-Newton-Verfahren
    figure
    opt.Method = 'newton';
    [Xopt,fopt,exitflag,output] = minFunc(@rosenbrock_gauss_newton,Xinit,opt);
end

function [f, grad, H] = rosenbrock(x)
% ------------------------------------------------------------
grad = {}; H = {};
f = 100*(x(2)-x(1)^2)^2 + (x(1)-1)^2;                    % Rosenbrock-Funktion
if nargout>1                                              % falls Gradient angefordert wird
  grad = [ -400*(x(2)-x(1)^2)*x(1)+2*(x(1)-1);
           200*(x(2)-x(1)^2) ];
end
if nargout>2                                              % falls Hessematrix angefordert wird
  H = [ -400*(x(2)-3*x(1)^2)+2, -400*x(1);
```

```
       -400*x(1),              200 ];
end

function [f, grad, H]=rosenbrock_gauss_newton(x)
% ------------------------------------------------------------
% Rosenbrock-Funktion wird umformuliert als Norm einer
% vektorwertigen Funktion r(x):
%   f(x)=100*(x2-x1^2)^2+(x1-1)^2 = 1/2*norm(r(x))^2
% mit
%   r1(x)=sqrt(200)*(x2-x1^2)
%   r2(x)=sqrt(2)*(x1-1)
r=[sqrt(200)*(x(2)-x(1)^2);
  sqrt(2)*(x(1)-1)];
f=1/2*norm(r)^2;
if nargout>1
  grad_r=[-sqrt(200)*2*x(1),sqrt(2);
    sqrt(200),0];
  grad=grad_r*r;
end
if nargout>2
  H=grad_r*grad_r';
end

function stop = plot_iterates(x,info,state)
% ------------------------------------------------------------
global old
f = rosenbrock(x);
switch state                                          % Grafische Ausgabe:
  case 'init'                                         % Initialisierung
    plot_surface(x,f);
  case 'iter'                                         % Iterationen
    plot3([old(1),x(1)],[old(2),x(2)],[old(3),f],'b-o','LineWidth',1);
  case 'done'                                         % nach letzter Iteration
    plot3(x(1),x(2),f,'go','LineWidth',5);
end
stop = false;                                         % kein Abbruchkriterium
old = [x;f];

function plot_surface(x,f)
% ------------------------------------------------------------
[X1,X2] = meshgrid(-1.5:0.15:1.5);                    % 3D-Profil von
F = 100*(X2-X1.^2).^2 + (X1-1).^2;                    % Rosenbrock-Funktion
h = surf(X1,X2,F,'EdgeColor',0.6*[1,1,1],'FaceColor','none');
hold on; axis tight;
plot3(x(1),x(2),f,'ko','LineWidth',5);                % Startpunkt
plot3(1,1,0,'ro','LineWidth',5);                      % optimale Lösung
xlabel('x_1'); ylabel('x_2'); zlabel('f')
set(gcf,'ToolBar','figure');                          % Aktivieren der Menüleiste (Zoom, etc.)
set(gca,'Xdir','reverse','Ydir','reverse');
set(gca,'clipping','off');
```

2.7 Literatur

[2.1] D. P. Bertsekas, *Nonlinear Programming*, 2. Aufl. Athena Scientific, 1999.

[2.2] D. G. Luenberger und Y. Ye, *Linear and Nonlinear Programming*, 3. Aufl., Ser. International Series in Operations Research & Management Science. Springer, 2008, Bd. 116.

[2.3] I. Griva, S. Nash und A. Sofer, *Linear and Nonlinear Optimization*, 2. Aufl. Society for Industrial und Applied Mathematics, 2009.

[2.4] J. Nocedal und S. J. Wright, *Numerical Optimization*, 2. Aufl., Ser. Springer Series in Operations Research and Financial Engineering. Springer, 2006.

[2.5] R. Fletcher, *Practical methods of optimization*, 2. Aufl. John Wiley & Sons, 1987.

[2.6] J. Dennis und R. Schnabel, *Numerical Methods for Unconstrained Optimization and Nonlinear Equations*, Ser. Classics in Applied Mathematics. Society for Industrial und Applied Mathematics, 1996.

[2.7] W. Kemmetmüller, *Skriptum zur VO Regelungssysteme 1 (WS 2016/2017)*, Institut für Automatisierungs- und Regelungstechnik, TU Wien, 2016. Adresse: http://www.acin.tuwien.ac.at/lehre/master/regelungssysteme-1/.

[2.8] M. Papageorgiou, M. Leibold und M. Buss, *Optimierung: Statische, dynamische, stochastische Verfahren für die Anwendung*, 4. Aufl. Springer, 2015.

[2.9] M. Schmidt, „minFunc“, abrufbar unter http://www.cs.ubc.ca/~schmidtm/Software/minFunc.html, University of British Columbia, Vancouver, 2005, (besucht am 28. 09. 2016).

[2.10] S. Boyd und L. Vandenberghe, *Convex Optimization*. Cambridge University Press, 2004.

[2.11] C. T. Kelley, *Iterative Methods for Optimization*. Society for Industrial und Applied Mathematics, 1999.

[2.12] B. C. Chachuat, „Nonlinear and Dynamic Optimization: From Theory to Practice“, abrufbar unter http://infoscience.epfl.ch/record/111939, Laboratoire d'Automatique, École Polytechnique Fédérale de Lausanne, 2007, (besucht am 28. 09. 2017).

[2.13] H. T. Jongen, K. Meer und E. Triesch, *Optimization Theory*. Kluwer Academic Publishers, 2004.

3 Statische Optimierung mit Beschränkungen

Den nachfolgenden Betrachtungen liegt das statische Optimierungsproblem mit Gleichungs- und Ungleichungsbeschränkungen gemäß (1.1) in der Form

$$\begin{aligned} \min_{\mathbf{x}\in\mathbb{R}^n} \quad & f(\mathbf{x}) && \text{Kostenfunktion} && (3.1a)\\ \text{u.B.v.} \quad & g_i(\mathbf{x}) = 0, \quad i = 1,\dots,p && \text{Gleichungsbeschränkungen} && (3.1b)\\ & h_i(\mathbf{x}) \le 0, \quad i = 1,\dots,q && \text{Ungleichungsbeschränkungen} && (3.1c) \end{aligned}$$

mit $p \le n$, der stetigen Funktion $f(\mathbf{x})$ und den stetig differenzierbaren Funktionen $g_i(\mathbf{x})$, $i = 1,\dots,p$ und $h_i(\mathbf{x})$, $i = 1,\dots,q$ zu Grunde. Fasst man alle Gleichungs- und Ungleichungsbeschränkungen in Vektoren der Form $\mathbf{g}(\mathbf{x}) = [g_1(\mathbf{x}) \quad \dots \quad g_p(\mathbf{x})]^{\mathrm{T}}$ und $\mathbf{h}(\mathbf{x}) = [h_1(\mathbf{x}) \quad \dots \quad h_q(\mathbf{x})]^{\mathrm{T}}$ zusammen, so kann das Optimierungsproblem (3.1) in der Form

$$\begin{aligned} \min_{\mathbf{x}\in\mathbb{R}^n} \quad & f(\mathbf{x}) && (3.2a)\\ \text{u.B.v.} \quad & \mathbf{g}(\mathbf{x}) = \mathbf{0} && (3.2b)\\ & \mathbf{h}(\mathbf{x}) \le \mathbf{0} && (3.2c) \end{aligned}$$

dargestellt werden. Noch kompakter lässt sich dies äquivalent in der Form (1.3)

$$\min_{\mathbf{x}\in\mathcal{X}} \; f(\mathbf{x}) \tag{3.3a}$$

mit der zulässigen Menge

$$\mathcal{X} = \{\, \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \,|\, \mathbf{g}(\mathbf{x}) = \mathbf{0},\ \mathbf{h}(\mathbf{x}) \le \mathbf{0} \,\} \tag{3.3b}$$

anschreiben. Jedes $\mathbf{x} \in \mathcal{X}$ wird als zulässiger Punkt bezeichnet.

Die Berücksichtigung von allgemeinen nichtlinearen Ungleichungsbeschränkungen (3.2c) ist zumeist schwieriger als die Berücksichtigung von Gleichungsbeschränkungen (3.2b). Eine Möglichkeit, (3.2) äquivalent ohne nichtlineare Ungleichungsbeschränkungen zu formulieren, ist die Verwendung sogenannter *Schlupfvariablen* (englisch: *slack variables*). Dies führt auf die Formulierung

$$\begin{aligned} \min_{\substack{\mathbf{x}\in\mathbb{R}^n,\\ \mathbf{x}_s\in\mathbb{R}^q}} \quad & f(\mathbf{x}) && (3.4a)\\ \text{u.B.v.} \quad & \mathbf{g}(\mathbf{x}) = \mathbf{0} && (3.4b)\\ & \mathbf{h}(\mathbf{x}) + \mathbf{x}_s = \mathbf{0} && (3.4c) \end{aligned}$$

$$\mathbf{x}_s \geq \mathbf{0} \ . \tag{3.4d}$$

Hierbei wurde (3.2c) durch die zusätzlichen Gleichungsbeschränkungen (3.4c) und die (wesentlich einfacheren) Ungleichungsbeschränkungen (3.4d) ersetzt. Die Schlupfvariablen $\mathbf{x}_s$ stellen zusätzliche Optimierungsvariablen dar, d. h. die Dimension des Optimierungsproblems erhöht sich um q.

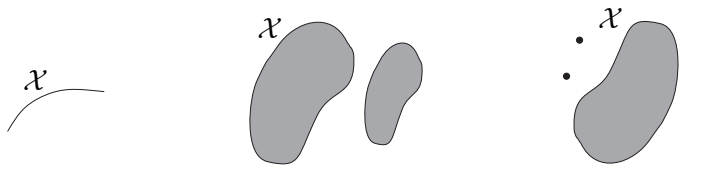
3.1 Optimalitätsbedingungen

3.1.1 Optimalitätsbedingungen basierend auf zulässigen Richtungen

Um Bedingungen für ein lokales Minimum $\mathbf{x}^*$ der Optimierungsaufgabe (3.3) zu formulieren, wird zunächst der Begriff einer *zulässigen Richtung* definiert.

Definition 3.1 (Zulässige Richtung)**.** Der Vektor $\mathbf{d} \in \mathbb{R}^n$ wird als zulässige Richtung am Punkt $\mathbf{x} \in \mathcal{X}$ bezeichnet, wenn ein $\bar{\alpha} > 0$ so existiert, dass $\mathbf{x} + \alpha\mathbf{d} \in \mathcal{X}$ für alle $\alpha \in [0, \bar{\alpha}]$ gilt.

Eine zulässige Richtung muss nicht an jedem zulässigen Punkt $\mathbf{x} \in \mathcal{X}$ existieren. Als Beispiel dafür betrachte man die in Abbildung 3.1a gezeigte zulässige Menge $\mathcal{X} \in \mathbb{R}^2$, welche z. B. durch eine nichtlineare Gleichungsnebenbedingung definiert werden kann. In diesem Fall existiert an keinem Punkt $\mathbf{x} \in \mathcal{X}$ eine zulässige Richtung im Sinne der Definition 3.1.



Nicht robust (a) Robust (b) Nicht robust (c)

Abbildung 3.1: Robuste und nicht robuste Mengen im $\mathbb{R}^2$.

Wenn $\mathcal{X}$ eine *robuste Menge* ist, dann ist gesichert, dass an jedem zulässigen Punkt $\mathbf{x} \in \mathcal{X}$ eine zulässige Richtung existiert. Eine Menge $\mathcal{X}$ ist genau dann *robust*, wenn jeder Punkt am Rand von $\mathcal{X}$ über das (nichtleere) Innere der Menge $\mathcal{X}$ erreicht werden kann. Abbildung 3.1 zeigt Beispiele für robuste und nicht robuste Mengen im $\mathbb{R}^2$. Eine robuste Menge kann offen oder abgeschlossen sein.

Methodisch kann bei der numerischen Suche von optimalen Lösungen auf einer robusten Menge $\mathcal{X}$ ähnlich vorgegangen werden, wie bei den in Abschnitt 2.3 beschriebenen Liniensuchverfahren für unbeschränkte statische Optimierungsprobleme. Dabei wird iterativ entlang von Abstiegsrichtungen $\mathbf{d}$, die gleichzeitig zulässige Richtungen sind, gesucht und durch Eingrenzung der Schrittweite α darauf geachtet, dass das zulässige Gebiet $\mathcal{X}$ nicht verlassen wird, d. h. dass die Ungleichungsbeschränkungen (3.2c) stets eingehalten werden. Dies ist besonders einfach, wenn die Formulierung (3.4) mit Schlupfvariablen verwendet wird, denn dann müssen nur die einfachen Ungleichungen (3.4d) erfüllt werden.

Satz 3.1 (Notwendige Optimalitätsbedingungen erster Ordnung)**.** *Es sei $\mathcal{X} \subseteq \mathbb{R}^n$ die zulässige Menge des Optimierungsproblems (3.3) und $f \in C^1$ eine Funktion definiert auf $\mathcal{X}$. Wenn $\mathbf{x}^*$ ein lokales Minimum von f auf $\mathcal{X}$ ist, dann gilt für jede zulässige Richtung $\mathbf{d}$ am Punkt $\mathbf{x}^*$ die Ungleichungsbedingung*

$$\mathbf{d}^{\mathrm{T}}(\nabla f)(\mathbf{x}^*) \geq 0. \tag{3.5}$$

Liegt $\mathbf{x}^*$ im Inneren von $\mathcal{X}$, dann gilt zusätzlich

$$(\nabla f)(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}. \tag{3.6}$$

Beweis. Wenn $\mathbf{d}$ eine zulässige Richtung am Punkt $\mathbf{x}^*$ ist, dann existiert ein $\bar{\alpha} > 0$ so, dass $\mathbf{x}^* + \alpha\mathbf{d} \in \mathcal{X}$ für alle $\alpha \in [0, \bar{\alpha}]$. Nun definiert man für $0 \leq \alpha \leq \bar{\alpha}$ die Funktion $g(\alpha) = f(\mathbf{x}^* + \alpha\mathbf{d})$. Sie muss am Punkt $\alpha = 0$ ein lokales Minimum besitzen. Entwickelt man $g(\alpha)$ um den Punkt $\alpha = 0$ in eine Taylorreihe und bricht diese nach dem linearen Glied ab, so erhält man

$$g(\alpha) = g(0) + g'(0)\alpha + \mathcal{O}(\alpha^2) \tag{3.7}$$

mit $g'(0) = \mathbf{d}^{\mathrm{T}}(\nabla f)(\mathbf{x}^*)$. Wäre nun $g'(0) < 0$, dann würde für ein hinreichend kleines $\alpha > 0$ gelten $g(\alpha) - g(0) < 0$, was im Widerspruch zu der Annahme steht, dass $\alpha = 0$ bzw. $\mathbf{x}^*$ ein Minimum ist. Daher muss gelten $g'(0) = \mathbf{d}^{\mathrm{T}}(\nabla f)(\mathbf{x}^*) \geq 0$.

Wenn $\mathbf{x}^*$ im Inneren von $\mathcal{X}$ liegt, dann ist jede Richtung $\mathbf{d} \in \mathbb{R}^n$ am Punkt $\mathbf{x}^*$ zulässig. Damit aber $g'(0) = \mathbf{d}^{\mathrm{T}}(\nabla f)(\mathbf{x}^*) \geq 0$ für beliebige $\mathbf{d} \in \mathbb{R}^n$ erfüllt ist, muss $(\nabla f)(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}$ gelten. □

Natürlich impliziert Satz 3.1 die notwendige Optimalitätsbedingung für unbeschränkte statische Optimierungsprobleme gemäß Satz 2.1. Dann gilt $\mathcal{X} = \mathbb{R}^n$ und $\mathbf{x}^*$ liegt immer im Inneren von $\mathcal{X}$.

Beispiel 3.1. Man betrachte die Optimierungsaufgabe

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathcal{X}} \; f(x_1, x_2) = x_1^2 - 2x_1 + x_2 + x_1 x_2 \tag{3.8}$$

mit der zulässigen Menge

$$\mathcal{X} = \left\{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^2 \,|\, x_1 \geq 0,\; x_2 \geq 0 \right\}. \tag{3.9}$$

Das Problem hat an der Stelle $\mathbf{x}^* = [1 \quad 0]^{\mathrm{T}}$ ein globales Minimum. Wertet man den Gradienten an der Stelle $\mathbf{x}^*$ aus, so erhält man

$$\frac{\partial}{\partial x_1} f(\mathbf{x}^*) = 2x_1^* - 2 + x_2^* = 0 \tag{3.10a}$$

$$\frac{\partial}{\partial x_2} f(\mathbf{x}^*) = 1 + x_1^* \qquad = 2\,. \tag{3.10b}$$

In diesem Fall liegt $\mathbf{x}^*$ am Rand von $\mathcal{X}$ und der Gradient $(\nabla f)(\mathbf{x}^*)$ verschwindet nicht. Es ist aber die notwendige Bedingung (3.5) für alle zulässigen Richtungen $\mathbf{d}$ erfüllt. Die zweite Komponente von $\mathbf{d}$ muss wegen der Definition von $\mathcal{X}$ gemäß (3.9) größer gleich Null sein.

Satz 3.2 (Notwendige Optimalitätsbedingungen zweiter Ordnung)**.** *Es sei $\mathcal{X} \subseteq \mathbb{R}^n$ die zulässige Menge des Optimierungsproblems (3.3) und $f \in C^2$ eine Funktion definiert auf $\mathcal{X}$. Wenn $\mathbf{x}^*$ ein lokales Minimum von f auf $\mathcal{X}$ ist, dann gelten für jede zulässige Richtung $\mathbf{d}$ am Punkt $\mathbf{x}^*$ die Bedingungen*

$$(a) \quad \mathbf{d}^{\mathrm{T}}(\nabla f)(\mathbf{x}^*) \geq 0 \tag{3.11a}$$

$$(b) \quad \text{wenn } \mathbf{d}^{\mathrm{T}}(\nabla f)(\mathbf{x}^*) = 0, \text{ dann } \mathbf{d}^{\mathrm{T}}\left(\nabla^2 f\right)(\mathbf{x}^*)\mathbf{d} \geq 0\ . \tag{3.11b}$$

Liegt $\mathbf{x}^*$ im Inneren von $\mathcal{X}$, dann gelten zusätzlich die Bedingungen

$$(a) \quad (\nabla f)(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0} \tag{3.12a}$$

$$(b) \quad \left(\nabla^2 f\right)(\mathbf{x}^*) \text{ ist positiv semi-definit.} \tag{3.12b}$$

Aufgabe 3.1. Beweisen Sie Satz 3.2. **Hinweis:** Orientieren Sie sich dabei am Beweis von Satz 3.1.

Aufgabe 3.2. Es wird die Optimierungsaufgabe

$$\min_{\mathbf{x}\in\mathcal{X}} \ f(x_1, x_2) = x_1^3 - x_1^2 x_2 + 2x_2^2 \tag{3.13}$$

mit der zulässigen Menge

$$\mathcal{X} = \left\{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^2 \,|\, x_1 \geq 0,\ x_2 \geq 0 \right\} \tag{3.14}$$

betrachtet. Zeigen Sie, dass der Punkt $\mathbf{x}^* = [6 \quad 9]^{\mathrm{T}}$ zwar die Optimalitätsbedingung erster Ordnung erfüllt, aber trotzdem kein lokales Minimum beschreibt.

Wenn die Funktion $f(\mathbf{x})$ und die zulässige Menge $\mathcal{X}$ konvex sind, dann sind die notwendigen Optimalitätsbedingungen erster Ordnung gemäß Satz 3.1 auch *hinreichend*. Um dies zu sehen, beachte man, dass mit beliebigem $\mathbf{y} \in \mathcal{X}$, $\mathbf{y} - \mathbf{x}^*$ eine zulässige Richtung am Punkt $\mathbf{x}^*$ darstellt und wegen der Konvexität von $f(\mathbf{x})$ die Ungleichung

$$f(\mathbf{y}) \geq f(\mathbf{x}^*) + \underbrace{(\mathbf{y} - \mathbf{x}^*)^{\mathrm{T}}(\nabla f)(\mathbf{x}^*)}_{\geq 0} \geq f(\mathbf{x}^*) \tag{3.15}$$

gilt. Die Sätze 3.1 und 3.2 liefern nur Aussagen zu lokalen Minima. Wenn die Funktion $f(\mathbf{x})$ konvex oder strikt konvex ist, dann können nachfolgende Bedingungen für globale Minima angegeben werden.

Satz 3.3 (Globale Minima einer konvexen Funktion)**.** *Es sei $f(\mathbf{x})$ eine konvexe Funktion auf einer konvexen Menge $\mathcal{X}$. Die Menge aller Minima $\mathcal{G} = \arg\min\{f(\mathbf{x}) \,|\, \mathbf{x} \in \mathcal{X}\}$ ist konvex. Jedes* lokale Minimum *$\mathbf{x}^* \in \mathcal{G}$ von f ist auch ein* globales Minimum*. Ist $f(\mathbf{x})$ strikt konvex, so ist $\mathbf{x}^*$ ein* striktes *globales Minimum.*

Der Beweis dieses Satzes erfolgt analog zum Beweis von Satz 2.4

3.1.2 Optimalitätsbedingungen mit Lagrange-Multiplikatoren

In diesem Abschnitt werden Optimalitätsbedingungen mit Hilfe von Lagrange-Multiplikatoren formuliert. Sie setzen den Gradienten $(\nabla f)(\mathbf{x})$ der Kostenfunktion in Beziehung zu den Jacobi-Matrizen $(\nabla \mathbf{g})(\mathbf{x})$ und $(\nabla \mathbf{h})(\mathbf{x})$ der Beschränkungen. An optimalen Punkten $\mathbf{x}^*$ muss $(\nabla f)(\mathbf{x}^*)$ im Bild dieser Jacobi-Matrizen liegen.

Man bezeichnet eine Ungleichungsbeschränkung $h_i(\mathbf{x}) \leq 0$ als *aktiv* an einem zulässigen Punkt $\mathbf{x}$, wenn $h_i(\mathbf{x}) = 0$ und als *inaktiv*, falls $h_i(\mathbf{x}) < 0$. Eine Gleichungsbeschränkung $g_i(\mathbf{x}) = 0$ ist demnach aktiv an jedem zulässigen Punkt $\mathbf{x}$. Inaktive Ungleichungsbeschränkungen an einem zulässigen Punkt $\mathbf{x}$ haben keinen Einfluss auf die Lösung der Optimierungsaufgabe in einer hinreichend kleinen Umgebung von $\mathbf{x}$. Würde man also die Menge der (am optimalen Punkt) aktiven Ungleichungsbeschränkungen kennen, so könnte man die inaktiven Ungleichungsbeschränkungen vernachlässigen und die aktiven Ungleichungsbeschränkungen durch Gleichungsbeschränkungen ersetzen. Deshalb soll in einem ersten Schritt das Optimierungsproblem (3.2) mit reinen Gleichungsbeschränkungen $\mathbf{g}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ betrachtet werden.

3.1.2.1 Reine Gleichungsbeschränkungen

Treten ausschließlich Gleichungsbeschränkungen auf, so reduziert sich das Optimierungsproblem (3.2) auf die Form

$$\min_{\mathbf{x}\in\mathbb{R}^n} \quad f(\mathbf{x}) \tag{3.16a}$$

$$\text{u.B.v.} \quad \mathbf{g}(\mathbf{x}) = \mathbf{0} \ . \tag{3.16b}$$

Für die *zulässige Menge* gilt dann

$$\mathcal{X} = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \,|\, g_i(\mathbf{x}) = 0,\ i = 1, \ldots, p\} \ . \tag{3.17}$$

Definition 3.2 (Regulärer Punkt bei Gleichungsbeschränkungen, LICQ)**.** Ein zulässiger Punkt $\mathbf{x} \in \mathcal{X}$ der Optimierungsaufgabe (3.2) mit ausschließlich Gleichungsbeschränkungen ($q = 0$) ist *regulär*, wenn die Gradientenvektoren $(\nabla g_i)(\mathbf{x})$, $i = 1, \ldots, p$ linear unabhängig sind. D. h. die Bedingung

$$\operatorname{rang}((\nabla \mathbf{g})(\mathbf{x})) = \operatorname{rang}\Big(\Big[(\nabla g_1)(\mathbf{x}) \quad (\nabla g_2)(\mathbf{x}) \quad \ldots \quad (\nabla g_p)(\mathbf{x})\Big]\Big) = p, \tag{3.18}$$

welche im Englischen auch als *linear independence constraint qualification (LICQ)* bekannt ist, muss an diesem Punkt erfüllt sein.

Folglich sind an einem regulären Punkt die Gleichungsbeschränkungen $\mathbf{g}(\mathbf{x})$ *funktional unabhängig*. Die Menge der regulären Punkte ist eine Untermenge von $\mathcal{X}$.

Es ist zu beachten, dass die Regularität eines Punktes gemäß Definition 3.2 direkt von der Formulierung der Gleichungsbeschränkungen abhängt. Als Beispiel dazu betrachte man die zunächst äquivalent erscheinenden Gleichungsbeschränkungen $g(\mathbf{x}) = x_1 = 0$ und $g(\mathbf{x}) = x_1^2 = 0$ im $\mathbb{R}^n$. Beide Beschränkungen definieren die gleiche zulässige Menge $\mathcal{X}$, nämlich die gesamte Ebene $x_1 = 0$. Für $g(\mathbf{x}) = x_1$ ist jeder Punkt von $\mathcal{X}$ ein regulärer Punkt gemäß der Definition 3.2. Für $g(\mathbf{x}) = x_1^2$ jedoch ist kein Punkt von $\mathcal{X}$ regulär.

Die zulässige Menge $\mathcal{X} = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \,|\, g_i(\mathbf{x}) = 0,\ i = 1, \dots, p\}$ mit den stetig differenzierbaren Funktionen $g_i(\mathbf{x}), i = 1, \dots, p$ beschreibt eine $(n-p)$-*dimensionale* C^1-*Mannigfaltigkeit* (siehe dazu Anhang A des Skriptums Regelungssysteme 2). Der zugehörige $(n-p)$-dimensionale Tangentialraum $\mathcal{T}_{\mathbf{x}}\mathcal{X}$ an einem regulären Punkt $\mathbf{x}$ wird durch $n-p$ linear unabhängige Vektoren aufgespannt. $\mathcal{T}_{\mathbf{x}}\mathcal{X}$ lässt sich nun als Annullator des p-dimensionalen Kotangentialraumes, welcher durch die exakten Differentiale $\mathrm{d}g_i : \mathcal{T}_{\mathbf{x}}\mathcal{X} \to \mathbb{R}$, $i = 1, \dots, p$ gebildet wird, definieren. Das heißt, es gilt

$$\mathcal{T}_{\mathbf{x}}\mathcal{X} = \left\{ \mathbf{d} \;\middle|\; \mathrm{d}g_i(\mathbf{d}) = \mathrm{L}_{\mathbf{d}} g_i(\mathbf{x}) = \underbrace{\left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} g_i(\mathbf{x})\right)}_{(\nabla g_i)^{\mathrm{T}}(\mathbf{x})} \mathbf{d} = 0,\ i = 1, \dots, p \right\}. \tag{3.19}$$

Man beachte, dass die Vektoren $\mathbf{d}$ in (3.19) im allgemeinen Fall, d. h. bei nichtlinearen Gleichungsnebenbedingungen, keine zulässigen Richtungen im Sinne der Definition 3.1 sind. Als Vorbereitung für die Formulierung notwendiger Optimalitätsbedingungen des Optimierungsproblems (3.2) mit reinen Gleichungsnebenbedingungen sei folgendes Lemma angegeben.

Lemma 3.1 (Zu den Optimalitätsbedingungen mit Gleichungsbeschränkungen)**.** *Es sei $\mathbf{x}^* \in \mathcal{X}$ mit $\mathcal{X} = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \,|\, g_i(\mathbf{x}) = 0,\ i = 1, \dots, p\}$ ein regulärer Punkt und ein lokaler Extremalpunkt von $f(\mathbf{x})$ unter den Gleichungsnebenbedingungen $\mathbf{g}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ mit $f, g_1, \dots, g_p \in C^1$. Für alle $\mathbf{d}$, die die Bedingung*

$$(\nabla \mathbf{g})^{\mathrm{T}}(\mathbf{x}^*)\mathbf{d} = \mathbf{0} \tag{3.20}$$

erfüllen, muss auch gelten

$$(\nabla f)^{\mathrm{T}}(\mathbf{x}^*)\mathbf{d} = 0\ . \tag{3.21}$$

Beweisskizze: Da $\mathbf{x}^*$ ein regulärer Punkt von $\mathcal{X}$ ist, liegt jedes $\mathbf{d}$, das (3.20) erfüllt, gemäß (3.19) im Tangentialraum $\mathcal{T}_{\mathbf{x}^*}\mathcal{X}$. Mit $\mathbf{x}(\alpha)$, $\alpha \in (-\bar{\alpha}, \bar{\alpha})$, $\bar{\alpha} > 0$ bezeichne man im Weiteren eine stetig differenzierbare Kurve parametriert in α durch den Punkt $\mathbf{x}^*$ mit dem Tangentialvektor $\mathbf{d}$, so dass gilt $\mathbf{x}(0) = \mathbf{x}^*$ und $\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\alpha}\mathbf{x}\right)(0) = \mathbf{d}$. Da nun $\mathbf{x}^*$

ein lokaler Extremalpunkt ist, muss die Beziehung

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\alpha} f(\mathbf{x}(\alpha))\Big|_{\alpha=0} = \underbrace{\left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} f\right)(\mathbf{x}(0))}_{(\nabla f)^{\mathrm{T}}(\mathbf{x}^*)} \underbrace{\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\alpha}\mathbf{x}\right)(0)}_{\mathbf{d}} = 0 \tag{3.22}$$

gelten. □

Lemma 3.1, speziell (3.21), besagt also, dass $(\nabla f)(\mathbf{x}^*)$ *orthogonal auf den Tangentialraum* $\mathcal{T}_{\mathbf{x}^*}\mathcal{X}$ steht. Dies bedeutet für einen regulären Punkt $\mathbf{x}^*$, dass $(\nabla f)(\mathbf{x}^*)$ sich als Linearkombination von $(\nabla g_i)(\mathbf{x}^*)$, $i = 1, \ldots, p$ darstellen lassen muss, d. h. im Bild von $(\nabla \mathbf{g})(\mathbf{x}^*)$ liegt. Dies motiviert die Einführung des so genannten *Lagrange-Multiplikators* $\boldsymbol{\lambda}$ im folgenden Satz.

Satz 3.4 (Notwendige Optimalitätsbedingungen erster Ordnung)**.** *Es sei* $\mathbf{x}^* \in \mathcal{X}$ *mit* $\mathcal{X} = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \,|\, g_i(\mathbf{x}) = 0,\ i = 1, \ldots, p\}$ *ein regulärer Punkt und ein lokaler Extremalpunkt von* $f(\mathbf{x})$ *unter den Gleichungsnebenbedingungen* $\mathbf{g}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ *mit* $f, g_1, \ldots, g_p \in C^1$*. Dann existiert ein eindeutiges* $\boldsymbol{\lambda}^* \in \mathbb{R}^p$ *so, dass gilt*

$$(\nabla f)(\mathbf{x}^*) + (\nabla \mathbf{g})(\mathbf{x}^*)\boldsymbol{\lambda}^* = \mathbf{0}\ . \tag{3.23}$$

Die notwendige Optimalitätsbedingung (3.23) und die Gleichungsnebenbedingungen $\mathbf{g}(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}$ bilden ein System von $n + p$ Gleichungen in den $n + p$ Unbekannten $(\mathbf{x}^*, \boldsymbol{\lambda}^*)$. Man kann nun die *Lagrangefunktion*

$$L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}) = f(\mathbf{x}) + \boldsymbol{\lambda}^{\mathrm{T}}\mathbf{g}(\mathbf{x}) \tag{3.24}$$

einführen und die notwendigen Optimalitätsbedingungen von Satz 3.4 in der Form

$$\left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} L\right)^{\mathrm{T}}(\mathbf{x}^*, \boldsymbol{\lambda}^*) = (\nabla f)(\mathbf{x}^*) + (\nabla \mathbf{g})(\mathbf{x}^*)\boldsymbol{\lambda}^* = \mathbf{0} \tag{3.25a}$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\lambda}} L\right)^{\mathrm{T}}(\mathbf{x}^*, \boldsymbol{\lambda}^*) = \mathbf{g}(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0} \tag{3.25b}$$

schreiben.

Beispiel 3.2. Man betrachte das Optimierungsproblem (3.1) mit einer Gleichungsbeschränkung in der Form

$$\min_{\mathbf{x}\in\mathbb{R}^2} \quad f(\mathbf{x}) = (x_1 - 2)^2 + (x_2 - 1)^2 \tag{3.26a}$$

$$\text{u.B.v.} \quad g(\mathbf{x}) = x_2 - 2x_1 = 0\,. \tag{3.26b}$$

Abbildung 3.2 stellt die Gerade $g(\mathbf{x}) = 0$ und die Höhenlinien von $f(\mathbf{x})$ dar.

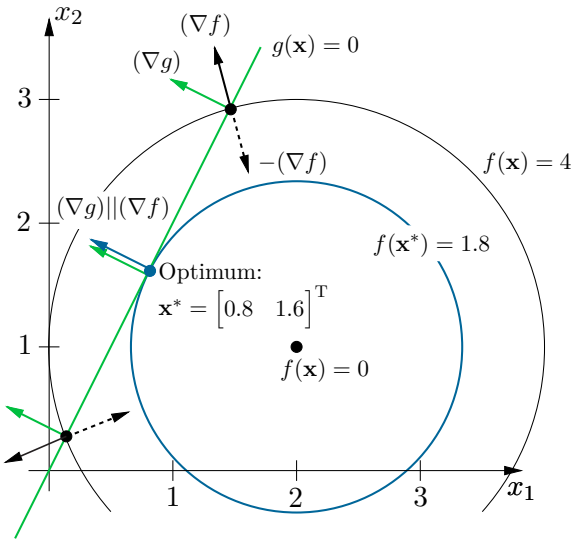


Abbildung 3.2: Veranschaulichung von Beispiel 3.2 mit einer Gleichungsbeschränkung.

Da optimale Punkte $\mathbf{x}^*$ auf der Geraden $g(\mathbf{x}) = 0$ liegen müssen, existieren z. B. für die Höhenlinie $f(\mathbf{x}) = 4$ zwei Schnittpunkte. Es ist direkt ersichtlich, dass für Höhenlinien mit $f(\mathbf{x}) < 4$ die Schnittpunkte dichter zusammenwandern und schließlich zum Minimum

$$\mathbf{x}^* = \begin{bmatrix} 0.8 & 1.6 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}}, \quad f(\mathbf{x}^*) = 1.8 \tag{3.27}$$

führen. Die Gradienten der Funktionen $f(\mathbf{x})$ und $g(\mathbf{x})$ lauten

$$(\nabla f)(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} 2(x_1 - 2) \\ 2(x_2 - 1) \end{bmatrix}, \quad (\nabla g)(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} -2 \\ 1 \end{bmatrix} \tag{3.28}$$

und damit errechnen sich die notwendigen Optimalitätsbedingungen (3.25) mit der Lagrangefunktion $L(x_1, x_2, \lambda) = f(\mathbf{x}) + \lambda g(\mathbf{x}) = (x_1 - 2)^2 + (x_2 - 1)^2 + \lambda(x_2 - 2x_1)$ zu

$$\frac{\partial}{\partial x_1} L(x_1, x_2, \lambda) = 2(x_1 - 2) - 2\lambda = 0 \tag{3.29a}$$

$$\frac{\partial}{\partial x_2} L(x_1, x_2, \lambda) = 2(x_2 - 1) + \lambda = 0 \tag{3.29b}$$

$$\frac{\partial}{\partial \lambda} L(x_1, x_2, \lambda) = x_2 - 2x_1 = 0\ . \tag{3.29c}$$

Die Lösung dieses Gleichungssystems liefert den optimalen Punkt $x_1^* = 0.8,\ x_2^* = 1.6$ und $\lambda^* = -1.2$.

Aufgabe 3.3. Zeigen Sie, dass unter allen möglichen Quadern mit der gegebenen Oberfläche A der Würfel mit der Seitenlänge $\sqrt{A/6}$ das größte Volumen besitzt.

Aufgabe 3.4. Gegeben ist ein nichtlineares zeitvariantes Abtastsystem der Form

$$x_{k+1} = \varphi_k(x_k, u_k), \quad x_0 = x(0) \tag{3.30}$$

mit dem Zustand x und dem Eingang u. Gesucht sind die Steuerfolge $(u_0, u_1, \ldots, u_N)$ und die zugehörigen Zustände $(x_0, x_1, \ldots, x_N)$ so, dass die Kostenfunktion

$$J = \sum_{k=0}^{N} \psi_k(x_k, u_k) \tag{3.31}$$

minimiert wird und die Endbedingungen $g(x_{N+1}) = 0$ erfüllt ist. Nehmen Sie dabei an, dass die partiellen Ableitungen erster Ordnung aller auftretenden Funktionen stetig sind und die LICQ Bedingung gemäß Definition 3.2 erfüllt ist. Zeigen Sie, dass mit der optimalen Lösung die Gleichungen

$$\lambda_{k-1} = \lambda_k \left(\frac{\partial}{\partial x}\varphi_k\right)(x_k, u_k) + \left(\frac{\partial}{\partial x}\psi_k\right)(x_k, u_k), \quad k = 1, \ldots, N \tag{3.32a}$$

$$\lambda_N = \mu \left(\frac{\partial}{\partial x} g\right)(x_{N+1}) \tag{3.32b}$$

$$0 = \lambda_k \left(\frac{\partial}{\partial u}\varphi_k\right)(x_k, u_k) + \left(\frac{\partial}{\partial u}\psi_k\right)(x_k, u_k), \quad k = 0, \ldots, N \tag{3.32c}$$

mit einem geeigneten Wert μ verbunden sind.

Satz 3.5 (Notwendige Optimalitätsbedingungen zweiter Ordnung)**.** *Es sei $\mathbf{x}^* \in \mathcal{X}$ mit $\mathcal{X} = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \,|\, g_i(\mathbf{x}) = 0,\ i = 1, \ldots, p\}$ ein regulärer Punkt und ein lokales Minimum von $f(\mathbf{x})$ unter den Gleichungsnebenbedingungen $\mathbf{g}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ mit $f, g_1, \ldots, g_p \in C^2$. Dann existiert ein eindeutiges $\boldsymbol{\lambda}^* \in \mathbb{R}^p$ so, dass gilt*

$$\left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} L\right)^{\mathrm{T}} (\mathbf{x}^*, \boldsymbol{\lambda}^*) = (\nabla f)(\mathbf{x}^*) + (\nabla \mathbf{g})(\mathbf{x}^*)\boldsymbol{\lambda}^* = \mathbf{0} \tag{3.33}$$

und

$$\mathbf{d}^{\mathrm{T}} \left(\nabla^2 L\right)(\mathbf{x}^*, \boldsymbol{\lambda}^*)\mathbf{d} = \mathbf{d}^{\mathrm{T}} \left(\left(\nabla^2 f\right)(\mathbf{x}^*) + \sum_{i=1}^{p} \lambda_i^* \left(\nabla^2 g_i\right)(\mathbf{x}^*)\right)\mathbf{d} \geq 0 \tag{3.34}$$

für alle $\mathbf{d} \in \mathcal{T}_{\mathbf{x}^*}\mathcal{X}$ mit der Lagrangefunktion L gemäß (3.24).

Die Sätze 3.4 und 3.5 geben notwendige Bedingungen an, die ein lokales Minimum des beschränkten Optimierungsproblems erfüllen muss. Der nächste Satz formuliert nun hinreichende Bedingungen für ein striktes lokales Minimum des Optimierungsproblems (3.1) mit reinen Gleichungsnebenbedingungen.

Satz 3.6 (Hinreichende Optimalitätsbedingungen zweiter Ordnung)**.** *Gesucht ist das Minimum der Kostenfunktion $f(\mathbf{x})$ unter den Gleichungsnebenbedingungen $g_i(\mathbf{x}) =$*

$0,\ i = 1, \dots, p$ *mit* $f, g_1, \dots, g_p \in C^2$. *Wenn* $(\mathbf{x}^*, \boldsymbol{\lambda}^*)$ *so existieren, dass*

$$\left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} L\right)^{\mathrm{T}} (\mathbf{x}^*, \boldsymbol{\lambda}^*) = \mathbf{0} \tag{3.35}$$

$g_i(\mathbf{x}^*) = 0,\ i = 1, \dots, p$ *und*

$$\mathbf{d}^{\mathrm{T}} \Big(\nabla^2 L\Big)(\mathbf{x}^*, \boldsymbol{\lambda}^*)\mathbf{d} > 0 \qquad \forall\, \mathbf{d} \in \mathcal{T}_{\mathbf{x}^*}\mathcal{X},\ \mathbf{d} \neq \mathbf{0} \tag{3.36}$$

mit der Lagrangefunktion L *gemäß* (3.24)*, dann ist* $\mathbf{x}^*$ *ein striktes lokales Minimum.*

Man erkennt aus Satz 3.6, dass die Matrix $\mathbf{L} = (\nabla^2 L)(\mathbf{x}^*, \boldsymbol{\lambda}^*)$ eine ähnliche Rolle wie die Hessematrix $(\nabla^2 f)(\mathbf{x}^*)$ der Kostenfunktion $f(\mathbf{x})$ im unbeschränkten Fall spielt (siehe die Sätze 2.2 und 2.3). In der Tat wird das *Konvergenzverhalten des beschränkten Optimierungsproblems durch die Eigenwerte der Matrix* $\mathbf{L}$ *eingeschränkt auf den Tangentialraum* $\mathcal{T}_{\mathbf{x}^*}\mathcal{X}$ *bestimmt*. Um nun die Erfüllung von (3.36) zu überprüfen, kann die Matrix $\mathbf{L}$ auf den Tangentialraum $\mathcal{T}_{\mathbf{x}^*}\mathcal{X}$ projiziert und dort auf positive Definitheit getestet werden. Dazu verwendet man die Transformationsmatrix $\mathbf{T} \in \mathbb{R}^{n \times (n-p)}$, deren Spaltenvektoren eine orthonormale Basis von $\mathcal{T}_{\mathbf{x}^*}\mathcal{X}$ bilden, d. h. $\mathbf{T}^{\mathrm{T}}\mathbf{T} = \mathbf{E}$. Es lässt sich nun für jedes $\mathbf{d} \in \mathcal{T}_{\mathbf{x}^*}\mathcal{X}$ stets ein $\mathbf{z} \in \mathbb{R}^{n-p}$ so finden, dass gilt $\mathbf{d} = \mathbf{T}\mathbf{z}$. Setzt man $\mathbf{d} = \mathbf{T}\mathbf{z}$ in (3.36) ein, so erhält man

$$\mathbf{d}^{\mathrm{T}} \Big(\nabla^2 L\Big)(\mathbf{x}^*, \boldsymbol{\lambda}^*)\mathbf{d} = \mathbf{d}^{\mathrm{T}}\mathbf{L}\mathbf{d} = \mathbf{z}^{\mathrm{T}}\mathbf{T}^{\mathrm{T}}\mathbf{L}\mathbf{T}\mathbf{z} > 0 \qquad \forall\, \mathbf{z} \in \mathbb{R}^{n-p},\ \mathbf{z} \neq \mathbf{0}. \tag{3.37}$$

Die Projektion der symmetrischen Matrix $\mathbf{L}$ in den Tangentialraum $\mathcal{T}_{\mathbf{x}^*}\mathcal{X}$ ergibt sich also in der Form

$$\mathbf{L}_{\mathcal{X}} = \mathbf{T}^{\mathrm{T}}\mathbf{L}\mathbf{T}, \tag{3.38}$$

und die Überprüfung der Erfüllung von (3.36) reduziert sich auf die Prüfung der positiven Definitheit von $\mathbf{L}_{\mathcal{X}}$. Es sei nun λ ein Eigenwert von $\mathbf{L}_{\mathcal{X}}$ und $\mathbf{v}$ der zugehörige Eigenvektor (zugleich Links- und Rechtseigenvektor). Folglich gilt

$$0 = \mathbf{v}^{\mathrm{T}}(\lambda\mathbf{E} - \mathbf{L}_{\mathcal{X}})\mathbf{v} = \mathbf{v}^{\mathrm{T}}(\lambda\mathbf{T}^{\mathrm{T}}\mathbf{T} - \mathbf{T}^{\mathrm{T}}\mathbf{L}\mathbf{T})\mathbf{v} = \mathbf{v}^{\mathrm{T}}\mathbf{T}^{\mathrm{T}}(\lambda\mathbf{E} - \mathbf{L})\mathbf{T}\mathbf{v}. \tag{3.39}$$

Aus diesem Ergebnis und der Spaltenregularität von $\mathbf{T}$ folgt, dass die Singularität von $\lambda\mathbf{E} - \mathbf{L}_{\mathcal{X}}$ die Singularität von $\lambda\mathbf{E} - \mathbf{L}$ impliziert. Damit ist gezeigt, dass jeder Eigenwert von $\mathbf{L}_{\mathcal{X}}$ auch ein Eigenwert von $\mathbf{L}$ ist.

Beispiel 3.3. Man betrachte das Optimierungsproblem (3.1) mit einer Gleichungsbeschränkung in der Form

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3} \quad f(\mathbf{x}) = x_1 + x_2^2 + x_2 x_3 + 2x_3^2 \tag{3.40a}$$

$$\text{u.B.v.} \quad g(\mathbf{x}) = x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 - 1 = 0\,. \tag{3.40b}$$

Die notwendigen Optimalitätsbedingungen erster Ordnung nach Satz 3.4 lauten

$$\frac{\partial}{\partial x_1} L(\mathbf{x}^*, \lambda^*) = 1 + 2\lambda^* x_1^* = 0 \tag{3.41a}$$

$$\frac{\partial}{\partial x_2} L(\mathbf{x}^*, \lambda^*) = 2x_2^* + x_3^* + 2\lambda^* x_2^* = 0 \tag{3.41b}$$

$$\frac{\partial}{\partial x_3} L(\mathbf{x}^*, \lambda^*) = x_2^* + 4x_3^* + 2\lambda^* x_3^* = 0 \tag{3.41c}$$

$$\frac{\partial}{\partial \lambda} L(\mathbf{x}^*, \lambda^*) = (x_1^*)^2 + (x_2^*)^2 + (x_3^*)^2 - 1 = 0 \ . \tag{3.41d}$$

Mit dem regulären Punkt $\mathbf{x}^* = [1 \quad 0 \quad 0]^{\mathrm{T}}$ und dem Lagrange-Multiplikator $\lambda^* = -1/2$ ist eine Lösung von (3.41) gegeben. Zur Prüfung der notwendigen Optimalitätsbedingung zweiter Ordnung gemäß Satz 3.5 wird die Matrix

$$\mathbf{L} = \left(\nabla^2 L\right)(\mathbf{x}^*, \boldsymbol{\lambda}^*) = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 3 \end{bmatrix} \tag{3.42}$$

benötigt.

Um den Tangentialraum $\mathcal{T}_{\mathbf{x}^*}\mathcal{X}$ der Mannigfaltigkeit $\mathcal{X} = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3 \,|\, x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 = 1\}$ gemäß (3.19) zu berechnen, bestimme man vorerst den Ausdruck

$$\left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} g\right)(\mathbf{x}^*) = \begin{bmatrix} 2x_1 & 2x_2 & 2x_3 \end{bmatrix}\Big|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}^*} = \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 \end{bmatrix} \ . \tag{3.43}$$

Aus (3.43) und der Definition (3.19) für den Tangentialraum am Punkt $\mathbf{x}^*$ folgt, dass die erste Komponente aller Vektoren $\mathbf{d} \in \mathcal{T}_{\mathbf{x}^*}\mathcal{X}$ identisch Null sein muss. Folglich ist für alle $\mathbf{d} \in \mathcal{T}_{\mathbf{x}^*}\mathcal{X}$ die Beziehung (3.36) von Satz 3.6 erfüllt, denn die Submatrix $\mathbf{L}_{[2..3,2..3]}$ ist positiv definit. Alternativ erhält man dieses Ergebnis durch Projektion der Matrix $\mathbf{L}$. Wählt man dazu zwei orthogonale Basisvektoren des Tangentialraumes $\mathcal{T}_{\mathbf{x}^*}\mathcal{X}$ und fasst man diese als Spaltenvektoren in der Matrix $\mathbf{T}$ zusammen, z. B.

$$\mathbf{T} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \ , \tag{3.44}$$

dann kann die Matrix $\mathbf{L}$ von (3.42) gemäß (3.38) wie folgt

$$\mathbf{L}_{\mathcal{X}} = \mathbf{T}^{\mathrm{T}}\mathbf{L}\mathbf{T} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 3 \end{bmatrix} \tag{3.45}$$

in den Tangentialraum projiziert werden. Da die Matrix $\mathbf{L}_{\mathcal{X}}$ positiv definit ist, folgt aus Satz 3.6, dass der Punkt $\mathbf{x}^* = [1 \quad 0 \quad 0]^{\mathrm{T}}$ ein striktes lokales Minimum des beschränkten Optimierungsproblems (3.40) ist.

Angenommen der Punkt $\mathbf{x}^*$ ist eine Lösung des beschränkten Optimierungsproblems (3.16) mit dem zugehörigen Lagrange-Multiplikator $\boldsymbol{\lambda}^*$. Dann lässt sich $\boldsymbol{\lambda}^*$ wie folgt interpretieren.

Satz 3.7 (Sensitivitätstheorem des Lagrange-Multiplikators bei Gleichungsbeschränkungen)**.** *Für $f, g_1, \dots, g_p \in C^2$ betrachte man folgende Familie beschränkter Optimierungsprobleme*

$$\min_{\mathbf{x}\in\mathbb{R}^n} \quad f(\mathbf{x}) \tag{3.46a}$$

$$\text{u.B.v.} \quad \mathbf{g}(\mathbf{x}) = \mathbf{c}_g \tag{3.46b}$$

mit $\mathbf{c}_g \in \mathbb{R}^p$. Angenommen, für $\mathbf{c}_g = \mathbf{0}$ sei $\mathbf{x}^*$ ein regulärer Punkt und erfülle gemeinsam mit dem Lagrange-Multiplikator $\boldsymbol{\lambda}^*$ die hinreichenden Optimalitätsbedingungen zweiter Ordnung von Satz 3.6 für ein striktes lokales Minimum. Dann existiert für jedes $\mathbf{c}_g \in \mathbb{R}^p$ in einer Umgebung von $\mathbf{0}$ ein lokales Minimum des Optimierungsproblems (3.46) an einer Stelle $(\mathbf{x}(\mathbf{c}_g), \boldsymbol{\lambda}(\mathbf{c}_g))$, welche stetig von $\mathbf{c}_g$ abhängt mit $\mathbf{x}(\mathbf{0}) = \mathbf{x}^*$ und $\boldsymbol{\lambda}(\mathbf{0}) = \boldsymbol{\lambda}^*$. Ferner gilt die Beziehung

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\mathbf{c}_g} f(\mathbf{x}(\mathbf{c}_g))\bigg|_{\mathbf{c}_g=\mathbf{0}} = -(\boldsymbol{\lambda}^*)^{\mathrm{T}} \ . \tag{3.47}$$

Beweisskizze: Die notwendigen Optimalitätsbedingungen erster Ordnung für das Optimierungsproblem (3.46) lauten

$$(\nabla f)(\mathbf{x}) + (\nabla \mathbf{g})(\mathbf{x})\boldsymbol{\lambda} = \mathbf{0} \tag{3.48a}$$

$$\mathbf{g}(\mathbf{x}) = \mathbf{c}_g \ . \tag{3.48b}$$

Berechnet man die Jacobi-Matrix von (3.48) an der Stelle $(\mathbf{x}^*, \boldsymbol{\lambda}^*)$, also für $\mathbf{c}_g = \mathbf{0}$, dann erhält man (siehe auch (3.34))

$$\begin{bmatrix} (\nabla^2 L)(\mathbf{x}^*, \boldsymbol{\lambda}^*) & (\nabla \mathbf{g})(\mathbf{x}^*) \\ (\nabla \mathbf{g})^{\mathrm{T}}(\mathbf{x}^*) & \mathbf{0} \end{bmatrix} . \tag{3.49}$$

Da nach den Voraussetzungen von Satz 3.6 die Matrix $(\nabla^2 L)(\mathbf{x}^*, \boldsymbol{\lambda}^*)$ positiv definit auf $\mathcal{T}_{\mathbf{x}^*}\mathcal{X}$ sein muss (striktes lokales Minimum an der Stelle $\mathbf{x}^*$) und die Matrix $(\nabla \mathbf{g})(\mathbf{x}^*)$ spaltenregulär ist ($\mathbf{x}^*$ ist ein regulärer Punkt), ist die Jacobi-Matrix (3.49) regulär.

Aufgabe 3.5. Beweisen Sie diese Behauptung.

Mit Hilfe des Satzes über implizite Funktionen kann daraus geschlossen werden, dass $\mathbf{x}(\mathbf{c}_g)$ und $\boldsymbol{\lambda}(\mathbf{c}_g)$ stetig differenzierbare Funktionen in $\mathbf{c}_g$ sind.

Die Ableitung von (3.48b) nach $\mathbf{c}_g$ am Punkt $\mathbf{c}_g = \mathbf{0}$ liefert

$$\frac{\mathrm{d}\mathbf{g}(\mathbf{x}(\mathbf{c}_g))}{\mathrm{d}\mathbf{c}_g}\bigg|_{\mathbf{c}_g=\mathbf{0}} = (\nabla \mathbf{g})^{\mathrm{T}}(\mathbf{x}^*) \frac{\mathrm{d}\mathbf{x}}{\mathrm{d}\mathbf{c}_g}\bigg|_{\mathbf{c}_g=\mathbf{0}} = \mathbf{E}. \tag{3.50}$$

Wird die Transponierte von (3.48a) rechtsseitig mit $\frac{\mathrm{d}\mathbf{x}}{\mathrm{d}\mathbf{c}_g}$ multipliziert, so ergibt sich

am Punkt $\mathbf{c}_g = \mathbf{0}$

$$(\nabla f)^{\mathrm{T}}(\mathbf{x}^*)\left.\frac{\mathrm{d}\mathbf{x}}{\mathrm{d}\mathbf{c}_g}\right|_{\mathbf{c}_g=\mathbf{0}} + (\boldsymbol{\lambda}^*)^{\mathrm{T}}\underbrace{(\nabla \mathbf{g})^{\mathrm{T}}(\mathbf{x}^*)\left.\frac{\mathrm{d}\mathbf{x}}{\mathrm{d}\mathbf{c}_g}\right|_{\mathbf{c}_g=\mathbf{0}}}_{\mathbf{E}} = \mathbf{0}. \tag{3.51}$$

Gemeinsam mit (3.50) folgt daraus

$$\left.\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\mathbf{c}_g} f(\mathbf{x}(\mathbf{c}_g))\right|_{\mathbf{c}_g=\mathbf{0}} + (\boldsymbol{\lambda}^*)^{\mathrm{T}} = \mathbf{0} \tag{3.52}$$

und damit (3.47). □

3.1.2.2 Gleichungs- und Ungleichungsbeschränkungen

Ausgangspunkt der weiteren Betrachtungen ist das Optimierungsproblem mit Gleichungs- und Ungleichungsbeschränkungen (3.1) bzw. (3.2). In diesem Fall wird die Menge der Indizes aller am aktuellen Punkt $\mathbf{x}$ *aktiven* Ungleichungsbeschränkungen in der Form

$$J = J(\mathbf{x}) = \{j \in \mathbb{N} \,|\, 1 \leq j \leq q,\ h_j(\mathbf{x}) = 0\} \tag{3.53}$$

definiert. Wieder soll

$$\mathcal{X} = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \,|\, g_i(\mathbf{x}) = 0,\ i = 1, \ldots, p,\ h_j(\mathbf{x}) \leq 0,\ j = 1, \ldots, q\} \tag{3.54}$$

die *zulässige Menge* genannt werden. Ferner beschreibt

$$\bar{\mathcal{X}} = \bar{\mathcal{X}}(\mathbf{x}) = \{\bar{\mathbf{x}} \in \mathcal{X} \,|\, h_j(\bar{\mathbf{x}}) = 0,\ j \in J(\mathbf{x})\} \tag{3.55}$$

die durch die Gleichungs- und aktiven Ungleichungsbeschränkungen definierte Mannigfaltigkeit. Man beachte, dass J und $\bar{\mathcal{X}}$ vom aktuell betrachteten Punkt $\mathbf{x}$ abhängen.

Definition 3.3 (Regulärer Punkt bei Gleichungs- und Ungleichungsbeschränkungen, LICQ)**.** Ein zulässiger Punkt $\mathbf{x} \in \mathcal{X}$ der Optimierungsaufgabe (3.2) mit Gleichungs- und Ungleichungsbeschränkungen ist *regulär*, wenn die Gradientenvektoren $(\nabla g_i)(\mathbf{x})$, $i = 1, \ldots, p$ und $(\nabla h_j)(\mathbf{x})$, $j \in J$ mit J gemäß (3.53) linear unabhängig sind. D. h. die Bedingung

$$\operatorname{rang}\Big(\Big[[(\nabla g_i)(\mathbf{x})]_{i=1,\ldots,p} \quad [(\nabla h_j)(\mathbf{x})]_{j\in J}\Big]\Big) = p + |J|, \tag{3.56}$$

muss erfüllt sein, welche im Englischen auch als *linear independence constraint qualification (LICQ)* bekannt ist.

Satz 3.8 (Karush-Kuhn-Tucker (KKT) notwendige Optimalitätsbedingungen erster Ordnung)**.** *Angenommen,* $\mathbf{x}^*$ *sei ein lokales Minimum des Optimierungsproblems* (3.1)

bzw. (3.2)

$$\min_{\mathbf{x}\in\mathbb{R}^n} \quad f(\mathbf{x}) \tag{3.57a}$$
$$\text{u.B.v.} \quad g_i(\mathbf{x}) = 0, \quad i = 1,\dots,p \tag{3.57b}$$
$$h_i(\mathbf{x}) \leq 0, \quad i = 1,\dots,q \tag{3.57c}$$

mit $f, g_1, \dots, g_p, h_1, \dots, h_q \in C^1$. *Im Weiteren sei* $\mathbf{x}^*$ *ein regulärer Punkt der Beschränkungen* (3.57b) *und* (3.57c). *Dann existieren eindeutige Lagrange-Multiplikatoren* $((\boldsymbol{\lambda}^*)^{\mathrm{T}}, (\boldsymbol{\mu}^*)^{\mathrm{T}})$ *mit* $\boldsymbol{\lambda}^* \in \mathbb{R}^p$ *und* $\boldsymbol{\mu}^* \in \mathbb{R}^q$ *so, dass die Bedingungen*

$$(\nabla f)(\mathbf{x}^*) + (\nabla \mathbf{g})(\mathbf{x}^*)\boldsymbol{\lambda}^* + (\nabla \mathbf{h})(\mathbf{x}^*)\boldsymbol{\mu}^* = \mathbf{0} \tag{3.58a}$$
$$\boldsymbol{\mu}^* \geq \mathbf{0} \tag{3.58b}$$
$$\mathbf{h}^{\mathrm{T}}(\mathbf{x}^*)\boldsymbol{\mu}^* = 0 \tag{3.58c}$$

mit den Jacobi-Matrizen $(\nabla \mathbf{g})(\mathbf{x}^*) = \begin{bmatrix}(\nabla g_1)(\mathbf{x}^*) & \dots & (\nabla g_p)(\mathbf{x}^*)\end{bmatrix}$ *und* $(\nabla \mathbf{h})(\mathbf{x}^*) = \begin{bmatrix}(\nabla h_1)(\mathbf{x}^*) & \dots & (\nabla h_q)(\mathbf{x}^*)\end{bmatrix}$ *erfüllt sind.*

Beweisskizze: Da $\boldsymbol{\mu}^* \geq \mathbf{0}$ und $\mathbf{h}(\mathbf{x}^*) \leq \mathbf{0}$ folgt aus (3.58c), dass eine Komponente μ_j^* von $\boldsymbol{\mu}^*$ nur dann von Null verschieden sein kann, wenn die zugehörige Ungleichungsbedingung aktiv ist, d. h. $h_j(\mathbf{x}^*) = 0$ gilt. Diese so genannte *complementary slackness condition* hat zur Folge, dass $h_j(\mathbf{x}^*) < 0$ stets $\mu_j^* = 0$ und $\mu_j^* > 0$ stets $h_j(\mathbf{x}^*) = 0$ impliziert.

Da $\mathbf{x}^*$ ein lokales Minimum des beschränkten Optimierungsproblems (3.57) beschreibt, ist es auch ein lokales Minimum für jenes Optimierungsproblem, bei dem alle aktiven Ungleichungsbeschränkungen durch Gleichungsbeschränkungen ersetzt werden. Dann gibt (3.58a) mit $\mu_j^* = 0$ falls $h_j(\mathbf{x}^*) < 0$ exakt die Bedingung (3.23) des bei gleichungsbeschränkten Problemen anwendbaren Satzes 3.4 wieder.

Um zu zeigen, dass $\boldsymbol{\mu}^* \geq \mathbf{0}$ gelten muss, schreibt man (3.57c) in

$$\mathbf{h}(\mathbf{x}) \leq \mathbf{c}_h \leq \mathbf{0}$$

mit $\mathbf{c}_h \in \mathbb{R}^q$ um, wobei am optimalen Punkt $\mathbf{c}_h = \mathbf{0}$ gelten soll. Ähnlich zum Beweis von Satz 3.7 (siehe auch Satz 3.11) folgt, dass $\mathbf{x}(\mathbf{c}_h)$, $\boldsymbol{\lambda}(\mathbf{c}_h)$ und $\boldsymbol{\mu}(\mathbf{c}_h)$ stetig differenzierbare Funktionen von $\mathbf{c}_h$ sind und

$$(\boldsymbol{\mu}^*)^{\mathrm{T}} = -\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\mathbf{c}_h} f(\mathbf{x}(\mathbf{c}_h))\bigg|_{\mathbf{c}_h=\mathbf{0}}$$

gilt. Hierbei gilt $\mu_j^* = 0 \;\forall\, j \in \{1,\dots,q\}\backslash J$, d. h. für alle inaktiven Ungleichungsbeschränkungen $h_j(\mathbf{x}^*) < 0$. Die Entwicklung von f in eine Taylorreihe um den

optimalen Punkt liefert

$$f(\mathbf{x}(\mathbf{c}_h)) = f(\mathbf{x}(\mathbf{0})) + \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\mathbf{c}_h} f(\mathbf{x}(\mathbf{c}_h))\Big|_{\mathbf{c}_h=\mathbf{0}} \mathbf{c}_h + \mathcal{O}(\mathbf{c}_h^2) = f(\mathbf{x}(\mathbf{0})) - \boldsymbol{\mu}^* \mathbf{c}_h + \mathcal{O}(\mathbf{c}_h^2) \ .$$

Aus diesem Ergebnis folgt $\boldsymbol{\mu}^* \geq \mathbf{0}$, da $\mathbf{c}_h \leq \mathbf{0}$ und da wegen der Optimalität von $\mathbf{x}(\mathbf{0})$ die Ungleichung $f(\mathbf{x}(\mathbf{0})) \leq f(\mathbf{x}(\mathbf{c}_h))$ zumindest für $\mathbf{c}_h \to \mathbf{0}^-$ erfüllt sein muss.

□

Man beachte, dass *nicht* jedes lokale Minimum die KKT-Bedingungen (3.58) erfüllt. Dies ist nur der Fall, wenn die Beschränkungen (3.57b) und (3.57c) gewisse Voraussetzungen erfüllen, die im Englischen auch als *constraint qualification (CQ)* bezeichnet werden, vgl. [3.1–3.3]. Diese Voraussetzungen sind jedenfalls erfüllt, wenn $\mathbf{x}^*$ ein regulärer Punkt gemäß Definition 3.3 ist, d. h. wenn die LICQ Bedingung erfüllt ist. Diese garantiert, dass die Lagrange-Multiplikatoren $((\boldsymbol{\lambda}^*)^\mathrm{T}, (\boldsymbol{\mu}^*)^\mathrm{T})$ *eindeutig* sind. Es existieren auch andere CQ Bedingungen, die diese Eindeutigkeit nicht garantieren.

Ein Problem bei der Berechnung von $\mathbf{x}^*$ gemäß Satz 3.8 ist, dass man *a priori* nicht weiß, welche Ungleichungsbeschränkungen aktiv sind. Eigentlich müssten sämtliche Kombinationen aktiver und inaktiver Ungleichungsbeschränkungen überprüft werden, um mögliche (lokale) Minima zu finden. Das nachfolgende Beispiel zeigt dies für eine einfache Optimierungsaufgabe.

Beispiel 3.4. Man betrachte das Optimierungsproblem (3.1) mit zwei Ungleichungsbeschränkungen in der Form

$$\begin{aligned}
\min_{\mathbf{x}\in\mathbb{R}^3} \quad & f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2) && \text{(3.59a)}\\
\text{u.B.v.} \quad & h_1(\mathbf{x}) = x_1 + x_2 + x_3 + 3 \leq 0 && \text{(3.59b)}\\
& h_2(\mathbf{x}) = x_1 \leq 0 \ . && \text{(3.59c)}
\end{aligned}$$

Mit $(\nabla h_1)(\mathbf{x}) = [1 \quad 1 \quad 1]^\mathrm{T}$ und $(\nabla h_2)(\mathbf{x}) = [1 \quad 0 \quad 0]^\mathrm{T}$ erkennt man, dass jeder zulässige Punkt ein regulärer Punkt ist. Die KKT-Bedingungen (3.58) lauten in diesem Fall

$$\underbrace{\begin{bmatrix} x_1^* \\ x_2^* \\ x_3^* \end{bmatrix}}_{(\nabla f)(\mathbf{x}^*)} + \underbrace{\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}}_{(\nabla h_1)(\mathbf{x}^*)} \mu_1^* + \underbrace{\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}}_{(\nabla h_2)(\mathbf{x}^*)} \mu_2^* = \mathbf{0} \qquad \text{(3.60a)}$$

$$\begin{aligned}
\mu_1^* &\geq 0 && \text{(3.60b)}\\
\mu_2^* &\geq 0 && \text{(3.60c)}\\
\mu_1^*(x_1^* + x_2^* + x_3^* + 3) + \mu_2^* x_1^* &= 0 && \text{(3.60d)}\\
x_1^* + x_2^* + x_3^* + 3 &\leq 0 && \text{(3.60e)}\\
x_1^* &\leq 0. && \text{(3.60f)}
\end{aligned}$$

Nun können vier Fälle unterschieden werden.

a) Beide Ungleichungsbeschränkungen sind inaktiv, d. h. $h_1(\mathbf{x}^*) = x_1^* + x_2^* + x_3^* + 3 < 0$ und $h_2(\mathbf{x}^*) = x_1^* < 0$. Damit folgt $\mu_1^* = \mu_2^* = 0$ und $x_1^* = x_2^* = x_3^* = 0$ wäre die einzige Lösung, die aber nicht zulässig ist, da sie die Ungleichungsbedingung $h_1(\mathbf{x}^*)$ verletzt.

b) Die Ungleichungsbeschränkung $h_1(\mathbf{x}^*)$ ist inaktiv und $h_2(\mathbf{x}^*)$ ist aktiv, d. h. $h_1(\mathbf{x}^*) = x_1^* + x_2^* + x_3^* + 3 < 0$, $h_2(\mathbf{x}^*) = x_1^* = 0$, $\mu_1^* = 0$ und $\mu_2^* > 0$. Die Lösung $x_2^* = x_3^* = 0$ ist wiederum kein zulässiger Punkt.

c) Die Ungleichungsbeschränkung $h_1(\mathbf{x}^*)$ ist aktiv und $h_2(\mathbf{x}^*)$ ist inaktiv, d. h. $h_1(\mathbf{x}^*) = x_1^* + x_2^* + x_3^* + 3 = 0$, $h_2(\mathbf{x}^*) = x_1^* < 0$, $\mu_1^* > 0$ und $\mu_2^* = 0$. Die Lösung $x_1^* = x_2^* = x_3^* = -1$ und $\mu_1^* = 1$, $\mu_2^* = 0$ ist damit ein zulässiger Kandidat für ein (lokales) Minimum.

d) Beide Ungleichungsbeschränkungen sind aktiv, d. h. $h_1(\mathbf{x}^*) = x_1^* + x_2^* + x_3^* + 3 = 0$, $h_2(\mathbf{x}^*) = x_1^* = 0$, $\mu_1^* > 0$ und $\mu_2^* > 0$. Da wegen $x_1^* = 0$ die Beziehung $\mu_1^* = -\mu_2^*$ gelten muss, widerspricht dies der Forderung $\mu_1^* > 0$ und $\mu_2^* > 0$.

Ob es sich nun beim Punkt $x_1^* = x_2^* = x_3^* = -1$ tatsächlich um ein (lokales) Minimum handelt, kann basierend auf den nächsten Sätzen geklärt werden.

Satz 3.9 (KKT notwendige Optimalitätsbedingungen zweiter Ordnung)**.** *Angenommen,* $\mathbf{x}^*$ *sei ein lokales Minimum des Optimierungsproblems* (3.1) *bzw.* (3.2)

$$\min_{\mathbf{x}\in\mathbb{R}^n} \quad f(\mathbf{x}) \tag{3.61a}$$

$$\text{u.B.v.} \quad g_i(\mathbf{x}) = 0, \quad i = 1, \dots, p \tag{3.61b}$$

$$h_i(\mathbf{x}) \leq 0, \quad i = 1, \dots, q \tag{3.61c}$$

mit $f, g_1, \dots, g_p, h_1, \dots, h_q \in C^2$*. Im Weiteren sei* $\mathbf{x}^*$ *ein regulärer Punkt der Beschränkungen* (3.61b) *und* (3.61c)*. Dann existieren eindeutige Lagrange-Multiplikatoren* $((\boldsymbol{\lambda}^*)^{\mathrm{T}}, (\boldsymbol{\mu}^*)^{\mathrm{T}})$ *mit* $\boldsymbol{\lambda}^* \in \mathbb{R}^p$ *und* $\boldsymbol{\mu}^* \in \mathbb{R}^q$ *so, dass die Bedingungen*

$$(\nabla f)(\mathbf{x}^*) + (\nabla \mathbf{g})(\mathbf{x}^*)\boldsymbol{\lambda}^* + (\nabla \mathbf{h})(\mathbf{x}^*)\boldsymbol{\mu}^* = \mathbf{0} \tag{3.62a}$$

$$\boldsymbol{\mu}^* \geq \mathbf{0} \tag{3.62b}$$

$$\mathbf{h}^{\mathrm{T}}(\mathbf{x}^*)\boldsymbol{\mu}^* = 0 \tag{3.62c}$$

mit den Jacobi-Matrizen $(\nabla \mathbf{g})(\mathbf{x}^*) = \begin{bmatrix}(\nabla g_1)(\mathbf{x}^*) & \dots & (\nabla g_p)(\mathbf{x}^*)\end{bmatrix}$ *und* $(\nabla \mathbf{h})(\mathbf{x}^*) = \begin{bmatrix}(\nabla h_1)(\mathbf{x}^*) & \dots & (\nabla h_q)(\mathbf{x}^*)\end{bmatrix}$ *erfüllt sind und*

$$\mathbf{d}^{\mathrm{T}} \underbrace{\left(\left(\nabla^2 f\right)(\mathbf{x}^*) + \sum_{i=1}^{p} \lambda_i^* \left(\nabla^2 g_i\right)(\mathbf{x}^*) + \sum_{j=1}^{q} \mu_j^* \left(\nabla^2 h_j\right)(\mathbf{x}^*) \right)}_{(\nabla^2 L)(\mathbf{x}^*, \boldsymbol{\lambda}^*, \boldsymbol{\mu}^*)} \mathbf{d} \geq 0 \tag{3.63}$$

für alle $\mathbf{d} \in \mathcal{T}_{\mathbf{x}^*}\bar{\mathcal{X}}$ *mit* $\bar{\mathcal{X}} = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \,|\, g_i(\mathbf{x}) = 0, i = 1, \dots, p,\ h_j(\mathbf{x}) = 0,\ j \in J\}$ *und der Lagrangefunktion* $L(\mathbf{x}^*, \boldsymbol{\lambda}^*, \boldsymbol{\mu}^*) = f(\mathbf{x}^*) + (\boldsymbol{\lambda}^*)^{\mathrm{T}}\mathbf{g}(\mathbf{x}^*) + (\boldsymbol{\mu}^*)^{\mathrm{T}}\mathbf{h}(\mathbf{x}^*)$ *gilt. Mit* J *wird dabei wieder die Menge der Indizes der am Punkt* $\mathbf{x}^*$ *aktiven Ungleichungsbeschränkungen bezeichnet, d. h. es gilt* $h_j(\mathbf{x}^*) = 0,\ j \in J$.

Satz 3.10 (KKT hinreichende Optimalitätsbedingungen zweiter Ordnung)**.** *Gesucht ist das (lokale) Minimum des Optimierungsproblems* (3.1) *bzw.* (3.2)

$$\begin{aligned} \min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \quad & f(\mathbf{x}) && && \text{(3.64a)} \\ \text{u.B.v.} \quad & g_i(\mathbf{x}) = 0, && i = 1, \dots, p && \text{(3.64b)} \\ & h_i(\mathbf{x}) \leq 0, && i = 1, \dots, q && \text{(3.64c)} \end{aligned}$$

mit $f, g_1, \dots, g_p, h_1, \dots, h_q \in C^2$. *Wenn für einen regulären Punkt* $\mathbf{x}^*$ *der Beschränkungen* (3.64b) *und* (3.64c)*, Größen* $\mathbf{x}^* \in \mathbb{R}^n$, $\boldsymbol{\lambda}^* \in \mathbb{R}^p$ *und* $\boldsymbol{\mu}^* \in \mathbb{R}^q$ *so existieren, dass gilt*

$$(\nabla f)(\mathbf{x}^*) + (\nabla \mathbf{g})(\mathbf{x}^*)\boldsymbol{\lambda}^* + (\nabla \mathbf{h})(\mathbf{x}^*)\boldsymbol{\mu}^* = \mathbf{0} \tag{3.65a}$$

$$\boldsymbol{\mu}^* \geq \mathbf{0} \tag{3.65b}$$

$$\mathbf{h}^{\mathrm{T}}(\mathbf{x}^*)\boldsymbol{\mu}^* = 0 \tag{3.65c}$$

mit den Jacobi-Matrizen $(\nabla \mathbf{g})(\mathbf{x}^*) = \begin{bmatrix}(\nabla g_1)(\mathbf{x}^*) & \dots & (\nabla g_p)(\mathbf{x}^*)\end{bmatrix}$ *und* $(\nabla \mathbf{h})(\mathbf{x}^*) = \begin{bmatrix}(\nabla h_1)(\mathbf{x}^*) & \dots & (\nabla h_q)(\mathbf{x}^*)\end{bmatrix}$ *und*

$$\mathbf{d}^{\mathrm{T}} \underbrace{\left(\left(\nabla^2 f\right)(\mathbf{x}^*) + \sum_{i=1}^{p} \lambda_i^* \left(\nabla^2 g_i\right)(\mathbf{x}^*) + \sum_{j=1}^{q} \mu_j^* \left(\nabla^2 h_j\right)(\mathbf{x}^*) \right)}_{(\nabla^2 L)(\mathbf{x}^*, \boldsymbol{\lambda}^*, \boldsymbol{\mu}^*)} \mathbf{d} > 0 \tag{3.66}$$

für alle $\mathbf{d} \in \mathcal{T}_{\mathbf{x}^*}\bar{\mathcal{X}}$, $\mathbf{d} \neq \mathbf{0}$ *und* $\bar{\mathcal{X}} = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \,|\, g_i(\mathbf{x}) = 0, i = 1, \dots, p,\ h_j(\mathbf{x}) = 0,\ j \in J\}$ *sowie der Lagrangefunktion* $L(\mathbf{x}^*, \boldsymbol{\lambda}^*, \boldsymbol{\mu}^*) = f(\mathbf{x}^*) + (\boldsymbol{\lambda}^*)^{\mathrm{T}}\mathbf{g}(\mathbf{x}^*) + (\boldsymbol{\mu}^*)^{\mathrm{T}}\mathbf{h}(\mathbf{x}^*)$, *dann ist* $\mathbf{x}^*$ *ein striktes (lokales) Minimum. Mit* J *wird dabei wieder die Menge der Indizes der am Punkt* $\mathbf{x}^*$ *aktiven Ungleichungsbeschränkungen bezeichnet, d. h. es gilt* $h_j(\mathbf{x}^*) = 0,\ j \in J$.

Aufgabe 3.6. Zeigen Sie, dass der Punkt $x_1^* = x_2^* = x_3^* = -1$ von Beispiel 3.4 ein globales Minimum ist.

Angenommen der Punkt $\mathbf{x}^*$ ist eine Lösung des beschränkten Optimierungsproblems (3.2). Dann können die Lagrange-Multiplikatoren $\boldsymbol{\lambda}^*$ und $\boldsymbol{\mu}^*$ wieder als Sensitivitäten des Kostenfunktionswerts am optimalen Punkt bezüglich einer Änderung der Beschränkungen interpretieren werden.

Satz 3.11 (Sensitivitätstheorem der Lagrange-Multiplikatoren bei Gleichungs- und Ungleichungsbeschränkungen)**.** *Für $f, g_1, \dots, g_p, h_1, \dots, h_q \in C^2$ betrachte man folgende Familie beschränkter Optimierungsprobleme*

$$\min_{\mathbf{x}\in\mathbb{R}^n} \quad f(\mathbf{x}) \tag{3.67a}$$
$$\text{u.B.v.} \quad \mathbf{g}(\mathbf{x}) = \mathbf{c}_g \tag{3.67b}$$
$$\mathbf{h}(\mathbf{x}) \leq \mathbf{c}_h \tag{3.67c}$$

mit $\mathbf{c}_g \in \mathbb{R}^p$ und $\mathbf{c}_h \in \mathbb{R}^q$. Angenommen, für $\mathbf{c}_g = \mathbf{0}$ und $\mathbf{c}_h = \mathbf{0}$ sei $\mathbf{x}^*$ ein regulärer Punkt und erfülle gemeinsam mit den Lagrange-Multiplikatoren $\boldsymbol{\lambda}^*$ und $\boldsymbol{\mu}^*$ die hinreichenden Optimalitätsbedingungen zweiter Ordnung von Satz 3.10 für ein striktes lokales Minimum. Dann existiert für jedes Paar $(\mathbf{c}_g, \mathbf{c}_h) \in \mathbb{R}^{p+q}$ in einer Umgebung von $(\mathbf{0}, \mathbf{0})$, in der J konstant ist, ein lokales Minimum des Optimierungsproblems (3.67) an einer Stelle $(\mathbf{x}(\mathbf{c}_g, \mathbf{c}_h), \boldsymbol{\lambda}(\mathbf{c}_g, \mathbf{c}_h), \boldsymbol{\mu}(\mathbf{c}_g, \mathbf{c}_h))$, welche stetig von $(\mathbf{c}_g, \mathbf{c}_h)$ abhängt mit $\mathbf{x}(\mathbf{0}, \mathbf{0}) = \mathbf{x}^*$, $\boldsymbol{\lambda}(\mathbf{0}, \mathbf{0}) = \boldsymbol{\lambda}^*$ und $\boldsymbol{\mu}(\mathbf{0}, \mathbf{0}) = \boldsymbol{\mu}^*$. Ferner gelten die Beziehungen

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\mathbf{c}_g} f(\mathbf{x}(\mathbf{c}_g, \mathbf{c}_h))\bigg|_{\mathbf{c}_g=\mathbf{0}, \mathbf{c}_h=\mathbf{0}} = -(\boldsymbol{\lambda}^*)^{\mathrm{T}} \tag{3.68a}$$
$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\mathbf{c}_h} f(\mathbf{x}(\mathbf{c}_g, \mathbf{c}_h))\bigg|_{\mathbf{c}_g=\mathbf{0}, \mathbf{c}_h=\mathbf{0}} = -(\boldsymbol{\mu}^*)^{\mathrm{T}} \ . \tag{3.68b}$$

Aufgabe 3.7. Beweisen Sie Satz 3.11. **Hinweis:** Orientieren Sie sich dabei am Beweis von Satz 3.7.

Man beachte, dass Satz 3.11 nur in einer solchen Umgebung von $(\mathbf{c}_g, \mathbf{c}_h) = (\mathbf{0}, \mathbf{0})$ gilt, in der J, die Menge der Indizes der aktiven Ungleichungsbeschränkungen, konstant ist. Wie es sein muss, folgt aus Satz 3.11 $\mu_i^* = 0 \ \forall\, i \in \{1, \dots, q\} \backslash J$.

3.2 Rechnergestützte Optimierungsverfahren

Als Ausgangspunkt betrachte man wiederum das beschränkte Optimierungsproblem (3.2)

$$\min_{\mathbf{x}\in\mathbb{R}^n} \quad f(\mathbf{x}) \tag{3.69a}$$
$$\text{u.B.v.} \quad \mathbf{g}(\mathbf{x}) = \mathbf{0} \tag{3.69b}$$
$$\mathbf{h}(\mathbf{x}) \leq \mathbf{0} \tag{3.69c}$$

mit p Gleichungsbeschränkungen $g_1(\mathbf{x}), \ldots, g_p(\mathbf{x})$, q Ungleichungsbeschränkungen $h_1(\mathbf{x})$, $\ldots, h_q(\mathbf{x})$ und n Optimierungsvariablen $x_1, \ldots, x_n$. Da die Bestimmung eines (lokal) optimalen Punktes $\mathbf{x}^*$ von (3.69) durch analytische Lösung von Optimalitätsbedingungen (nichtlineare Gleichungen sowie Ungleichungen in $\mathbf{x}^*$, $\boldsymbol{\lambda}^*$ und $\boldsymbol{\mu}^*$) in vielen Fällen nicht möglich ist, ist man im Allgemeinen auf *numerische Verfahren* zur Suche von $\mathbf{x}^*$ angewiesen. Einen Überblick über einige dieser Verfahren gibt der aktuelle Abschnitt.

Zur Lösung des Problems (3.69) können im Rahmen der *Methode der aktiven Beschränkungen* aktive und inaktive Ungleichungsbeschränkungen unterschiedlich behandelt werden. Mit der *Gradienten-Projektionsmethode* und der *reduzierten Gradientenmethode* wird während der iterativen Lösungssuche eine Fortbewegung im zulässigen Gebiet sichergestellt. Alternativ kann das Problem auch durch *sequentielle quadratische Programmierung* gelöst werden, wobei hier die Optimierungsaufgabe durch eine Folge von quadratischen Programmen approximiert wird. Es besteht ferner die Möglichkeit, das beschränkte Optimierungsproblem mit Hilfe von so genannten *Straf-* bzw. *Barrierefunktionen* in ein unbeschränktes Optimierungsproblem zu transformieren.

3.2.1 Methode der aktiven Beschränkungen

Ohne Einschränkung der Allgemeinheit sei für die folgenden Betrachtungen angenommen, dass keine Gleichungsbeschränkungen vorhanden sind. Aus Satz 3.8 weiß man, dass die notwendigen Optimalitätsbedingungen für ein lokales Minimum durch

$$(\nabla f)(\mathbf{x}^*) + (\nabla \mathbf{h})(\mathbf{x}^*)\boldsymbol{\mu}^* = \mathbf{0} \tag{3.70a}$$
$$h_i(\mathbf{x}^*) = 0, \qquad i \in J \tag{3.70b}$$
$$h_i(\mathbf{x}^*) < 0, \qquad i \in \{1, \ldots, q\} \backslash J \tag{3.70c}$$
$$\mu_i^* \geq 0, \qquad i \in J \tag{3.70d}$$
$$\mu_i^* = 0, \qquad i \in \{1, \ldots, q\} \backslash J \tag{3.70e}$$

gegeben sind. Mit J wird dabei wieder die Menge der Indizes der am Punkt $\mathbf{x}^*$ aktiven Ungleichungsbeschränkungen bezeichnet. Wenn man nun das beschränkte Optimierungsproblem für eine angenommene Menge der aktiven Ungleichungsbeschränkungen löst und diese Lösung die nichtaktiven Ungleichungsbeschränkungen erfüllt sowie ausschließlich nichtnegative Lagrange-Multiplikatoren μ_i^* beinhaltet, dann kann die Lösung als Kandidat für das Minimum angesehen werden.

Die Idee der Methode der aktiven Beschränkungen (englisch: *active set method*) beruht darauf, in jedem Iterationsschritt eine *Arbeitsmenge* festzulegen, welche die am aktuellen Iterationspunkt $\mathbf{x}_k$ aktiven Ungleichungsbeschränkungen beinhaltet. Sind Gleichungsbeschränkungen vorhanden, können diese auf analoge Art und Weise in der Arbeitsmenge berücksichtigt werden. Der aktuelle Iterationspunkt $\mathbf{x}_k$ ist daher zulässig im Hinblick auf die Arbeitsmenge. Um zum nächsten Iterationspunkt $\mathbf{x}_{k+1}$ zu gelangen, erfolgt eine Bewegung entlang der durch die Arbeitsmenge definierten Mannigfaltigkeit. Ziel ist es, so zu einem hinsichtlich der Kostenfunktion verbesserten Punkt zu gelangen. Die verschiedenen Verfahren unterscheiden sich dadurch, wie die Bewegung entlang der Mannigfaltigkeit, die durch die Arbeitsmenge definiert ist, erfolgt, wobei dies auch wesentlich das Konvergenzverhalten des Verfahrens bestimmt.

Angenommen, W bezeichne die Arbeitsmenge, also die Indexmenge der aktiven Ungleichungsbeschränkungen zu einem Iterationsschritt. Dann besteht die Aufgabe in diesem Iterationsschritt darin, für das Optimierungsproblem

$$\min_{\mathbf{x}\in\mathbb{R}^n} \quad f(\mathbf{x}) \qquad \text{Kostenfunktion} \tag{3.71a}$$

$$\text{u.B.v.} \quad h_i(\mathbf{x}) = 0, \quad i \in W \qquad \text{angenommene aktive Ungleichungsbeschr.} \tag{3.71b}$$

eine Lösung $\mathbf{x}_W^*$ zu finden, für die gilt $h_i(\mathbf{x}_W^*) < 0$ für alle $i \in \{1,\dots,q\}\backslash W$. Dazu löse man das Gleichungssystem

$$(\nabla f)(\mathbf{x}_W^*) + \sum_{i\in W} \mu_{i,W}^* (\nabla h_i)(\mathbf{x}_W^*) = \mathbf{0} \tag{3.72a}$$

$$h_i(\mathbf{x}_W^*) = 0, \quad i \in W \tag{3.72b}$$

nach $\mathbf{x}_W^*$ und $\mu_{i,W}^*,\ i \in W$. Wenn nun $\mu_{i,W}^* \geq 0$ für alle $i \in W$, dann ist $\mathbf{x}_W^*$ eine mögliche lokale Lösung des beschränkten Optimierungsproblems. Existiert hingegegen ein $k \in W$, für das gilt $\mu_{k,W}^* < 0$, dann kann die Kostenfunktion weiter reduziert werden, indem die Beschränkung $h_k(\mathbf{x})$ inaktiv gesetzt wird, d. h. der Index k wird aus der Indexmenge W entfernt. Dies folgt unmittelbar aus dem Beweis von Satz 3.8, denn wenn statt der aktiven Ungleichungsbeschränkung $h_k(\mathbf{x}) = 0$ die Gleichungsbeschränkung $h_k(\mathbf{x}) = c_h$ mit einem kleinen Wert $c_h < 0$ verwendet wird, d. h. $\mathbf{x}$ wird vom Rand in das Innere des Gebietes der Ungleichungsbeschränkung $h_k(\mathbf{x}) < 0$ bewegt, dann ändert sich für $\mu_{k,W}^* < 0$ und $\mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_W^*$ die Kostenfunktion in der Form

$$f(\mathbf{x}(c_h)) \approx f(\mathbf{x}_W^*) + \underbrace{\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}c_h} f(\mathbf{x}(c_h))\Big|_{c_h=0}}_{-\mu_{k,W}^* > 0} \underbrace{c_h}_{<0} < f(\mathbf{x}_W^*)\ . \tag{3.73}$$

Dies zeigt also, dass durch eine Bewegung in das Innere des Gebietes der Ungleichungsbeschränkung $h_k(\mathbf{x}) < 0$ die Kostenfunktion weiter minimiert werden kann. Abbildung 3.3 veranschaulicht diesen Sachverhalt grafisch für die Ungleichungsbeschränkung $h_1(\mathbf{x}) \leq 0$.

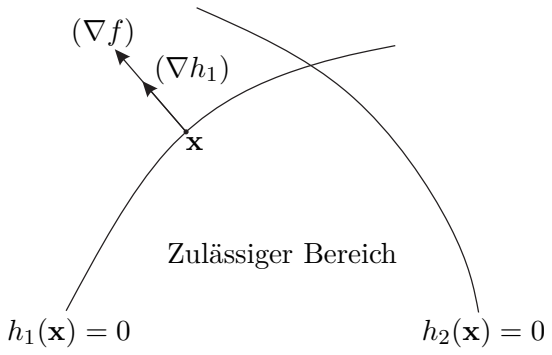


Abbildung 3.3: Zur Deaktivierung von Ungleichungsbeschränkungen.

Natürlich kann es umgekehrt passieren, dass durch die iterative Lösung des beschränkten Optimierungsproblems eine in der Arbeitsmenge als inaktiv erachtete Ungleichungsbeschränkung verletzt wird, d. h. es existiert ein $k \in \{1,\dots,q\}\backslash W$ so, dass $h_k(\mathbf{x}_W^*) > 0$. In

diesem Fall muss die Indexmenge W um den Index k dieser Ungleichungsbeschränkung erweitert werden.

Der nachfolgende Satz liefert eine Aussage zur Konvergenz der Methode der aktiven Beschränkungen.

Satz 3.12 (Konvergenz der Methode der aktiven Beschränkungen)**.** *Angenommen, für aufeinanderfolgende Arbeitsmengen W ist das Optimierungsproblem (3.71) wohldefiniert und hat eine eindeutige nichtdegenerierte Lösung (d. h. für alle $i \in W$, $\mu^*_{i,W} \neq 0$), dann konvergiert die Methode der aktiven Beschränkungen gegen die Lösung des zugrundeliegenden beschränkten Optimierungsproblems.*

Eine Schwierigkeit in der praktischen Anwendung ist, dass die Iterationslösungen exakte Lösungen des unterlagerten Minimierungsproblems sein müssen, da ansonsten Vorzeichen der Lagrange-Multiplikatoren falsch sein können. Ferner muss verhindert werden, dass zwischen gleichen Arbeitsmengen wiederkehrend hin- und hergesprungen wird. Dazu gibt es erweiterte Strategien, die sich mehr oder weniger von dem vorgestellten Basisalgorithmus unterscheiden.

3.2.2 Gradienten-Projektionsmethode

Die Grundidee dieser Methode ist es, die Lösung iterativ entlang jener Mannigfaltigkeit zu suchen, die durch die jeweilige Arbeitsmenge definiert ist. Als Suchrichtung wird der in den Tangentialraum der Mannigfaltigkeit projizierte negative Gradient der Kostenfunktion verwendet.

3.2.2.1 Lineare Beschränkungen

Es wird zunächst das Optimierungsproblem

$$\min_{\mathbf{x}\in\mathbb{R}^n} \quad f(\mathbf{x}) \tag{3.74a}$$

$$\text{u.B.v.} \quad g_i(\mathbf{x}) = \mathbf{a}_{g,i}^{\mathrm{T}}\mathbf{x} - b_{g,i} = 0, \qquad i = 1,\dots,p \tag{3.74b}$$

$$h_i(\mathbf{x}) = \mathbf{a}_{h,i}^{\mathrm{T}}\mathbf{x} - b_{h,i} \leq 0, \qquad i = 1,\dots,q \tag{3.74c}$$

mit linearen Gleichungs- und Ungleichungsbeschränkungen betrachtet. Zu einem Iterationsschritt k sei $\mathbf{x}_k$ der aktuell gefundene Punkt. Es wird angenommen, dass an diesem Punkt in Summe $\bar{p} = p + |W| < n$ Gleichungs- und Ungleichungsbeschränkungen aktiv sind, wobei W die aktuelle Arbeitsmenge ist. Die Gleichungs- und aktiven Ungleichungsbeschränkungen werden im Vektor

$$\bar{\mathbf{g}}(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} [g_i(\mathbf{x})]_{i=1,\dots,p} \\ [h_i(\mathbf{x})]_{i\in W} \end{bmatrix}, \tag{3.75}$$

zusammengefasst, dessen (konstante) Jacobi-Matrix mit

$$\mathbf{A} = (\nabla\bar{\mathbf{g}})(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} [\mathbf{a}_{g,i}]_{i=1,\dots,p} & [\mathbf{a}_{h,i}]_{i\in W} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n\times\bar{p}} \tag{3.76}$$

abgekürzt wird. Folglich wird der Tangentialraum der durch die aktuell aktiven Beschränkungen definierten Mannigfaltigkeit $\bar{\mathcal{X}} = \{\mathbf{x} \in \mathcal{X} \,|\, \bar{\mathbf{g}}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}\}$ von den Vektoren des Nullraums $\text{Kern}(\mathbf{A}^{\mathrm{T}})$ aufgespannt, d. h.

$$\mathcal{T}_{\mathbf{x}_k}\bar{\mathcal{X}} = \mathcal{T}\bar{\mathcal{X}} = \{\mathbf{d} \in \mathbb{R}^n \,|\, \mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{d} = \mathbf{0}\} \tag{3.77}$$

(vgl. auch (3.19)). Da die Erfüllung der LICQ Bedingung vorausgesetzt wird, ist die Matrix $\mathbf{A}$ spaltenregulär, d. h. $\text{rang}(\mathbf{A}) = \bar{p}$, und es gilt $\dim(\text{Kern}(\mathbf{A}^{\mathrm{T}})) = n - \bar{p}$. Der Gradient $(\nabla f)(\mathbf{x}_k)$ im Iterationsschritt k steht nun im Allgemeinen nicht orthogonal auf $\mathcal{T}\bar{\mathcal{X}}$. Aufgrund von $\mathbb{R}^n = \text{Kern}(\mathbf{A}^{\mathrm{T}}) \oplus \text{Bild}(\mathbf{A})$ mit $\text{Bild}(\mathbf{A})$ als dem Bild von $\mathbf{A}$ lässt sich der negative Gradient $-(\nabla f)(\mathbf{x}_k)$ immer in der Form

$$-(\nabla f)(\mathbf{x}_k) = \mathbf{d}_k + \mathbf{A}\boldsymbol{\sigma}_k \tag{3.78}$$

für geeignete $\mathbf{d}_k \in \mathcal{T}\bar{\mathcal{X}}$ und $\boldsymbol{\sigma}_k \in \mathbb{R}^{\bar{p}}$ anschreiben. Wird (3.78) linksseitig mit $\mathbf{A}^{\mathrm{T}}$ multipliziert, so ergibt sich aufgrund der Spaltenregularität von $\mathbf{A}$ die Beziehung

$$\boldsymbol{\sigma}_k = -\Big(\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{A}\Big)^{-1}\mathbf{A}^{\mathrm{T}}(\nabla f)(\mathbf{x}_k) \; . \tag{3.79}$$

Einsetzen von (3.79) in (3.78) führt auf den projizierten Gradient $\mathbf{d}_k$ in der Form

$$\mathbf{d}_k = -\mathbf{P}_k(\nabla f)(\mathbf{x}_k) \quad \text{mit} \quad \mathbf{P}_k = \mathbf{E} - \mathbf{A}\Big(\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{A}\Big)^{-1}\mathbf{A}^{\mathrm{T}} \; . \tag{3.80}$$

$\mathbf{P}_k$ wird dabei als *Projektionsmatrix* bezeichnet, weil sie den negativen Gradienten $-(\nabla f)(\mathbf{x}_k)$ in den Tangentialraum $\mathcal{T}\bar{\mathcal{X}}$ projiziert.

> *Aufgabe 3.8.* Zeigen Sie, dass eine Projektionsmatrix $\mathbf{P}$ die Eigenschaften $\mathbf{P}^{\mathrm{T}} = \mathbf{P}$ sowie $\mathbf{P}^2 = \mathbf{P}$ erfüllt.

> *Aufgabe 3.9.* Zeigen Sie, dass man den projizierten Gradienten $\mathbf{d}_k$ auch als Lösung des beschränkten Optimierungsproblems
>
> $$\min_{\mathbf{d}_k \in \mathbb{R}^n} \quad \|(\nabla f)(\mathbf{x}_k) + \mathbf{d}_k\|_2^2 \tag{3.81a}$$
>
> $$\text{u.B.v.} \quad \mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{d}_k = \mathbf{0} \tag{3.81b}$$
>
> erhalten kann.

Aus (3.78) folgt $-\mathbf{d}_k = (\nabla f)(\mathbf{x}_k) + \mathbf{A}\boldsymbol{\sigma}_k$. Einsetzen in $-\mathbf{d}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{d}_k$ liefert unter Berücksichtigung von $\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{d}_k = \mathbf{0}$ gemäß (3.77) die Beziehung

$$-\mathbf{d}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{d}_k = -\|\mathbf{d}_k\|_2^2 = \mathbf{d}_k^{\mathrm{T}}(\nabla f)(\mathbf{x}_k) + \underbrace{\mathbf{d}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{A}}_{=\mathbf{0}}\boldsymbol{\sigma}_k < 0 \; . \tag{3.82}$$

Folglich ist mit $\mathbf{d}_k$ eine *zulässige Abstiegsrichtung* des beschränkten Optimierungsproblems am Punkt $\mathbf{x}_k$ gefunden. In weiterer Folge muss lediglich die Schrittweite α_k zum neuen Iterationspunkt $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_k\mathbf{d}_k$ beispielsweise mit dem skalaren Optimierungsproblem (2.23) bestimmt werden. Es ist hierbei zu beachten, dass die Schrittweite α_k durch die am

Punkt $\mathbf{x}_k$ inaktiven Ungleichungsnebenbedingungen nach oben hin beschränkt sein kann. Wenn jedoch $\mathbf{d}_k = \mathbf{0}$ gilt, dann folgt aus (3.78)

$$(\nabla f)(\mathbf{x}_k) + \mathbf{A}\boldsymbol{\sigma}_k = \mathbf{0} \; . \tag{3.83}$$

Dies entspricht der KKT-Bedingung (3.58a) von Satz 3.8 für das Optimierungsproblem (3.74), wobei $\boldsymbol{\sigma}_k$ mit den Lagrange-Multiplikatoren der aktiven Beschränkungen übereinstimmt. Wenn keine inaktiven Ungleichungsbeschränkungen verletzt werden und alle Einträge $\sigma_{k,i},\ i = p+1, \ldots, \bar{p}$ nichtnegativ sind, dann erfüllt der Punkt $\mathbf{x}_k$ die notwendigen KKT-Bedingungen für ein (lokales) Minimum. Wenn jedoch ein $j \in \{p+1, \ldots, \bar{p}\}$ so existiert, dass $\sigma_{k,j} < 0$ gilt, dann kann die Kostenfunktion weiter verkleinert werden, indem die Ungleichungsbeschränkung $h_j(\mathbf{x}) = \mathbf{a}_{h,j}^{\mathrm{T}}\mathbf{x} - b_{h,j} \leq 0$ inaktiv gesetzt wird. Der Algorithmus der Gradienten-Projektionsmethode ist in Tabelle 3.1 zusammengefasst.

3.2.2.2 Nichtlineare Beschränkungen

Es wird nun nun anstelle des Optimierungsproblems (3.74) mit linearen Beschränkungen das Optimierungsproblem

$$\begin{aligned}
\min_{\mathbf{x}\in\mathbb{R}^n} \quad & f(\mathbf{x}) && && \text{(3.84a)}\\
\text{u.B.v.} \quad & g_i(\mathbf{x}) = 0, && i = 1, \ldots, p && \text{(3.84b)}\\
& h_i(\mathbf{x}) \leq 0, && i = 1, \ldots, q && \text{(3.84c)}
\end{aligned}$$

mit nichtlinearen Beschränkungen betrachtet. Die Gleichungs- und aktiven Ungleichungsbeschränkungen werden wieder im Vektor

$$\bar{\mathbf{g}}(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} [g_i(\mathbf{x})]_{i=1,\ldots,p} \\ [h_i(\mathbf{x})]_{i\in W} \end{bmatrix} \tag{3.85}$$

mit der Dimension $\bar{p} = p + |W|$ zusammengefasst. Diese aktuell aktiven Beschränkungen definieren die Mannigfaltigkeit $\bar{\mathcal{X}} = \{\mathbf{x} \in \mathcal{X} \,|\, \bar{\mathbf{g}}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}\}$.

Im Falle nichtlinearer Beschränkungen ergeben sich Schwierigkeiten, da Elemente des Tangentialraums $\mathcal{T}_{\mathbf{x}}\bar{\mathcal{X}}$ nicht unbedingt auch zulässige Richtungen sind. Nachfolgend wird kurz beschrieben wie mit dieser Situation umzugehen ist.

Zunächst wird der negative Gradient $-(\nabla f)(\mathbf{x}_k)$ an einem Punkt $\mathbf{x}_k$ mit Hilfe der Projektionsmatrix (vergleiche (3.80))

$$\mathbf{P}_k = \mathbf{E} - (\nabla\bar{\mathbf{g}})(\mathbf{x}_k)\Big((\nabla\bar{\mathbf{g}})^{\mathrm{T}}(\mathbf{x}_k)(\nabla\bar{\mathbf{g}})(\mathbf{x}_k)\Big)^{-1}(\nabla\bar{\mathbf{g}})^{\mathrm{T}}(\mathbf{x}_k) \tag{3.86}$$

mit $(\nabla\bar{\mathbf{g}})(\mathbf{x}) = \Big[[(\nabla g_i)(\mathbf{x})]_{i=1,\ldots,p} \quad [(\nabla h_i)(\mathbf{x})]_{i\in W}\Big]$ in den Tangentialraum $\mathcal{T}_{\mathbf{x}_k}\bar{\mathcal{X}}$ projiziert.

Abbildung 3.4 veranschaulicht diese Projektion grafisch. Es ist unmittelbar ersichtlich, dass im Gegensatz zum Problem mit linearen Beschränkungen der Punkt

$$\bar{\mathbf{x}}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_k\mathbf{d}_k \quad \text{mit} \quad \mathbf{d}_k = -\mathbf{P}_k(\nabla f)(\mathbf{x}_k) \tag{3.87}$$

auch für hinreichend kleines α_k im Allgemeinen nicht mehr auf der Mannigfaltigkeit $\bar{\mathcal{X}}$ liegt. Es ist deshalb eine weitere Bewegung vom Punkt $\bar{\mathbf{x}}_{k+1}$ orthogonal zu $\mathbf{d}_k$ nötig,

Initialisierung: $\mathbf{x}_0$ (Zulässiger Startpunkt)
$k = 0$ (Startindex)
stop $= 0$ (Abbruch-Flag)

repeat

Schritt 1: Suche für den Punkt $\mathbf{x}_k$ die Menge der aktiven Beschränkungen (Mannigfaltigkeit $\bar{\mathcal{X}}$) mit der zugehörigen Arbeitsmenge W.

Schritt 2: Projiziere den negativen Gradienten $-(\nabla f)(\mathbf{x}_k)$ in der Form $\mathbf{d}_k = -\mathbf{P}_k(\nabla f)(\mathbf{x}_k)$ mit Hilfe der Projektionsmatrix $\mathbf{P}_k$ gemäß (3.80) in den Tangentialraum $\mathcal{T}\bar{\mathcal{X}}$.

Schritt 3:

if $\mathbf{d}_k \neq \mathbf{0}$

Berechne

$$\begin{aligned} \alpha_{k,1} &= \max\{\alpha_k \,|\, \mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{d}_k \in \mathcal{X}\} \\ \alpha_{k,2} &= \arg \min_{0<\alpha_k<\alpha_{k,1}} f(\mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{d}_k) \end{aligned}$$

und setze $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_{k,2}\mathbf{d}_k$ und $k \leftarrow k+1$.

else (d. h. $\mathbf{d}_k = \mathbf{0}$)

Berechne $\boldsymbol{\sigma}_k = -\left(\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{A}\right)^{-1}\mathbf{A}^{\mathrm{T}}(\nabla f)(\mathbf{x}_k)$ (siehe (3.79))

1. Wenn $\sigma_{k,j} \geq 0$ für alle $j = p+1, \ldots, \bar{p}$ gilt, dann erfüllt $\mathbf{x}_k$ die KKT-Bedingungen, setze stop=1.
2. Wenn $\sigma_{k,j} \geq 0$ nicht für alle $j = p+1, \ldots, \bar{p}$ gilt, dann streiche jene Ungleichungsbeschränkung, die zur negativsten Komponente $\sigma_{k,j},\ j = p+1, \ldots, \bar{p}$ gehört, passe die Indexmenge W und die Matrix $\mathbf{A}$ entsprechend an und gehe zu Schritt 2 in der nächsten Iteration.

end

until stop $== 1$

Tabelle 3.1: Gradienten-Projektionsmethode.

um wieder auf die Mannigfaltigkeit $\bar{\mathcal{X}}$ zu gelangen. Die Idee dabei ist, ein $\boldsymbol{\eta}_k \in \mathbb{R}^{\bar{p}}$ so zu suchen, dass gilt

$$\bar{\mathbf{g}}(\mathbf{x}_{k+1}) = \mathbf{0} \quad \text{mit} \quad \mathbf{x}_{k+1} = \bar{\mathbf{x}}_{k+1} + (\nabla \bar{\mathbf{g}})(\mathbf{x}_k)\boldsymbol{\eta}_k \ . \tag{3.88}$$

Iterativ kann $\boldsymbol{\eta}_k$ im Sinne einer Approximation erster Ordnung wie folgt berechnet werden. Unter Verwendung von (3.88) wird der Ausdruck $\bar{\mathbf{g}}(\mathbf{x}_{k+1})$ bezüglich $\mathbf{x}_{k+1}$ am Punkt $\mathbf{x}_k$ in

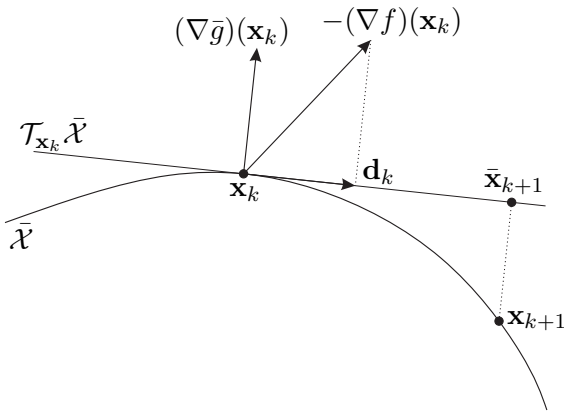


Abbildung 3.4: Gradienten-Projektionsmethode.

eine Reihe entwickelt, welche nach dem linearen Glied abgebrochen wird, d. h.

$$\begin{aligned}\mathbf{0} = \bar{\mathbf{g}}(\mathbf{x}_{k+1}) &\approx \bar{\mathbf{g}}(\mathbf{x}_k) + (\nabla\bar{\mathbf{g}})^{\mathrm{T}}(\mathbf{x}_k)(\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k) \\ &= \bar{\mathbf{g}}(\mathbf{x}_k) + (\nabla\bar{\mathbf{g}})^{\mathrm{T}}(\mathbf{x}_k)(\mathbf{x}_{k+1} - \bar{\mathbf{x}}_{k+1} + \bar{\mathbf{x}}_{k+1} - \mathbf{x}_k) \\ &\approx \bar{\mathbf{g}}(\bar{\mathbf{x}}_{k+1}) + (\nabla\bar{\mathbf{g}})^{\mathrm{T}}(\mathbf{x}_k)(\nabla\bar{\mathbf{g}})(\mathbf{x}_k)\boldsymbol{\eta}_k \ .\end{aligned} \tag{3.89}$$

Daraus folgen

$$\boldsymbol{\eta}_k = -\Big[(\nabla\bar{\mathbf{g}})^{\mathrm{T}}(\mathbf{x}_k)(\nabla\bar{\mathbf{g}})(\mathbf{x}_k)\Big]^{-1}\bar{\mathbf{g}}(\bar{\mathbf{x}}_{k+1}) \tag{3.90a}$$

$$\mathbf{x}_{k+1} = \bar{\mathbf{x}}_{k+1} - (\nabla\bar{\mathbf{g}})(\mathbf{x}_k)\Big[(\nabla\bar{\mathbf{g}})^{\mathrm{T}}(\mathbf{x}_k)(\nabla\bar{\mathbf{g}})(\mathbf{x}_k)\Big]^{-1}\bar{\mathbf{g}}(\bar{\mathbf{x}}_{k+1}) \ . \tag{3.90b}$$

Diese Ausdrücke beinhalten die gleichen Matrizen wie die Projektionsmatrix $\mathbf{P}_k$ gemäß (3.86). Gleichung (3.90b) kann iterativ ausgeführt werden, um einen zulässigen Punkt $\mathbf{x}_{k+1}$ zu finden.

Man beachte, dass ein Vektor $\boldsymbol{\eta}_k$ gemäß (3.88) nicht immer existieren muss, siehe beispielsweise Abbildung 3.5. Tritt dieses Problem auf, muss die Schrittweite α_k in (3.87) reduziert werden.

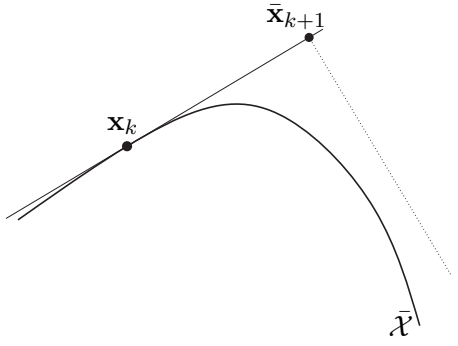


Abbildung 3.5: Nichtexistenz von $\boldsymbol{\eta}_k$, um auf $\bar{\mathcal{X}}$ zu kommen.

Ein weiteres Problem, das bei der Gradienten-Projektionsmethode mit nichtlinearen Beschränkungen auftreten kann, besteht darin, dass Ungleichungsbeschränkungen, welche am Punkt $\mathbf{x}_k$ inaktiv waren, bei einer Bewegung in Richtung des projizierten negativen Gradienten verletzt werden können, siehe Abbildung 3.6. Typischerweise werden in diesem Zusammenhang Verfahren zur Interpolation zwischen den Punkten $\mathbf{x}_k$ und $\bar{\mathbf{x}}_{k+1}$ eingesetzt, um zu einem neuen Punkt $\bar{\bar{\mathbf{x}}}_{k+1}$ bzw. zu einem zugehörigen Punkt $\mathbf{x}_{k+1}$ auf der Mannigfaltigkeit $\bar{\mathcal{X}}$ zu gelangen, der die ursprünglich inaktiven Ungleichungsbeschränkungen nicht verletzt.

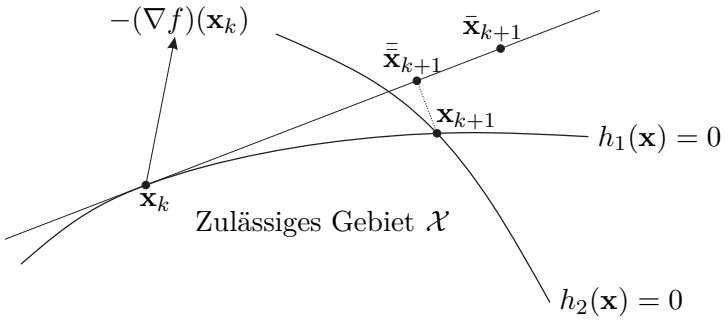


Abbildung 3.6: Interpolation zur Einhaltung der ursprünglich inaktiven Ungleichungsbeschränkungen.

Aufgabe 3.10. Lösen Sie das beschränkte Optimierungsproblem (3.40) aus Beispiel 3.3 numerisch mit Hilfe der Gradienten-Projektionsmethode. Erstellen Sie dafür ein Computerprogramm, wobei Sie für die Bestimmung der Schrittweite α_k wahlweise selbst einen Algorithmus (z. B. aus Abschnitt 2.3.1) programmieren oder vorgefertigte Funktionen einsetzen können. Verwenden Sie als Startpunkt $\mathbf{x}_0 = [1/\sqrt{2} \quad 1/\sqrt{2} \quad 0]^{\mathrm{T}}$. Zur Projektion des Punktes $\bar{\mathbf{x}}_{k+1}$ zurück auf die Mannigfaltigkeit $\bar{\mathcal{X}}$, also zum Finden eines zulässigen Punktes $\mathbf{x}_{k+1}$ können Sie (3.90b) iterativ anwenden.

Lösung von Aufgabe 3.10. Am Startpunkt beträgt der Kostenfunktionswert $f(\mathbf{x}_0) = 1.207\,107$. Im Verlauf der ersten Iteration ergeben sich folgende Zwischenergebnisse:

$$\mathbf{P}_0 = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{bmatrix}, \qquad \mathbf{d}_0 = \begin{bmatrix} \sqrt{2} - 1/2 \\ 1/2 - \sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} \end{bmatrix}, \qquad \alpha_0 = 0.246\,289\,,$$

$$\bar{\mathbf{x}}_1 = \begin{bmatrix} 0.758\,115 \\ 0.656\,099 \\ -0.174\,153 \end{bmatrix}, \qquad \mathbf{x}_1 = \begin{bmatrix} 0.745\,439 \\ 0.643\,422 \\ -0.174\,153 \end{bmatrix}, \qquad f(\mathbf{x}_1) = 1.108\,035$$

Nach zehn Iterationen gelangt der Algorithmus zum Punkt

$$\mathbf{x}_{10} = \begin{bmatrix} 0.997\,635 \\ 0.065\,201 \\ -0.021\,753 \end{bmatrix}$$

mit dem Kostenfunktionswert $f(\mathbf{x}_{10}) = 1.001\,414$. Aus Beispiel 3.3 ist bekannt, dass die exakte Lösung $\mathbf{x}^* = [1 \quad 0 \quad 0]^{\mathrm{T}}$ mit $f(\mathbf{x}^*) = 1$ lautet.

Probleme, die sich bei der Gradienten-Projektionsmethode im Zusammenhang mit nichtlinearen Beschränkungen ergeben und eine weitere Bewegung vom Tangentialraum $\mathcal{T}_{\mathbf{x}_k}\bar{\mathcal{X}}$ zurück auf die Mannigfaltigkeit $\bar{\mathcal{X}}$ erfordern (siehe Abbildung 3.4), können vermieden werden, wenn bereits bei der Gradientenberechnung eine Bewegung entlang der Mannigfaltigkeit $\bar{\mathcal{X}}$ erzwungen wird. Die nachfolgend beschriebene Methode tut dies.

3.2.3 Reduzierte Gradientenmethode

Die Idee der *reduzierten Gradientenmethode* [3.1, 3.4] ist, dass grundsätzlich nur Bewegungen auf der Mannigfaltigkeit, die durch die aktuelle Arbeitsmenge definiert ist, erlaubt werden. Bei der Gradientenberechnung wird dies im Sinne der Kettenregel berücksichtigt. Gelegentlich wird die Methode auch als *generalisierte reduzierte Gradientenmethode* bezeichnet.

Man betrachte wieder das Optimierungsproblem

$$\min_{\mathbf{x}\in\mathbb{R}^n} \quad f(\mathbf{x}) \tag{3.91a}$$

$$\text{u.B.v.} \quad g_i(\mathbf{x}) = 0, \qquad i = 1, \ldots, p \tag{3.91b}$$

$$h_i(\mathbf{x}) \leq 0, \qquad i = 1, \ldots, q \tag{3.91c}$$

mit nichtlinearen Beschränkungen. Analog zu Abschnitt 3.2.2.2 sei W die aktuelle Arbeitsmenge und der Vektor $\bar{\mathbf{g}}(\mathbf{x})$ mit der Dimension $\bar{p} < n$ fasse die Gleichungs- und die im aktuellen Iterationsschritt aktiven Ungleichungsbeschränkungen zusammen, welche die Mannigfaltigkeit $\bar{\mathcal{X}}$ definieren.

Die Optimierungsvariablen werden nun im aktuellen Iterationsschritt so in $n - \bar{p}$ unabhängige Variablen $\mathbf{x}_I$ und $\bar{p}$ abhängige Variablen $\mathbf{x}_D$ partitioniert, dass

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} \mathbf{x}_I \\ \mathbf{x}_D \end{bmatrix} \tag{3.92}$$

gilt und die Matrix

$$\mathbf{A}_D(\mathbf{x}) = \left(\frac{\partial \bar{\mathbf{g}}(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}_D}\right) = \begin{bmatrix} \frac{\partial \bar{g}_1}{\partial x_{D,1}} & \cdots & \frac{\partial \bar{g}_1}{\partial x_{D,\bar{p}}} \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial \bar{g}_{\bar{p}}}{\partial x_{D,1}} & \cdots & \frac{\partial \bar{g}_{\bar{p}}}{\partial x_{D,\bar{p}}} \end{bmatrix} \tag{3.93}$$

regulär ist. Die in (3.92) gewählte Reihenfolge der Variablen stellt keine Einschränkung dar, da sie durch Umsortieren immer hergestellt werden kann. Im Verlauf der Iterationen

kann sich die Partitionierung (3.92) ändern. Gemäß dem Satz über implizite Funktionen ist bei gegebenem $\mathbf{x}_I$ mit der geforderten Regularität der Matrix $\mathbf{A}_D$ (zumindest lokal) sichergestellt, dass $\mathbf{x}_D$ aus $\bar{\mathbf{g}}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ eindeutig ausgerechnet werden kann und stetig differenzierbar von $\mathbf{x}_I$ abhängt. Formal existiert damit eine (zumindest lokal definierte) stetig differenzierbare Funktion $\bar{\mathbf{g}}_D^{-1}(\mathbf{x}_I)$ so, dass

$$\bar{\mathbf{g}}(\mathbf{x}) = \mathbf{0} \quad \Leftrightarrow \quad \mathbf{x}_D = \bar{\mathbf{g}}_D^{-1}(\mathbf{x}_I) \ . \tag{3.94}$$

Damit lässt sich das *reduzierte unbeschränkte Optimierungsproblem*

$$\min_{\mathbf{x}_I \in \mathbb{R}^{n-\bar{p}}} \quad f\left(\begin{bmatrix} \mathbf{x}_I \\ \bar{\mathbf{g}}_D^{-1}(\mathbf{x}_I) \end{bmatrix}\right) \tag{3.95}$$

formulieren, welches nur $n-\bar{p}$ Optimierungsvariablen besitzt und in der aktuellen Iteration lokal äquivalent zum ursprünglichen (höherdimensionaleren) Optimierungsproblem (3.91) ist. Die Lösungssuche wird damit automatisch auf die Mannigfaltigkeit $\bar{\mathcal{X}}$ eingeschränkt. Aus der Lösung $\mathbf{x}_I^*$ des unbeschränkten Optimierungsproblems (3.95) folgt schließlich noch der optimale Wert $\mathbf{x}_D^* = \bar{\mathbf{g}}_D^{-1}(\mathbf{x}_I^*)$ für die abhängigen Variablen.

> *Bemerkung* 3.1. Gerade bei regelungstechnischen Optimierungsaufgaben ist die in (3.92) vorgenommene Einteilung der Optimierungsvariablen in unabhängige und abhängige Variablen häufig sehr einfach möglich. Die zu optimierenden *Stellgrößen* des Systems stellen unabhängige Variablen dar, während die *Zustandsgrößen* abhängige Variablen darstellen, deren Werte durch Zustandsgleichungen eindeutig definiert und im Allgemeinen einfach berechenbar sind (siehe dazu auch Aufgabe 3.4). Da die meisten dynamischen Systeme viele Zustandsgrößen aber nur wenige Stellgrößen besitzen, ist damit die Dimension des Optimierungsproblems (3.95) erheblich kleiner als jene von (3.91).

Die Lösung $\mathbf{x}_I^*$ des unbeschränkten Problems (3.95) kann z. B. mit den in Kapitel 2 vorgestellten Methoden gefunden werden. Die dabei häufig benötigte (totale) Ableitung der Kostenfunktion (3.95) bezüglich $\mathbf{x}_I$ (Gradient) kann wie folgt berechnet werden. Zunächst bilde man das totale Differenzial von $\bar{\mathbf{g}}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$

$$\mathrm{d}\bar{\mathbf{g}}(\mathbf{x}) = \underbrace{\frac{\partial \bar{\mathbf{g}}(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}_I}}_{= \mathbf{A}_I(\mathbf{x})} \mathrm{d}\mathbf{x}_I + \mathbf{A}_D(\mathbf{x})\,\mathrm{d}\mathbf{x}_D = \mathbf{0} \tag{3.96}$$

aus dem

$$\frac{\mathrm{d}\mathbf{x}_D}{\mathrm{d}\mathbf{x}_I} = \frac{\mathrm{d}\bar{\mathbf{g}}_D^{-1}(\mathbf{x}_I)}{\mathrm{d}\mathbf{x}_I} = -\mathbf{A}_D^{-1}\mathbf{A}_I \tag{3.97}$$

folgt. Daraus ergibt sich die gesuchte totale Ableitung

$$\left(\frac{\mathrm{d}f(\mathbf{x})}{\mathrm{d}\mathbf{x}_I}\right)^{\mathrm{T}} = \left(\frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}_I} - \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}_D}\mathbf{A}_D^{-1}\mathbf{A}_I\right)^{\mathrm{T}} = \underbrace{\begin{bmatrix}\mathbf{E} & -(\mathbf{A}_D^{-1}\mathbf{A}_I)^{\mathrm{T}}\end{bmatrix}}_{= \bar{\mathbf{P}}(\mathbf{x})} (\nabla f)(\mathbf{x}) \ , \tag{3.98}$$

welche auch als *reduzierter Gradient* bezeichnet wird. In analoger Weise folgt die (totale) zweite Ableitung der Kostenfunktion (3.95) bezüglich $\mathbf{x}_I$ (Hessematrix) in der Form

$$\frac{\mathrm{d}^2 f(\mathbf{x})}{\mathrm{d}\mathbf{x}_I^{\mathrm{T}}\,\mathrm{d}\mathbf{x}_I} = \begin{bmatrix} \frac{\mathrm{d}^2 f}{\mathrm{d}x_{I,1}^2} & \cdots & \frac{\mathrm{d}^2 f}{\mathrm{d}x_{I,1}\,\mathrm{d}x_{I,n-\bar{p}}} \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\mathrm{d}^2 f}{\mathrm{d}x_{I,n-\bar{p}}\,\mathrm{d}x_{I,1}} & \cdots & \frac{\mathrm{d}^2 f}{\mathrm{d}x_{I,n-\bar{p}}^2} \end{bmatrix} = \bar{\mathbf{P}}(\mathbf{x})\Big(\nabla^2 f\Big)(\mathbf{x})\bar{\mathbf{P}}^{\mathrm{T}}(\mathbf{x}) \;, \tag{3.99}$$

welche auch als *reduzierte Hessematrix* bezeichnet wird. Bei der Berechnung dieser Ableitungen ist es also nicht notwendig, die Funktion $\bar{\mathbf{g}}_D^{-1}(\mathbf{x}_I)$ explizit zu kennen. Im Fall $n - \bar{p} < \bar{p}$ kann es den Aufwand zur Berechnung von $\mathbf{P}(\mathbf{x})$ gemäß (3.98) reduzieren, wenn statt dem Ausdruck $-\mathbf{A}_D^{-1}\mathbf{A}_I$, welcher eine Inversion der Matrix $\mathbf{A}_D$ erfordert, die Matrix $\mathrm{d}\mathbf{x}_D/\,\mathrm{d}\mathbf{x}_I$, die sich aus der Lösung des linearen Gleichungssystems

$$\mathbf{A}_D \frac{\mathrm{d}\mathbf{x}_D}{\mathrm{d}\mathbf{x}_I} = -\mathbf{A}_I \tag{3.100}$$

(vgl. (3.97)) ergibt, eingesetzt wird.

Man beachte, dass mit dem reduzierten unbeschränkten Optimierungsproblem (3.95) noch nicht sichergestellt ist, dass die in der aktuellen Iteration gefundene Lösung $\mathbf{x}_I^*$, $\mathbf{x}_D^*$ die KKT-Bedingungen gemäß Satz 3.8 für das ursprüngliche beschränkte Optimierungsproblem (3.91) erfüllt. Zudem ist es häufig nicht möglich, einen analytischen Ausdruck für die Funktion $\bar{\mathbf{g}}_D^{-1}(\mathbf{x}_I)$, welche auch in (3.95) auftritt, zu finden. Praktisch wird daher meist nicht das reduzierte Optimierungsproblem (3.95) selbst gelöst, sondern nur die zugehörige Ableitung (3.98) (gegebenenfalls auch (3.99)) berechnet, um im Zuge der iterativen Lösungssuche entlang der aktuellen Mannigfaltigkeit $\bar{\mathcal{X}}$ eine neue Suchrichtung $\mathbf{s}_{I,k}$ für die unabhängigen Variablen $\mathbf{x}_I$ zu bestimmen. Im einfachsten Fall der Gradientenmethode gilt $\mathbf{s}_{I,k} = -(\mathrm{d}f(\mathbf{x}_k)/\,\mathrm{d}\mathbf{x}_{I,k})^{\mathrm{T}}$. Es können aber auch die weiteren in Abschnitt 2.3.2 besprochenen Methoden zu Wahl einer Suchrichtung $\mathbf{s}_{I,k}$ verwendet werden.

Tabelle 3.2 fasst den zugehörigen Algorithmus zusammen. Im Zuge dieses Algorithmus muss die Funktion $\bar{\mathbf{g}}_D^{-1}(\mathbf{x}_I)$ weder bekannt sein noch ausgewertet werden. Für einen bestimmten Wert $\mathbf{x}_I$ kann $\mathbf{x}_D$ stets als Lösung der Gleichung $\bar{\mathbf{g}}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ berechnet werden. Folglich ist $\mathbf{x}_k$ immer ein zulässiger Punkt im Sinne der Gleichungs- und aktiven Ungleichungsbeschränkungen, was bei einem vorzeitigen Abbruch der Iteration von Vorteil sein kann.

Wie nachfolgendes Lemma zeigt, kann der reduzierte Gradient $(\mathrm{d}f(\mathbf{x})/\,\mathrm{d}\mathbf{x}_I)^{\mathrm{T}}$ alternativ zu (3.98) auch mit Hilfe der Lagrangefunktion berechnet werden.

Lemma 3.2 (Berechnung des reduzierten Gradienten mit Hilfe der Lagrangefunktion)**.** *Es sei $\mathbf{x} \in \mathcal{X}$ ein regulärer Punkt des Optimierungsproblems (3.91). Für eine gegebene Partitionierung (3.92) kann der reduzierte Gradient $(\mathrm{d}f(\mathbf{x})/\,\mathrm{d}\mathbf{x}_I)^{\mathrm{T}}$ mit Hilfe der Lagrangefunktion*

$$L(\mathbf{x}, \bar{\boldsymbol{\lambda}}) = f(\mathbf{x}) + \bar{\boldsymbol{\lambda}}^{\mathrm{T}} \bar{\mathbf{g}}(\mathbf{x}) \tag{3.101}$$

Initialisierung: $\mathbf{x}_0$ (Zulässiger Startpunkt)
$k = 0$ (Startindex)
stop $= 0$ (Abbruch-Flag)

repeat

Schritt 1: Suche für den Punkt $\mathbf{x}_k$ die Menge der aktiven Beschränkungen (Mannigfaltigkeit $\bar{\mathcal{X}}$) mit der zugehörigen Arbeitsmenge W.

Schritt 2: Partitioniere $\mathbf{x}$ gemäß (3.92) in unabhängige Variablen $\mathbf{x}_I$ und abhängige Variablen $\mathbf{x}_D$ so, dass $\mathbf{A}_D(\mathbf{x}_k)$ gemäß (3.93) regulär ist.

Schritt 3: Berechne am Punkt $\mathbf{x}_k$ den reduzierten Gradienten $\mathbf{d}_{I,k} = (\mathrm{d}f(\mathbf{x}_k)/\,\mathrm{d}\mathbf{x}_I)^{\mathrm{T}}$ gemäß (3.98) und gegebenenfalls die reduzierte Hessematrix gemäß (3.99).

Schritt 4:

if $\mathbf{d}_{I,k} \neq \mathbf{0}$

Wähle basierend auf $\mathbf{d}_{I,k}$ (und der reduzierten Hessematrix) eine geeignete Suchrichtung $\mathbf{s}_{I,k}$ im Raum der unabhängigen Variablen $\mathbf{x}_I$. Berechne

$$\alpha_{k,1} = \max \alpha_k \quad \text{u.B.v.} \quad \begin{bmatrix} \mathbf{x}_{I,k} + \alpha_k \mathbf{s}_{I,k} \\ \bar{\mathbf{g}}_D^{-1}(\mathbf{x}_{I,k} + \alpha_k \mathbf{s}_{I,k}) \end{bmatrix} \in \mathcal{X}$$

$$\alpha_{k,2} = \arg \min_{0<\alpha_k<\alpha_{k,1}} f\left(\begin{bmatrix} \mathbf{x}_{I,k} + \alpha_k \mathbf{s}_{I,k} \\ \bar{\mathbf{g}}_D^{-1}(\mathbf{x}_{I,k} + \alpha_k \mathbf{s}_{I,k}) \end{bmatrix} \right),$$

setze $\mathbf{x}_{I,k+1} = \mathbf{x}_{I,k} + \alpha_{k,2}\mathbf{s}_{I,k}$, berechne $\mathbf{x}_{D,k+1}$ aus $\bar{\mathbf{g}}(\mathbf{x}_{k+1}) = \mathbf{0}$ und setze $k \leftarrow k+1$.

else (d. h. $\mathbf{d}_{I,k} = \mathbf{0}$)

Prüfe ob KKT-Bedingungen (3.57) erfüllt sind.

1. Wenn Punkt $\mathbf{x}_k$ die KKT-Bedingungen erfüllt, setze stop=1.
2. Andernfalls passe die Arbeitsmenge W durch Hinzunahme von verletzten Ungleichungsbeschränkungen ($h_i(\mathbf{x}_k) > 0$) oder durch Streichung der Ungleichungsbeschränkung mit dem kleinsten negativen Lagrange-Multiplikator ($\mu_i < 0$) an und gehe zu Schritt 2 in der nächsten Iteration.

end

until stop $== 1$

Tabelle 3.2: Reduzierte Gradientenmethode.

in der Form

$$\left(\frac{\mathrm{d}f(\mathbf{x})}{\mathrm{d}\mathbf{x}_I}\right)^{\mathrm{T}} = \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_I} L\right)^{\mathrm{T}}(\mathbf{x}, \bar{\boldsymbol{\lambda}}) = \left(\frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}_I}\right)^{\mathrm{T}} + \left(\frac{\partial \bar{\mathbf{g}}(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}_I}\right)^{\mathrm{T}} \bar{\boldsymbol{\lambda}} \tag{3.102}$$

berechnet werden, wobei $\mathbf{x}_D$ *und* $\bar{\boldsymbol{\lambda}}$ *aus den Bedingungen*

$$\left(\frac{\partial}{\partial \bar{\boldsymbol{\lambda}}} L\right)^{\mathrm{T}}(\mathbf{x}, \bar{\boldsymbol{\lambda}}) = \bar{\mathbf{g}}(\mathbf{x}) = \mathbf{0} \tag{3.103a}$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_D} L\right)^{\mathrm{T}}(\mathbf{x}, \bar{\boldsymbol{\lambda}}) = \left(\frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}_D}\right)^{\mathrm{T}} + \left(\frac{\partial \bar{\mathbf{g}}(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}_D}\right)^{\mathrm{T}} \bar{\boldsymbol{\lambda}} = \mathbf{0} \tag{3.103b}$$

folgen.

Aufgabe 3.11. Beweisen Sie Lemma 3.2.

Gegenüber (3.98) hat die Berechnung des reduzierten Gradienten gemäß Lemma 3.2 den Vorteil, dass die Matrix $\mathbf{A}_D(\mathbf{x})$ nicht invertiert werden muss. Zur Berechnung von $\bar{\boldsymbol{\lambda}}$ muss nur die lineare Gleichung (3.103b) gelöst werden. Aus Lemma 3.2 folgt direkt, dass die Stationaritätsbedingung $(\mathrm{d}f(\mathbf{x})/\,\mathrm{d}\mathbf{x}_I)^{\mathrm{T}} = \mathbf{0}$ genau auf die notwendige Optimalitätsbedingung erster Ordnung für Optimierungsprobleme mit reinen Gleichungsbeschränkungen (siehe Satz 3.4 sowie (3.25)) führt.

In [3.4–3.6] werden Varianten der reduzierten Gradientenmethode beschrieben, die als Grundlage die Problemformulierung (3.4) mit Schlupfvariablen $\mathbf{x}_s$ verwenden. Dabei werden die Optimierungsvariablen in unabhängige, abhängige und fixierte Variablen partitioniert. Als fixierte Variablen gelten Schlupfvariablen mit dem Wert $x_{s,i} = 0$, d. h. jene, die zu einer aktuell aktiven Ungleichungsbeschränkung gehören. Fixierte Variablen haben keinen direkten Einfluss auf den reduzierten Gradienten.

Aufgabe 3.12. Lösen Sie das beschränkte Optimierungsproblem (3.40) aus Beispiel 3.3 numerisch mit Hilfe der reduzierten Gradientenmethode. Erstellen Sie dafür ein Computerprogramm, wobei Sie für die Bestimmung der Schrittweite α_k wahlweise selbst einen Algorithmus (z. B. aus Abschnitt 2.3.1) programmieren oder vorgefertigte Funktionen einsetzen können. Verwenden Sie als Startpunkt $\mathbf{x}_0 = [1/\sqrt{2} \quad 1/\sqrt{2} \quad 0]^{\mathrm{T}}$. Wählen Sie die Partitionierung $\mathbf{x}_I = [x_2 \quad x_3]^{\mathrm{T}}$ und $x_D = x_1$. Warum ist diese Aufteilung in Anbetracht des aus Beispiel 3.3 bekannten optimalen Punktes $\mathbf{x}^* = [1 \quad 0 \quad 0]^{\mathrm{T}}$ sinnvoll? Vergleichen Sie die Ergebnisse mit jenen von Aufgabe 3.10.

Lösung von Aufgabe 3.12. Die Partitionierung $\mathbf{x}_I = [x_2 \quad x_3]^{\mathrm{T}}$ und $x_D = x_1$ ist die einzig mögliche, die am optimalen Punkt $\mathbf{x}^*$ die Regularität von $A_D(\mathbf{x}^*) = \partial g(\mathbf{x}^*)/\partial x_D$ sicherstellt. Am Startpunkt beträgt der Kostenfunktionswert $f(\mathbf{x}_0) = 1.207\,107$. Im Verlauf der ersten Iteration ergeben sich bei Verwendung der Suchrichtung $\mathbf{s}_{I,k} = -(\mathrm{d}f(\mathbf{x}_k)/\,\mathrm{d}\mathbf{x}_{I,k})^{\mathrm{T}}$ (einfache Gradientenmethode) folgende Zwischenergeb-

nisse:

$$\mathbf{A}_I(\mathbf{x}_0) = \begin{bmatrix}\sqrt{2} & 0\end{bmatrix}, \qquad A_D(\mathbf{x}_0) = \sqrt{2}, \qquad \mathbf{d}_0 = \begin{bmatrix}1-\sqrt{2}\\ -1/\sqrt{2}\end{bmatrix},$$

$$\alpha_0 = 0.343\,906, \qquad \mathbf{x}_1 = \begin{bmatrix}0.788\,687\\ 0.564\,656\\ -0.243\,178\end{bmatrix}, \qquad f(\mathbf{x}_1) = 1.088\,483$$

Nach zehn Iterationen gelangt der Algorithmus zum Punkt

$$\mathbf{x}_{10} = \begin{bmatrix}1.000\,000\\ 0.000\,002\\ 0.000\,001\end{bmatrix}$$

mit dem Kostenfunktionswert $f(\mathbf{x}_{10}) = 1.000\,000$. Ein Vergleich mit Aufgabe 3.10 zeigt, dass für dieses Optimierungsproblem und den hier verwendeten Startpunkt die reduzierte Gradientenmethode deutlich schneller konvergiert als die Gradienten-Projektionsmethode.

3.2.4 Sequentielle quadratische Programmierung (SQP)

3.2.4.1 Lokales SQP-Verfahren

Für die Motivation des SQP-Verfahrens betrachte man das beschränkte Optimierungsproblem

$$\min_{\mathbf{x}\in\mathbb{R}^n} \quad f(\mathbf{x}) \tag{3.104a}$$

$$\text{u.B.v.} \quad \mathbf{g}(\mathbf{x}) = \mathbf{0} \tag{3.104b}$$

mit $f \in C^2$ und $p < n$ Gleichungsbeschränkungen $g_1(\mathbf{x}), \ldots, g_p(\mathbf{x}) \in C^2$. Nach Satz 3.4 lauten die notwendigen Optimalitätsbedingungen (KKT-Bedingungen) erster Ordnung für einen optimalen Punkt $(\mathbf{x}^*, \boldsymbol{\lambda}^*)$ mit der Lagrangefunktion $L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}) = f(\mathbf{x}) + \boldsymbol{\lambda}^{\mathrm{T}}\mathbf{g}(\mathbf{x})$

$$\begin{bmatrix}\left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}L\right)^{\mathrm{T}}(\mathbf{x}^*, \boldsymbol{\lambda}^*)\\ \left(\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\lambda}}L\right)^{\mathrm{T}}(\mathbf{x}^*, \boldsymbol{\lambda}^*)\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}(\nabla f)(\mathbf{x}^*) + (\nabla \mathbf{g})(\mathbf{x}^*)\boldsymbol{\lambda}^*\\ \mathbf{g}(\mathbf{x}^*)\end{bmatrix} = \mathbf{0}, \tag{3.105}$$

wobei gilt $(\nabla \mathbf{g})(\mathbf{x}^*) = \begin{bmatrix}(\nabla g_1)(\mathbf{x}^*) & \ldots & (\nabla g_p)(\mathbf{x}^*)\end{bmatrix}$. Eine Möglichkeit, die $n+p$ Gleichungen (3.105) in den $n+p$ Unbekannten $(\mathbf{x}^*, \boldsymbol{\lambda}^*)$ rekursiv numerisch zu lösen, ist das Newton-Raphson Verfahren mit der Iterationsvorschrift

$$\begin{bmatrix}\mathbf{x}_{k+1}\\ \boldsymbol{\lambda}_{k+1}\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\mathbf{x}_k\\ \boldsymbol{\lambda}_k\end{bmatrix} + \begin{bmatrix}\mathbf{p}_{\mathbf{x},k}\\ \mathbf{p}_{\boldsymbol{\lambda},k}\end{bmatrix} \tag{3.106a}$$

$$\underbrace{\begin{bmatrix} \mathbf{L}(\mathbf{x}_k, \boldsymbol{\lambda}_k) & (\nabla \mathbf{g})(\mathbf{x}_k) \\ (\nabla \mathbf{g})^{\mathrm{T}}(\mathbf{x}_k) & \mathbf{0} \end{bmatrix}}_{\mathbf{M}_k} \begin{bmatrix} \mathbf{p}_{\mathbf{x},k} \\ \mathbf{p}_{\boldsymbol{\lambda},k} \end{bmatrix} = -\begin{bmatrix} (\nabla f)(\mathbf{x}_k) + (\nabla \mathbf{g})(\mathbf{x}_k)\boldsymbol{\lambda}_k \\ \mathbf{g}(\mathbf{x}_k) \end{bmatrix} \tag{3.106b}$$

und der Hessematrix $\mathbf{L}(\mathbf{x}_k, \boldsymbol{\lambda}_k) = \left(\frac{\partial^2}{\partial \mathbf{x}^2} L\right)(\mathbf{x}_k, \boldsymbol{\lambda}_k)$. Die Matrix $\mathbf{M}_k$ in (3.106b) hat vollen Rang, d. h. sie kann invertiert werden, wenn die Gleichungsbeschränkungen der LICQ Bedingung genügen ($(\nabla \mathbf{g})(\mathbf{x}_k)$ ist spaltenregulär) und für alle $\mathbf{d} \neq \mathbf{0}$ mit der Eigenschaft $(\nabla \mathbf{g})^{\mathrm{T}}\mathbf{d} = \mathbf{0}$ die Bedingung $\mathbf{d}^{\mathrm{T}}\mathbf{L}(\mathbf{x}_k, \boldsymbol{\lambda}_k)\mathbf{d} > 0$ erfüllt ist. Wird letztere Bedingung am Punkt $(\mathbf{x}^*, \boldsymbol{\lambda}^*)$ eingehalten, so gilt dies wegen der getroffenen Differenzierbarkeitsannahmen auch für Punkte $(\mathbf{x}_k, \boldsymbol{\lambda}_k)$ in einer hinreichend kleinen Umgebung um $(\mathbf{x}^*, \boldsymbol{\lambda}^*)$ und gemäß Satz 3.6 ist $(\mathbf{x}^*, \boldsymbol{\lambda}^*)$ dann ein striktes lokales Minimum. Wenn in einem Iterationsschritt $\mathbf{p}_{\mathbf{x},k} = \mathbf{0}$ gilt, so ist aus (3.106b) ersichtlich, dass damit auch ein Punkt $\mathbf{x}^* = \mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k$, $\boldsymbol{\lambda}^* = \boldsymbol{\lambda}_{k+1}$ gefunden wurde, der die KKT-Bedingungen (3.105) des ursprünglichen Optimierungsproblems (3.104) erfüllt.

Ein Schritt k der Iterationsvorschrift (3.106) kann nun äquivalent auch als *Lösung des quadratischen Programms*

$$\min_{\tilde{\mathbf{p}} \in \mathbb{R}^n} \quad f(\mathbf{x}_k) + (\nabla f)^{\mathrm{T}}(\mathbf{x}_k)\tilde{\mathbf{p}} + \frac{1}{2}\tilde{\mathbf{p}}^{\mathrm{T}}\mathbf{L}(\mathbf{x}_k, \boldsymbol{\lambda}_k)\tilde{\mathbf{p}} \tag{3.107a}$$

$$\text{u.B.v.} \quad (\nabla \mathbf{g})^{\mathrm{T}}(\mathbf{x}_k)\tilde{\mathbf{p}} + \mathbf{g}(\mathbf{x}_k) = \mathbf{0} \tag{3.107b}$$

aufgefasst werden. Die KKT-Bedingungen für (3.107) lauten

$$\begin{bmatrix} \mathbf{L}(\mathbf{x}_k, \boldsymbol{\lambda}_k) & (\nabla \mathbf{g})(\mathbf{x}_k) \\ (\nabla \mathbf{g})^{\mathrm{T}}(\mathbf{x}_k) & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tilde{\mathbf{p}}^* \\ \tilde{\boldsymbol{\lambda}}^* \end{bmatrix} = -\begin{bmatrix} (\nabla f)(\mathbf{x}_k) \\ \mathbf{g}(\mathbf{x}_k) \end{bmatrix} \tag{3.108}$$

mit dem Lagrange-Multiplikator $\tilde{\boldsymbol{\lambda}}$. Um diese Äquivalenz zu sehen, wird zunächst $\mathbf{p}_{\boldsymbol{\lambda},k} = \boldsymbol{\lambda}_{k+1} - \boldsymbol{\lambda}_k$ in (3.106b) eingesetzt, woraus sich

$$\begin{bmatrix} \mathbf{L}(\mathbf{x}_k, \boldsymbol{\lambda}_k) & (\nabla \mathbf{g})(\mathbf{x}_k) \\ (\nabla \mathbf{g})^{\mathrm{T}}(\mathbf{x}_k) & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{p}_{\mathbf{x},k} \\ \boldsymbol{\lambda}_{k+1} \end{bmatrix} = -\begin{bmatrix} (\nabla f)(\mathbf{x}_k) \\ \mathbf{g}(\mathbf{x}_k) \end{bmatrix} \tag{3.109}$$

ergibt. Ein Vergleich von (3.108) mit (3.109) bestätigt nun, dass statt der Lösung des Gleichungssystems (3.109) auch das Minimum des quadratischen Programms (3.107) berechnet werden kann. Die eigentliche Iterationsvorschrift, welche äquivalent zu (3.106) ist, lautet damit $\boldsymbol{\lambda}_{k+1} = \tilde{\boldsymbol{\lambda}}^*$ und $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \tilde{\mathbf{p}}^*$ (mit $\mathbf{p}_{\mathbf{x},k} = \tilde{\mathbf{p}}^*$). Wenn nun in einem Iterationsschritt k für (3.107) die Lösung $\tilde{\mathbf{p}}^* = \mathbf{0}$ gefunden wird, so ist aus (3.108) ersichtlich, dass damit auch ein Punkt $\mathbf{x}^* = \mathbf{x}_k$, $\boldsymbol{\lambda}^* = \tilde{\boldsymbol{\lambda}}^*$ gefunden wurde, der die KKT-Bedingungen (3.105) des ursprünglichen Optimierungsproblems (3.104) erfüllt. Da wiederkehrend quadratische Programme gelöst werden, bezeichnet man dieses Verfahren als *sequentielle quadratische Programmierung*.

Die vorangegangenen Überlegungen motivieren die Erweiterung der SQP-Methode auf allgemeine nichtlineare Optimierungsprobleme der Form

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \quad f(\mathbf{x}) \tag{3.110a}$$

$$\text{u.B.v.} \quad \mathbf{g}(\mathbf{x}) = \mathbf{0} \tag{3.110b}$$
$$\mathbf{h}(\mathbf{x}) \leq \mathbf{0} \tag{3.110c}$$

mit $f \in C^2$, $p < n$ Gleichungsbeschränkungen $g_1(\mathbf{x}), \ldots, g_p(\mathbf{x}) \in C^2$ und q Ungleichungsbeschränkungen $h_1(\mathbf{x}), \ldots, h_q(\mathbf{x}) \in C^2$. Die zugehörige Lagrangefunktion lautet $L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu}) = f(\mathbf{x}) + \boldsymbol{\lambda}^{\mathrm{T}}\mathbf{g}(\mathbf{x}) + \boldsymbol{\mu}^{\mathrm{T}}\mathbf{h}(\mathbf{x})$. Das Optimierungsproblem (3.110) wird in jedem Iterationsschritt durch das *quadratische Programm*

$$\min_{\tilde{\mathbf{p}} \in \mathbb{R}^n} \quad f(\mathbf{x}_k) + (\nabla f)^{\mathrm{T}}(\mathbf{x}_k)\tilde{\mathbf{p}} + \frac{1}{2}\tilde{\mathbf{p}}^{\mathrm{T}}\mathbf{L}(\mathbf{x}_k, \boldsymbol{\lambda}_k, \boldsymbol{\mu}_k)\tilde{\mathbf{p}} \tag{3.111a}$$
$$\text{u.B.v.} \quad (\nabla \mathbf{g})^{\mathrm{T}}(\mathbf{x}_k)\tilde{\mathbf{p}} + \mathbf{g}(\mathbf{x}_k) = \mathbf{0} \tag{3.111b}$$
$$(\nabla \mathbf{h})^{\mathrm{T}}(\mathbf{x}_k)\tilde{\mathbf{p}} + \mathbf{h}(\mathbf{x}_k) \leq \mathbf{0} \tag{3.111c}$$

mit $\mathbf{L}(\mathbf{x}_k, \boldsymbol{\lambda}_k, \boldsymbol{\mu}_k) = \left(\frac{\partial^2}{\partial \mathbf{x}^2} L\right)(\mathbf{x}_k, \boldsymbol{\lambda}_k, \boldsymbol{\mu}_k)$ approximiert. Die KKT-Bedingungen für (3.111) lauten (siehe Satz 3.8)

$$(\nabla f)(\mathbf{x}_k) + \mathbf{L}(\mathbf{x}_k, \boldsymbol{\lambda}_k, \boldsymbol{\mu}_k)\tilde{\mathbf{p}}^* + (\nabla \mathbf{g})(\mathbf{x}_k)\tilde{\boldsymbol{\lambda}}^* + (\nabla \mathbf{h})(\mathbf{x}_k)\tilde{\boldsymbol{\mu}}^* = \mathbf{0} \tag{3.112a}$$
$$\tilde{\boldsymbol{\mu}}^* \geq \mathbf{0} \tag{3.112b}$$
$$\left((\nabla \mathbf{h})^{\mathrm{T}}(\mathbf{x}_k)\tilde{\mathbf{p}}^* + \mathbf{h}(\mathbf{x}_k)\right)^{\mathrm{T}}\tilde{\boldsymbol{\mu}}^* = 0 \tag{3.112c}$$
$$(\nabla \mathbf{g})^{\mathrm{T}}(\mathbf{x}_k)\tilde{\mathbf{p}}^* + \mathbf{g}(\mathbf{x}_k) = \mathbf{0} \tag{3.112d}$$
$$(\nabla \mathbf{h})^{\mathrm{T}}(\mathbf{x}_k)\tilde{\mathbf{p}}^* + \mathbf{h}(\mathbf{x}_k) \leq \mathbf{0} \tag{3.112e}$$

mit den Lagrange-Multiplikatoren $\tilde{\boldsymbol{\lambda}}$ und $\tilde{\boldsymbol{\mu}}$. Die Iterationsvorschrift des SQP-Verfahrens lautet analog zum gleichungsbeschränkten Fall $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \tilde{\mathbf{p}}^*$, $\boldsymbol{\lambda}_{k+1} = \tilde{\boldsymbol{\lambda}}^*$ und $\boldsymbol{\mu}_{k+1} = \tilde{\boldsymbol{\mu}}^*$. Ergibt sich in einem Iterationsschritt k für (3.111) die Lösung $\tilde{\mathbf{p}}^* = \mathbf{0}$, so folgt aus (3.112), dass damit ein Punkt $\mathbf{x}^* = \mathbf{x}_k$, $\boldsymbol{\lambda}^* = \tilde{\boldsymbol{\lambda}}^*$, $\boldsymbol{\mu}^* = \tilde{\boldsymbol{\mu}}^*$ gefunden wurde, der die KKT-Bedingungen des ursprünglichen Optimierungsproblems (3.110) erfüllt.

Unter bestimmten Voraussetzungen kann eine quadratische Konvergenzordnung (vergleiche Satz 2.11) des SQP-Verfahrens gegen $(\mathbf{x}^*, \boldsymbol{\lambda}^*, \boldsymbol{\mu}^*)$ gezeigt werden. Allerdings gilt diese Aussage im Allgemeinen nur für Startwerte $(\mathbf{x}_0, \boldsymbol{\lambda}_0, \boldsymbol{\mu}_0)$ in einer hinreichend kleinen Umgebung um $(\mathbf{x}^*, \boldsymbol{\lambda}^*, \boldsymbol{\mu}^*)$. Man spricht deshalb auch vom *lokalen SQP-Verfahren*, welches in Tabelle 3.3 zusammengefasst ist.

Das quadratische Programm (3.111) für einen Iterationsschritt k kann beispielsweise über die Methode der aktiven Beschränkungen (siehe Abschnitt 3.2.1) gelöst werden. Zur Veranschaulichung eines solchen Iterationsschritts betrachte man das nachfolgende Beispiel.

Beispiel 3.5. Gegeben ist das quadratische Optimierungsproblem

$$\min_{\tilde{\mathbf{p}} \in \mathbb{R}^2} \quad \frac{1}{2}\tilde{\mathbf{p}}^{\mathrm{T}}\mathbf{H}\tilde{\mathbf{p}} + \mathbf{c}^{\mathrm{T}}\tilde{\mathbf{p}} \tag{3.113a}$$
$$\text{u.B.v.} \quad \mathbf{a}_1^{\mathrm{T}}\tilde{\mathbf{p}} - b_1 = -\tilde{p}_1 + 2\tilde{p}_2 - 2 \leq 0 \quad \text{Ungleichungsbeschr. U1} \tag{3.113b}$$
$$\mathbf{a}_2^{\mathrm{T}}\tilde{\mathbf{p}} - b_2 = \tilde{p}_1 + 2\tilde{p}_2 - 6 \leq 0 \quad \text{Ungleichungsbeschr. U2} \tag{3.113c}$$
$$\mathbf{a}_3^{\mathrm{T}}\tilde{\mathbf{p}} - b_3 = \tilde{p}_1 - 2\tilde{p}_2 - 2 \leq 0 \quad \text{Ungleichungsbeschr. U3} \tag{3.113d}$$

Initialisierung: $\mathbf{x}_0$ (Zulässiger Startpunkt)
$\boldsymbol{\lambda}_0$, $\boldsymbol{\mu}_0$ (Startwerte der Lagrange-Multiplikatoren)
$k = 0$ (Startindex)
ε (Abbruchkriterium)

repeat

Schritt 1: Berechne $f(\mathbf{x}_k)$, $(\nabla f)(\mathbf{x}_k)$, $\mathbf{L}(\mathbf{x}_k, \boldsymbol{\lambda}_k, \boldsymbol{\mu}_k)$, $\mathbf{g}(\mathbf{x}_k)$, $(\nabla \mathbf{g})(\mathbf{x}_k)$, $\mathbf{h}(\mathbf{x}_k)$, $(\nabla \mathbf{h})(\mathbf{x}_k)$.

Schritt 2: Berechne $\tilde{\mathbf{p}}^*$, $\tilde{\boldsymbol{\lambda}}^*$, $\tilde{\boldsymbol{\mu}}^*$ durch Lösen des Optimierungsproblems (3.111).

Schritt 3: Setze $\mathbf{x}_{k+1} \leftarrow \mathbf{x}_k + \tilde{\mathbf{p}}^*, \boldsymbol{\lambda}_{k+1} \leftarrow \tilde{\boldsymbol{\lambda}}^*, \boldsymbol{\mu}_{k+1} \leftarrow \tilde{\boldsymbol{\mu}}^*, k \leftarrow k+1$.

until $\|\tilde{\mathbf{p}}^*\| \leq \varepsilon$

Tabelle 3.3: Lokales SQP-Verfahren.

$$\mathbf{a}_4^{\mathrm{T}}\tilde{\mathbf{p}} - b_4 = -\tilde{p}_1 \leq 0 \qquad \text{Ungleichungsbeschr. U4} \qquad (3.113e)$$
$$\mathbf{a}_5^{\mathrm{T}}\tilde{\mathbf{p}} - b_5 = -\tilde{p}_2 \leq 0 \qquad \text{Ungleichungsbeschr. U5} \qquad (3.113f)$$

mit $\mathbf{H} = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix}$ und $\mathbf{c} = [-2 \quad -5]^{\mathrm{T}}$. Als Startpunkt für die Methode der aktiven Beschränkungen wählt man den zulässigen Punkt $\tilde{\mathbf{p}}_0 = [2 \quad 0]^{\mathrm{T}}$, an dem die Ungleichungsbeschränkungen U3 und U5 aktiv sind. Die Arbeitsmenge W_0 der aktiven Ungleichungsbeschränkungen lautet damit $W_0 = \{3, 5\}$. Der nächste Iterationspunkt $\tilde{\mathbf{p}}_{j+1}$ wird in der Form $\tilde{\mathbf{p}}_{j+1} = \tilde{\mathbf{p}}_j + \tilde{\mathbf{s}}_j^*$ angesetzt. Der optimale Schritt $\tilde{\mathbf{s}}_j^*$ folgt aus

$$\min_{\tilde{\mathbf{s}}_j \in \mathbb{R}^2} \quad \frac{1}{2}(\tilde{\mathbf{p}}_j + \tilde{\mathbf{s}}_j)^{\mathrm{T}}\mathbf{H}(\tilde{\mathbf{p}}_j + \tilde{\mathbf{s}}_j) + \mathbf{c}^{\mathrm{T}}(\tilde{\mathbf{p}}_j + \tilde{\mathbf{s}}_j) \qquad (3.114a)$$
$$\text{u.B.v.} \quad \mathbf{a}_w^{\mathrm{T}}(\tilde{\mathbf{p}}_j + \tilde{\mathbf{s}}_j) - b_w = \mathbf{a}_w^{\mathrm{T}}\tilde{\mathbf{s}}_j = 0, \ \forall w \in W_j. \qquad (3.114b)$$

Die KKT-Bedingungen für (3.114) lauten mit der Matrix $\mathbf{A}_j$, deren Spalten durch $\mathbf{a}_w$, $w \in W_j$, gegeben sind, und den Lagrange-Multiplikatoren $\tilde{\boldsymbol{\nu}}_j$

$$\mathbf{H}\tilde{\mathbf{s}}_j^* + \mathbf{A}_j\tilde{\boldsymbol{\nu}}_j^* = -\mathbf{H}\tilde{\mathbf{p}}_j - \mathbf{c} \qquad (3.115a)$$
$$\mathbf{a}_w^{\mathrm{T}}\tilde{\mathbf{s}}_j^* = 0, \quad \forall w \in W_j. \qquad (3.115b)$$

Für $j = 0$ erhält man als Lösung von (3.115)

$$\begin{bmatrix} 2 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 2 & -2 & -1 \\ 1 & -2 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tilde{\mathbf{s}}_0^* \\ \tilde{\boldsymbol{\nu}}_0^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -2 \\ 5 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \qquad (3.116)$$

die Größen $\tilde{\mathbf{s}}_0^* = \mathbf{0}$ und $\tilde{\boldsymbol{\nu}}_0^* = [-2 \quad -1]^{\mathrm{T}}$ und somit $\tilde{\mathbf{p}}_1 = \tilde{\mathbf{p}}_0 = [2 \quad 0]^{\mathrm{T}}$. Nun wird die Ungleichung U3 (Lagrange-Multiplikator mit negativstem Wert) inaktiv gesetzt ($W_1 = \{5\}$) und (3.115) erneut für $j = 1$ gelöst, d. h. aus

$$\begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tilde{\mathbf{s}}_1^* \\ \tilde{\nu}_1^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -2 \\ 5 \\ 0 \end{bmatrix} \tag{3.117}$$

folgen $\tilde{\mathbf{s}}_1^* = [-1 \quad 0]^{\mathrm{T}}$ und $\tilde{\nu}_1^* = -5$. Damit kann der neue Iterationspunkt $\tilde{\mathbf{p}}_2$ zu $\tilde{\mathbf{p}}_2 = \tilde{\mathbf{p}}_1 + \tilde{\mathbf{s}}_1^*$ berechnet werden, vorausgesetzt es werden keine inaktiven Ungleichungsbeschränkungen verletzt. Um diesen Fall zu berücksichtigen, wird eine Schrittweite $\beta_j > 0$ verwendet, so dass $\tilde{\mathbf{p}}_{j+1} = \tilde{\mathbf{p}}_j + \beta_j \tilde{\mathbf{s}}_j^*$ gilt. Die Wahl der Schrittweite β_j erfolgt nun auf Basis folgender Überlegungen. Wenn für alle inaktiven (affinen) Ungleichungsbeschränkungen gilt $\mathbf{a}_i^{\mathrm{T}} \tilde{\mathbf{s}}_j^* \leq 0$, dann kann $\beta_j > 0$ beliebig gewählt werden ohne eine Ungleichung $\mathbf{a}_i^{\mathrm{T}}(\tilde{\mathbf{p}}_j + \beta_j \tilde{\mathbf{s}}_j^*) \leq b_i$, $i \notin W_j$ zu verletzen. Falls hingegen $\mathbf{a}_i^{\mathrm{T}} \tilde{\mathbf{s}}_j^* > 0$, dann ist die Schrittweite durch $\beta_j \leq \frac{b_i - \mathbf{a}_i^{\mathrm{T}} \tilde{\mathbf{p}}_j}{\mathbf{a}_i^{\mathrm{T}} \tilde{\mathbf{s}}_j^*}$ begrenzt. Da das Minimum der quadratischen Funktion für $\beta_j = 1$ erreicht wird, folgt die Wahl der Schrittweite zu

$$\beta_j = \min \left\{ 1, \min_{i \notin W_j, \mathbf{a}_i^{\mathrm{T}} \tilde{\mathbf{s}}_j^* > 0} \frac{b_i - \mathbf{a}_i^{\mathrm{T}} \tilde{\mathbf{p}}_j}{\mathbf{a}_i^{\mathrm{T}} \tilde{\mathbf{s}}_j^*} \right\}. \tag{3.118}$$

Im vorliegenden Fall gilt $\beta_1 = \min\{1, \underbrace{4}_{\text{U1}}, \underbrace{2}_{\text{U4}}\} = 1$ und damit $\tilde{\mathbf{p}}_2 = [1 \quad 0]^{\mathrm{T}}$. Da die optimale Schrittweite $\beta_1 = 1$ möglich ist, muss (3.115) nicht erneut gelöst werden. Es kann direkt die Ungleichung U5 (Lagrange-Multiplikator ist negativ) inaktiv gesetzt ($W_2 = \{\ \}$) und das unbeschränkte Optimierungsproblem zu $\tilde{\mathbf{s}}_2^* = [0 \quad 2.5]^{\mathrm{T}}$ gelöst werden. Die maximale Schrittweite gemäß (3.118) errechnet sich zu $\beta_2 = \min\{1, \underbrace{0.6}_{\text{U1}}, \underbrace{1}_{\text{U2}}\} = 0.6$ und damit folgt $\tilde{\mathbf{p}}_3 = [1 \quad 1.5]^{\mathrm{T}}$. Man erkennt nun, dass die Ungleichung U1 aktiv ist (der Wert $\beta_2 = 0.6$ wurde gerade durch die Ungleichungsbeschränkung U1 bestimmt), weshalb die Arbeitsmenge der aktiven Beschränkungen zu $W_3 = \{1\}$ gesetzt wird. Aus (3.115) folgt mit

$$\begin{bmatrix} 2 & 0 & -1 \\ 0 & 2 & 2 \\ -1 & 2 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tilde{\mathbf{s}}_3^* \\ \tilde{\nu}_3^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 2 \\ 0 \end{bmatrix} \tag{3.119}$$

die Lösung $\tilde{\mathbf{s}}_3^* = [0.4 \quad 0.2]^{\mathrm{T}}$ und $\tilde{\nu}_3^* = 0.8$. Die Schrittweite β_3 folgt aus der Beziehung (3.118) zu $\beta_3 = \min\{1, \underbrace{2.5}_{\text{U2}}\} = 1$. Daher und auf Grund des positiven Lagrange-Multiplikators $\tilde{\nu}_3^* = 0.8$ stellt $\tilde{\mathbf{p}}^* = \tilde{\mathbf{p}}_3 + \beta_3 \tilde{\mathbf{s}}_3^* = [1.4 \quad 1.7]^{\mathrm{T}}$ die optimale Lösung

von (3.113) dar. Der Lagrange-Multiplikator für das quadratische Programm (3.113) lautet $\tilde{\boldsymbol{\mu}}^* = [\tilde{\nu}_3^* \quad 0 \quad 0 \quad 0 \quad 0]^{\mathrm{T}}$.

Für die Formulierung des quadratischen Programms (3.111) wird in jedem Iterationsschritt die Hessematrix der Lagrangefunktion $L(\mathbf{x}_k, \boldsymbol{\lambda}_k, \boldsymbol{\mu}_k)$ benötigt. Damit können folgende Probleme verbunden sein. Die exakte Hessematrix ist in vielen Anwendungen nicht bekannt und ihre näherungsweise numerische Berechnung mit finiten Differenzen (vgl. Abschnitt 1.3.4) kann aufwändig und ungenau sein. Ferner kann die Hessematrix indefinit sein, was insbesondere dann vorkommt, wenn das Verfahren nicht in einer hinreichend kleinen Umgebung um $(\mathbf{x}^*, \boldsymbol{\lambda}^*, \boldsymbol{\mu}^*)$ gestartet wird. Eine indefinite Hessematrix erschwert die Lösung des quadratischen Programms. Aus diesen Gründen ersetzt man in der Praxis die Hessematrix $\mathbf{L}(\mathbf{x}_k, \boldsymbol{\lambda}_k, \boldsymbol{\mu}_k)$ beim SQP-Verfahren häufig durch eine geeignete *positiv definite Approximation* $\mathbf{H}_k$. Für die Berechnung von $\mathbf{H}_k$ in jedem Iterationsschritt k kann in Analogie zur Quasi-Newton-Methode die *modifizierte BFGS Methode* (siehe z. B. [3.7])

$$\mathbf{H}_{k+1} = \mathbf{H}_k + \frac{\mathbf{q}_k \mathbf{q}_k^{\mathrm{T}}}{\mathbf{q}_k^{\mathrm{T}} \mathbf{d}_k} - \frac{\mathbf{H}_k \mathbf{d}_k \mathbf{d}_k^{\mathrm{T}} \mathbf{H}_k}{\mathbf{d}_k^{\mathrm{T}} \mathbf{H}_k \mathbf{d}_k} \tag{3.120a}$$

mit

$$\mathbf{d}_k = \mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k \tag{3.120b}$$

$$\mathbf{y}_k = \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} L\right)^{\mathrm{T}} (\mathbf{x}_{k+1}, \boldsymbol{\lambda}_k, \boldsymbol{\mu}_k) - \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} L\right)^{\mathrm{T}} (\mathbf{x}_k, \boldsymbol{\lambda}_k, \boldsymbol{\mu}_k) \tag{3.120c}$$

$$\theta_k = \begin{cases} 1, & \text{wenn } \mathbf{d}_k^{\mathrm{T}} \mathbf{y}_k \geq 0.2 \mathbf{d}_k^{\mathrm{T}} \mathbf{H}_k \mathbf{d}_k \\ \frac{0.8 \mathbf{d}_k^{\mathrm{T}} \mathbf{H}_k \mathbf{d}_k}{\mathbf{d}_k^{\mathrm{T}} \mathbf{H}_k \mathbf{d}_k - \mathbf{d}_k^{\mathrm{T}} \mathbf{y}_k} & \text{sonst} \end{cases} \tag{3.120d}$$

$$\mathbf{q}_k = \theta_k \mathbf{y}_k + (1 - \theta_k) \mathbf{H}_k \mathbf{d}_k \tag{3.120e}$$

verwendet werden. Sie wird auch *gedämpfte BFGS Methode* genannt. Man beachte, dass hier direkt die Hessematrix und nicht deren Inverse wie in Abschnitt 2.3.2.4 approximiert wird. Unter Verwendung von (3.120) ist garantiert, dass $\mathbf{H}_{k+1}$ symmetrisch und positiv definit ist, wenn $\mathbf{H}_k$ symmetrisch und positiv definit war. Damit kann das lokale SQP-Verfahren gemäß Tabelle 3.3 dahingehend modifiziert werden, dass ausgehend von einer symmetrischen, positiv definiten Matrix $\mathbf{H}_0$ für $k > 0$ in Schritt 1 des Verfahrens $\mathbf{H}_k$ gemäß (3.120) statt $\mathbf{L}(\mathbf{x}_k, \boldsymbol{\lambda}_k, \boldsymbol{\mu}_k)$ berechnet wird. Dadurch verschlechtert sich zwar das Konvergenzverhalten des Verfahrens, es kann aber zumindest noch superlineare Konvergenz in einer hinreichend kleinen Umgebung um $(\mathbf{x}^*, \boldsymbol{\lambda}^*, \boldsymbol{\mu}^*)$ nachgewiesen werden.

3.2.4.2 Globalisierung des SQP-Verfahrens

Die im Zuge der iterativen Lösungssuche des SQP-Verfahrens auftretenden Punkte $\mathbf{x}_k$ erfüllen im Allgemeinen nicht strikt die Bedingung $\mathbf{x}_k \in \mathcal{X}$, d. h. sie können Beschränkungen verletzen. Ferner konvergiert der SQP-Algorithmus gemäß Tabelle 3.3 im Allgemeinen nur für Startwerte $(\mathbf{x}_0, \boldsymbol{\lambda}_0, \boldsymbol{\mu}_0)$, die in einer hinreichend kleinen Umgebung um $(\mathbf{x}^*, \boldsymbol{\lambda}^*, \boldsymbol{\mu}^*)$ liegen. Um zu erreichen, dass das SQP-Verfahren (idealerweise) für beliebige Startwerte

konvergiert, führt man eine Globalisierung des Verfahrens durch. In Analogie zur Newton-Methode (siehe Abschnitt 2.3.2.3) wird dies durch die Einführung einer Schrittweite $\alpha_k > 0$ erzielt. In Schritt 3 des Algorithmus berechnet man $\mathbf{x}_{k+1}$ daher in der Form

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_k \tilde{\mathbf{p}}^* . \tag{3.121}$$

Die Schrittweite α_k folgt aus einem geeignet formulierten Liniensuchproblem. Die Kostenfunktion dieses Liniensuchproblems muss eine Bewertung ermöglichen, ob $\mathbf{x}_{k+1}$ *besser* ist als $\mathbf{x}_k$. Eine solche Bewertung kann für unbeschränkte Optimierungsprobleme direkt anhand der Kostenfunktionswerte an den Punkten $\mathbf{x}_k$ und $\mathbf{x}_{k+1}$ erfolgen. Dies gilt im Allgemeinen aber nicht für beschränkte Optimierungsprobleme. Ein Punkt $\mathbf{x}_{k+1}$ ist klarerweise besser als $\mathbf{x}_k$, wenn er sowohl die Kostenfunktion als auch die Verletzung von Beschränkungen reduziert. In vielen Fällen aber sind die Reduktion der Kostenfunktion und die genauere Einhaltung der Beschränkungen gegensätzliche Ziele, so dass $\mathbf{x}_{k+1}$ gegenüber $\mathbf{x}_k$ zwar den Kostenfunktionswert verbessert jedoch die Beschränkungen stärker verletzt oder umgekehrt (siehe [3.1]). Um in dieser Hinsicht bei der Wahl von α_k einen guten Kompromiss zu finden, kann eine so genannte *Bewertungsfunktion* (englisch: *merit function*) verwendet werden. Eine gängige Wahl dafür ist die Funktion

$$l(\mathbf{x}, \eta) = f(\mathbf{x}) + \eta \left(\sum_{i=1}^{p} |g_i(\mathbf{x})| + \sum_{i=1}^{q} \max\{0, h_i(\mathbf{x})\} \right) . \tag{3.122}$$

Mit der Wahl des Faktors $\eta > 0$ wird die Gewichtung der Verletzung von Beschränkungen gegenüber der Kostenfunktion eingestellt. Die optimale Schrittweite α_k folgt nun aus dem Liniensuchproblem

$$\alpha_k = \arg\min_{\alpha} \; l(\mathbf{x}_k + \alpha \tilde{\mathbf{p}}^*, \eta) \; . \tag{3.123}$$

In der Praxis wird α_k so gewählt, dass mit $l(\mathbf{x}_k + \alpha_k \tilde{\mathbf{p}}^*, \eta)$ eine hinreichende Verbesserung gegenüber $l(\mathbf{x}_k, \eta)$ erreicht wird. Dies kann beispielsweise mit einem Verfahren zur Schrittweitenwahl aus Abschnitt 2.3.1 erfolgen. Häufig ist eine Anpassung von η in jedem Iterationsschritt des SQP-Verfahrens erforderlich (vgl. [3.5]). Nur in seltenen Fällen besitzen Bewertungsfunktionen die wünschenswerte Eigenschaft, dass ein lokales Minimum $\mathbf{x}^*$ von (3.110) auch ein lokales Minimum von $l(\mathbf{x}, \eta)$ ist. Man spricht dann auch von einer *exakten Bewertungsfunktion*.

3.2.5 Methode der Straf- und Barrierefunktionen

Mit Hilfe von Straf- und Barrierefunktionen lassen sich beschränkte in (unbeschränkte) Optimierungsprobleme überführen, welche dann z. B. mit den in Abschnitt 2 beschriebenen Methoden gelöst werden können.

3.2.5.1 Straffunktionen

Die grundlegende Idee der Methode der Straffunktionen besteht darin, das *beschränkte Optimierungsproblem*

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathcal{X}} f(\mathbf{x}) \tag{3.124}$$

mit der zulässigen Menge $\mathcal{X}$ in ein *unbeschränktes Optimierungsproblem* der Form

$$\min_{\mathbf{x}\in\mathbb{R}^n} f(\mathbf{x}) + cP(\mathbf{x}) \tag{3.125}$$

mit einem positiven Gewichtungsparameter c und der stetigen Funktion $P(\mathbf{x})$ überzuführen. Die Funktion $P(\mathbf{x})$ wird als *Straffunktion* bezeichnet und besitzt die Eigenschaft, dass $P(\mathbf{x}) > 0$ für alle $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \backslash \mathcal{X}$ und $P(\mathbf{x}) = 0$ für alle $\mathbf{x} \in \mathcal{X}$. Die zulässige Menge $\mathcal{X}$ ist typischerweise implizit über Gleichungs- und Ungleichungsbeschränkungen definiert. Für $\mathcal{X} = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \,|\, g_i(\mathbf{x}) = 0,\ i = 1,\dots,p,\ h_j(\mathbf{x}) \leq 0,\ j = 1,\dots,q\}$ kann als Straffunktion

$$P(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{p}(g_i(\mathbf{x}))^2 + \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{q}(\max\{0, h_i(\mathbf{x})\})^2 \tag{3.126}$$

verwendet werden. Je nach Wertebereich und physikalischer Bedeutung der Beschränkungsfunktionen $g_i(\mathbf{x})$ und $h_i(\mathbf{x})$ kann es für das numerische Lösungsverhalten der Methode sinnvoll sein, die relative Bedeutung der einzelnen Summanden in $P(\mathbf{x})$ durch zusätzlich Gewichtungsfaktoren oder Normierungen zu beeinflussen (vgl. [3.6]). Abbildung 3.7 zeigt für einen eindimensionalen Fall den Verlauf der Straffunktionen $cP(x)$ für unterschiedliche Werte von $c > 0$ und zwei Ungleichungsbeschränkungen mit $h_1(x) = x - b$ und $h_2(x) = a - x$.

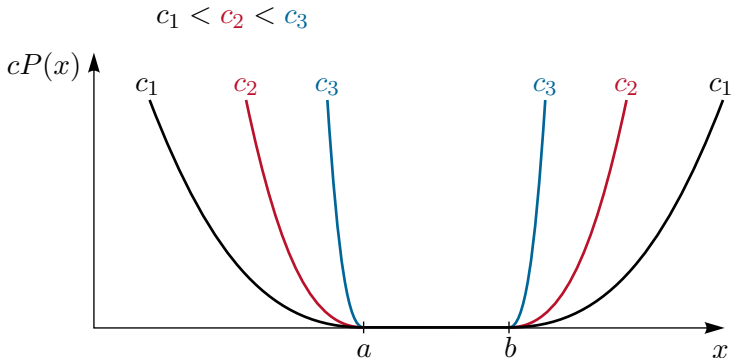


Abbildung 3.7: Straffunktionen $cP(x)$ für verschiedene Werte von c.

Für größere Werte von c ist zu erwarten, dass die Lösung des unbeschränkten Optimierungsproblems (3.125) zumindest in der Nähe des zulässigen Gebiets $\mathcal{X}$ zu liegen kommt und für $c \to \infty$ wird die Lösung von (3.125) gegen jene von (3.124) konvergieren. Dabei wird so vorgegangen, dass für eine gegen Unendlich strebende Folge $\{c_l\},\ l = 1, 2, \dots$ mit $c_1 > 0$ und $c_{l+1} > c_l$ das unbeschränkte Optimierungsproblem (3.125) wiederkehrend mit $c = c_l$ gelöst wird und man jeweils einen optimalen Punkt $\mathbf{x}_l^*$ erhält. Für die Lösung des Optimierungsproblems (3.125) mittels numerischer Verfahren bietet es sich an, den Punkt $\mathbf{x}_l^*$ als Startpunkt für die Optimierungsaufgabe mit c_{l+1} zu verwenden. Bei der Methode der Straffunktionen gelten folgende Hilfssätze.

Lemma 3.3 (Ungleichungen bei der Methode der Straffunktionen)**.** *Für $c_{l+1} > c_l > 0$ und die zugehörigen Lösungen $\mathbf{x}_l^*$ und $\mathbf{x}_{l+1}^*$ des unbeschränkten Optimierungsproblems (3.125) gelten folgende Ungleichungen*

$$f(\mathbf{x}_l^*) + c_l P(\mathbf{x}_l^*) \leq f(\mathbf{x}_{l+1}^*) + c_{l+1} P(\mathbf{x}_{l+1}^*) \tag{3.127a}$$
$$P(\mathbf{x}_l^*) \geq P(\mathbf{x}_{l+1}^*) \tag{3.127b}$$
$$f(\mathbf{x}_l^*) \leq f(\mathbf{x}_{l+1}^*) \ . \tag{3.127c}$$

Beweis. Aufgrund von $c_{l+1} > c_l$ und der Definitionen von $\mathbf{x}_l^*$ und $\mathbf{x}_{l+1}^*$ gilt unmittelbar

$$f(\mathbf{x}_{l+1}^*) + c_{l+1} P(\mathbf{x}_{l+1}^*) \geq f(\mathbf{x}_{l+1}^*) + c_l P(\mathbf{x}_{l+1}^*) \geq f(\mathbf{x}_l^*) + c_l P(\mathbf{x}_l^*), \tag{3.128}$$

womit (3.127a) gezeigt ist. Aus

$$-f(\mathbf{x}_{l+1}^*) - c_l P(\mathbf{x}_{l+1}^*) \leq -f(\mathbf{x}_l^*) - c_l P(\mathbf{x}_l^*) \tag{3.129a}$$
$$f(\mathbf{x}_{l+1}^*) + c_{l+1} P(\mathbf{x}_{l+1}^*) \leq f(\mathbf{x}_l^*) + c_{l+1} P(\mathbf{x}_l^*) \tag{3.129b}$$

folgt

$$(c_{l+1} - c_l) P(\mathbf{x}_{l+1}^*) \leq (c_{l+1} - c_l) P(\mathbf{x}_l^*) \tag{3.130}$$

und mit $c_{l+1} > c_l$ daher (3.127b). Aus (3.128) erhält man

$$f(\mathbf{x}_{l+1}^*) + c_l \underbrace{\left(P(\mathbf{x}_{l+1}^*) - P(\mathbf{x}_l^*)\right)}_{\leq 0} \geq f(\mathbf{x}_l^*), \tag{3.131}$$

woraus sich schließlich (3.127c) ergibt. □

Lemma 3.4 (Methode der Straffunktionen)**.** *Wenn $\mathbf{x}^*$ die Lösung des beschränkten Optimierungsproblems (3.124) ist, dann gilt für jedes l der Folge $\{c_l\}$*

$$f(\mathbf{x}^*) \geq f(\mathbf{x}_l^*) + c_l P(\mathbf{x}_l^*) \geq f(\mathbf{x}_l^*) \ . \tag{3.132}$$

Aufgabe 3.13. Beweisen Sie Lemma 3.4.

Satz 3.13 (Konvergenz der Methode der Straffunktionen)**.** *Angenommen, $\{\mathbf{x}_l^*\}$ sei eine Folge von Punkten, die durch die Lösung des unbeschränkten Optimierungsproblems (3.125) für eine gegen Unendlich strebende Folge $\{c_l\}$, $l = 1, 2, \ldots$ mit $c_1 > 0$ und $c_{l+1} > c_l$ erhalten wurde. Dann ist jeder Grenzwert der Folge $\{\mathbf{x}_l^*\}$ eine Lösung des beschränkten Optimierungsproblems (3.124).*

3.2.5.2 Barrierefunktionen

Die Methode der Barrierefunktionen ist auf das beschränkte Optimierungsproblem (3.124) dann anwendbar, wenn die zulässige Menge $\mathcal{X}$ eine *robuste Menge* ist (siehe Abbildung

3.1). Folglich können Gleichungsbeschränkungen $\mathbf{g}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ nicht durch Barrierefunktionen ersetzt werden. Es sei nun $\check{\mathcal{X}}$ das (nichtleere) Innere von $\mathcal{X}$. Eine *Barrierefunktion* $B(\mathbf{x})$ ist auf $\check{\mathcal{X}}$ definiert und ist auf diesem Gebiet stetig. Außerdem gilt $B(\mathbf{x}) \to \infty$, wenn sich $\mathbf{x}$ dem Rand von $\mathcal{X}$ nähert.

Angenommen, $\mathcal{X} = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \,|\, h_i(\mathbf{x}) \leq 0,\ i = 1, \ldots, q\}$ sei eine robuste Menge mit dem Inneren $\check{\mathcal{X}} = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \,|\, h_i(\mathbf{x}) < 0,\ i = 1, \ldots, q\}$, dann kann als Barrierefunktion

$$B(\mathbf{x}) = -\sum_{i=1}^{q} \frac{1}{h_i(\mathbf{x})} \tag{3.133}$$

verwendet werden. Abbildung 3.8 zeigt für den eindimensionalen Fall den Verlauf der Barrierefunktion $\frac{1}{c}B(x)$ für unterschiedliche Werte des Gewichtungsparameters $c > 0$ und zwei Ungleichungsbeschränkungen mit $h_1(x) = x - b$ und $h_2(x) = a - x$. Eine alternative

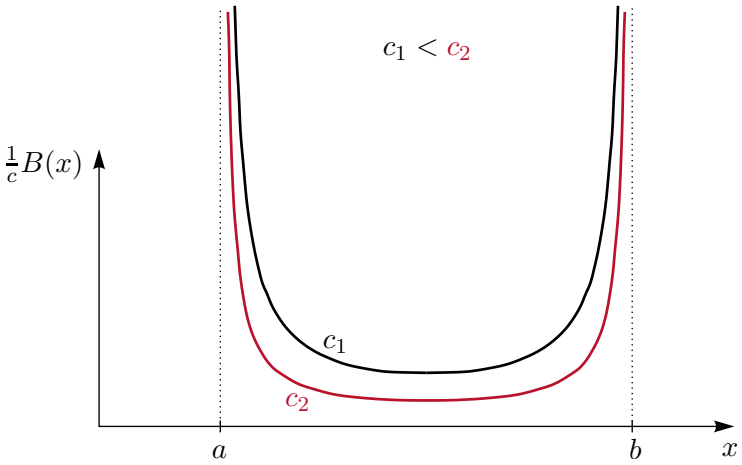


Abbildung 3.8: Barrierefunktionen $\frac{1}{c}B(x)$ für verschiedene Werte von c.

Möglichkeit, eine Barrierefunktion zu konstruieren, bietet die Funktion

$$B(\mathbf{x}) = -\sum_{i=1}^{q} \log(-h_i(\mathbf{x}))\ . \tag{3.134}$$

Je nach Wertebereich und physikalischer Bedeutung der Beschränkungsfunktionen $h_i(\mathbf{x})$ kann es für das numerische Lösungsverhalten der Methode sinnvoll sein, die relative Bedeutung der einzelnen Summanden in $B(\mathbf{x})$ durch zusätzlich Gewichtungsfaktoren oder Normierungen zu beeinflussen (vgl. [3.6]).

Die Vorgehensweise bei der Methode der Barrierefunktionen ist nun ähnlich zur Methode der Straffunktionen. Es wird für eine gegen Unendlich strebende Folge $\{c_l\},\ l = 1, 2, \ldots$ mit $c_1 > 0$ und $c_{l+1} > c_l$ das Optimierungsproblem

$$\min_{\mathbf{x} \in \check{\mathcal{X}}} f(\mathbf{x}) + \frac{1}{c_l} B(\mathbf{x}) \tag{3.135}$$

gelöst und mit $\mathbf{x}_l^*$ der jeweilige optimale Punkt bezeichnet. Es handelt sich bei (3.135) noch immer um ein beschränktes Optimierungsproblem, dessen Beschränkungen sogar

restriktiver sein können als jene des ursprünglichen Problems (3.124). Dennoch kann die Lösung von (3.135) mit Methoden der unbeschränkten statischen Optimierung, wie sie z. B. in Abschnitt 2 vorgestellt wurden, erfolgen, da der Kostenfunktionswert nahe dem Rand von $\mathcal{X}$ gegen Unendlich strebt. In diesem Zusammenhang ist bei der Verwendung von Methoden der unbeschränkten statischen Optimierung besonders darauf zu achten, dass die Kostenfunktion $f(\mathbf{x}) + B(\mathbf{x})/c_l$ nur im (nicht leeren) Inneren $\mathring{\mathcal{X}}$ des zulässigen Gebiets $\mathcal{X}$ definiert ist, d. h. nur dort ausgewertet werden darf. Folglich ist bei der Methode der Barrierefunktionen jeder Punkt $\mathbf{x}_l^*$ ein zulässiger Punkt. Bei der numerischen Lösung von (3.135) bietet es sich wieder an, $\mathbf{x}_l^*$ als Startpunkt für die Optimierung mit $c_{l+1} > c_l$ zu verwenden. Es gilt nun folgender Satz.

Satz 3.14 (Konvergenz der Methode der Barrierefunktionen)**.** *Angenommen, $\{\mathbf{x}_l^*\}$ sei eine Folge von Punkten, die durch die Lösung des Optimierungsproblems (3.135) für eine gegen Unendlich strebende Folge $\{c_l\}$, $l = 1, 2, \ldots$ mit $c_1 > 0$ und $c_{l+1} > c_l$ erhalten wurde. Dann ist jeder Grenzwert der Folge $\{\mathbf{x}_l^*\}$ eine Lösung des beschränkten Optimierungsproblems (3.124).*

3.3 Beispiel: Rosenbrock's „Bananenfunktion“

Es wird das beschränkte Optimierungsproblem (vgl. (2.121))

$$\min_{\mathbf{x}\in\mathbb{R}^2} \quad f(\mathbf{x}) = 100(x_2 - x_1^2)^2 + (x_1 - 1)^2 \tag{3.136a}$$

$$\text{u.B.v.} \quad x_1^2 + x_2^2 \geq 0.5^2 \tag{3.136b}$$

betrachtet. Die Kostenfunktion („Bananenfunktion“) ist gemeinsam mit dem Rand des zulässigen Gebiets $\mathcal{X}$ in Abbildung 3.9 dargestellt.

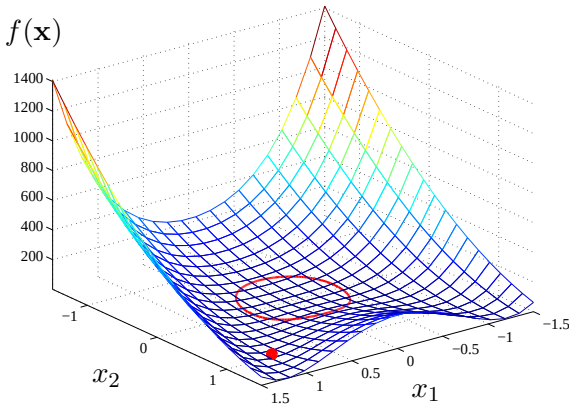


Abbildung 3.9: Profil der Rosenbrock Bananenfunktion und Rand des zulässigen Gebiets.

Zur Lösung von beschränkten Optimierungsproblemen bietet sich in MATLAB der Befehl `fmincon` an. In diesem Befehl sind die folgenden vier Algorithmen implementiert:

1. `interior-point`: Verwendet logarithmische Barrierefunktionen.

2. `active-set`: Verwendet die sequentielle quadratische Programmierung mit unterlagerter Lösung des quadratischen Programms nach der Methode der aktiven Beschränkungen.

3. `sqp`: Ähnlich `active-set`, unterscheidet sich aber in den unterlagerten Programmroutinen sowie den Eigenschaften der Iteration zum Minimum.

4. `trust region reflective`: Methode der Vertrauensbereiche, erweitert auf Optimierungsprobleme mit entweder Beschränkungen der Form $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$ *oder* Beschränkungen der Form $\mathbf{l} \leq \mathbf{x} \leq \mathbf{u}$, wobei $\mathbf{l}$ bzw. $\mathbf{u}$ untere bzw. obere Schranken von $\mathbf{x}$ bezeichnen.

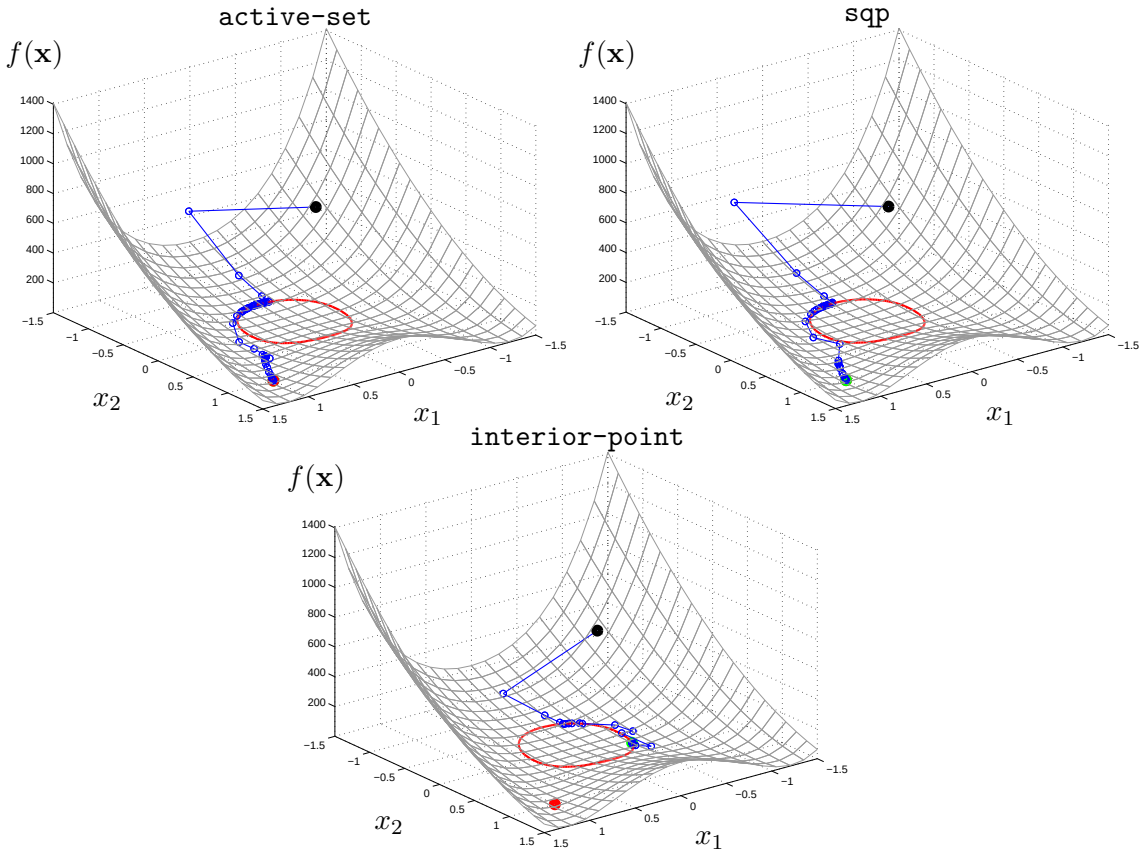


Abbildung 3.10: Rosenbrock Bananenfunktion: Vergleich der numerischen Verfahren aus `fmincon`.

Die Lösung des Optimierungsproblems (3.136) ist damit nur mit den Methoden `active-set`, `interior-point` und `sqp` möglich, weil `trust region reflective` keine nichtlinearen Beschränkungen zulässt. Die Ergebnisse der drei angesprochenen Algorithmen sind in Abbildung 3.10 dargestellt. Die Algorithmen `active-set` und `sqp` finden das globale Minimum, `interior-point` konvergiert zu einem anderen lokalen Minimum. Die gewählten Einstellungen der einzelnen Algorithmen sind in der MATLAB-Implementierung in Code-Auflistung 3.1 ersichtlich.

Listing 3.1: MATLAB-Code für die beschränkte Optimierung der Rosenbrock'schen Bananenfunktion.

```
function [Xopt,fopt,exitflag,output] = rosenbrock_problem_constrained(Xinit,testCase)
% ---------------------------------------------------------
% Xinit:  Startpunkt
% testCase: 1 - Active-Set
%           2 - SQP
%           3 - Interior Point

old = [Xinit; rosenbrock(Xinit)];
opt = optimoptions('fmincon','Display','iter','PlotFcns',@plot_iterates); % Optionen für die Ausgabe

switch testCase
 case 1,     % Active-Set mit SQP
  opt = optimoptions(opt,'Algorithm','active-set','GradObj','on','MaxFunEvals',1000,'TolFun',1e-12);
  [Xopt,fopt,exitflag,output] = fmincon(@rosenbrock,Xinit,[],[],[],[],[],[],@nonlconstr1,opt);
 case 2,     % SQP
  opt = optimoptions(opt,'Algorithm','sqp','GradObj','on','MaxFunEvals',2000,'TolX',1e-18);
  [Xopt,fopt,exitflag,output] = fmincon(@rosenbrock,Xinit,[],[],[],[],[],[],@nonlconstr1,opt);
 case 3,     % Interior-Point
  opt = optimoptions(opt,'Algorithm','interior-point','GradObj','on','TolFun',1e-12);
  [Xopt,fopt,exitflag,output] = fmincon(@rosenbrock,Xinit,[],[],[],[],[],[],@nonlconstr1,opt);
end

function [c,ceq] = nonlconstr1(x) % Nichtlineare Beschränkungsfunktion
c = 0.5^2 - (x(1))^2 - (x(2))^2; ceq = [];

function stop = plot_iterates(x,info,state)
global old
f = rosenbrock(x);
switch state                                          % Grafische Ausgabe:
 case 'init',                                         % Initialisierung
  plot_surface(x,f);
  plot_constraints;
 case 'iter',                                         % Iterationen
  plot3([old(1),x(1)],[old(2),x(2)],[old(3),f],'b-o','LineWidth',1);
 case 'done',
  plot3(x(1),x(2),f,'go','LineWidth',5);
end
stop = false;                                         % kein Abbruchkriterium
old = [x;f];

function plot_constraints % Zeichnen der eingestellten Beschränkung
[X1,X2] = meshgrid(-1.5:0.15:1.5);
x1_values = [-1.5:0.15:1.5]; x2_values = [-1.5:0.15:1.5]; r = 0.5;
x1_plot_values = [-r:0.01:r]; x2_plot_values1 = sqrt(r^2-(x1_plot_values).^2);
x2_plot_values2 = -sqrt(r^2-(x1_plot_values).^2);
z_values1 = 100*(x2_plot_values1-x1_plot_values.^2).^2 + (x1_plot_values-1).^2;
z_values2 = 100*(x2_plot_values2-x1_plot_values.^2).^2 + (x1_plot_values-1).^2;
line(x1_plot_values,x2_plot_values1,z_values1,'LineWidth',2,'color','r');
line(x1_plot_values,x2_plot_values2,z_values2,'LineWidth',2,'color','r');

function plot_surface(x,f) % Zeichnen der Rosenbrock-Funktion mit Startpunkt und optimalem Punkt
[X1,X2] = meshgrid(-1.5:0.15:1.5);           % 3D-Profil von
F = 100*(X2-X1.^2).^2 + (X1-1).^2;           % Rosenbrock-Funktion
h = surf(X1,X2,F,'EdgeColor',0.6*[1,1,1],'FaceColor','none');
hold on; axis tight;
plot3(x(1),x(2),f,'ko','LineWidth',5);                % Startpunkt
plot3(1,1,0,'ro','LineWidth',5);                      % optimale Lösung
xlabel('x_1'); ylabel('x_2'); zlabel('f')
set(gcf,'ToolBar','figure');                          % Aktivieren der Menüleiste (Zoom, etc.)
set(gca,'Xdir','reverse','Ydir','reverse');
```

```
function [f, grad, H] = rosenbrock(x)
grad = {}; H = {};
f = 100*(x(2)-x(1)^2)^2 + (x(1)-1)^2;                    % Rosenbrock-Funktion
if nargout>1,                                              % falls Gradient angefordert wird
  grad = [ -400*(x(2)-x(1)^2)*x(1)+2*(x(1)-1); 200*(x(2)-x(1)^2) ];
end
if nargout>2,                                              % falls Hessematrix angefordert wird
  H = [ -400*(x(2)-3*x(1)^2)+2, -400*x(1); -400*x(1), 200 ];
end
```

3.4 Software-Übersicht

Im Folgenden ist eine Auswahl an Software zur Lösung von statischen Optimierungsproblemen zusammengestellt.

Lineare Optimierung

- linprog: MATLAB Optimization Toolbox (kostenpflichtig)
- CPLEX (kostenpflichtig)
  `http://www.ilog.com/products/cplex`
- GLPK: „GNU Linear Programming Kit“ (frei zugänglich)
  `http://www.gnu.org/software/glpk`
- lp_solve: Mixed-Integer Lineare Optimierung (frei zugänglich)
  `http://lpsolve.sourceforge.net`

Quadratische Optimierung

- quadprog: MATLAB Optimization Toolbox (kostenpflichtig)
- CPLEX (kostenpflichtig)
  `http://www.ilog.com/products/cplex`
- OOQP (frei zugänglich)
  `http://pages.cs.wisc.edu/~swright/ooqp`
- qpOASES (frei zugänglich)
  `https://projects.coin-or.org/qpOASES`
- CVX (frei zugänglich)
  `http://cvxr.com/cvx/`
- LOQO (kostenpflichtig)
  `http://www.princeton.edu/~rvdb`

Nichtlineare Optimierung

- fmincon: MATLAB Optimization Toolbox (kostenpflichtig)
- LOQO (kostenpflichtig)
  `http://www.princeton.edu/~rvdb`

- MINOS (kostenpflichtig)
  `http://www.sbsi-sol-optimize.com/asp/sol_product_minos.htm`
- SNOPT (kostenpflichtig, aber Studentenversion frei zugänglich)
  `http://www.sbsi-sol-optimize.com/asp/sol_product_snopt.htm`
- DONLP2 (frei zugänglich)
  `ftp://ftp.mathematik.tu-darmstadt.de/pub/department/software/opti`
- IPOPT (frei zugänglich)
  `https://projects.coin-or.org/Ipopt`
- NLOPT (frei zugänglich)
  `http://ab-initio.mit.edu/wiki/index.php/NLopt`
- YALMIP (frei zugänglich)
  `https://yalmip.github.io/`

Modellierungssprachen

Viele der oben angegebenen Optimierer unterstützen eine Anbindung an MATLAB (z. B. lp_solve, SNOPT, DONLP2, IPOPT) oder an eine der Modellierungssprachen AMPL (z. B. LOQO, GLPK, IPOPT) oder GAMS (z. B. MINOS). Diese Sprachen bieten eine symbolorientierte Syntax zum Formulieren von Optimierungsproblemen:

- AMPL: "A Mathematical Programming Language"
  `http://www.ampl.com`
- GAMS: "General Algebraic Modeling System"
  `http://www.gams.com`
- OPL: "Optimization Programming Language"
  `https://www-01.ibm.com/software/commerce/optimization/modeling/`

3.5 Literatur

[3.1] I. Griva, S. Nash und A. Sofer, *Linear and Nonlinear Optimization*, 2. Aufl. Society for Industrial und Applied Mathematics, 2009.

[3.2] D. P. Bertsekas, *Nonlinear Programming*, 2. Aufl. Athena Scientific, 1999.

[3.3] M. Bazaraa, H. Sherali und C. Shetty, *Nonlinear Programming: Theory and Algorithms*, 3. Aufl. John Wiley & Sons, 2006.

[3.4] D. G. Luenberger und Y. Ye, *Linear and Nonlinear Programming*, 3. Aufl., Ser. International Series in Operations Research & Management Science. Springer, 2008, Bd. 116.

[3.5] L. Biegler, *Nonlinear Programming: Concepts, Algorithms, and Applications to Chemical Processes*. Society for Industrial und Applied Mathematics, 2010.

[3.6] S. S. Rao, *Engineering Optimization, Theory and Practice*, 4. Aufl. John Wiley & Sons, 2009.

[3.7] J. Nocedal und S. J. Wright, *Numerical Optimization*, 2. Aufl., Ser. Springer Series in Operations Research and Financial Engineering. Springer, 2006.

[3.8] S. Boyd und L. Vandenberghe, *Convex Optimization*. Cambridge University Press, 2004.

[3.9] M. Papageorgiou, M. Leibold und M. Buss, *Optimierung: Statische, dynamische, stochastische Verfahren für die Anwendung*, 4. Aufl. Springer, 2015.

[3.10] C. T. Kelley, *Iterative Methods for Optimization*. Society for Industrial und Applied Mathematics, 1999.

[3.11] B. C. Chachuat, „Nonlinear and Dynamic Optimization: From Theory to Practice“, abrufbar unter http://infoscience.epfl.ch/record/111939, Laboratoire d'Automatique, École Polytechnique Fédérale de Lausanne, 2007, (besucht am 28. 09. 2017).

[3.12] P. E. Gill, W. Murray und M. H. Wright, *Practical Optimization*. Academic Press, 1981.

[3.13] S.-P. Han, „A Globally Convergent Method for Nonlinear Programming“, *Journal of Optimization Theory and Applications*, Jg. 22, Nr. 3, S. 297–309, 1977.

[3.14] M. J. D. Powell, „A Fast Algorithm for Nonlinearly Constrained Optimization Calculations“, in *Numerical Analysis*, Ser. Lecture Notes in Mathematics, G. A. Watson, Hrsg., Bd. 630, Springer, 1978, S. 144–157.

[3.15] K. Schittkowski, „On the Convergence of a Sequential Quadratic Programming Method with an Augmented Lagrangian Line Search Function“, *Mathematische Operationsforschung und Statistik. Series Optimization*, Jg. 14, Nr. 2, S. 197–216, 1983.

4 Dynamische Optimierung

4.1 Grundlagen der Variationsrechnung

4.1.1 Problemformulierung

Im Gegensatz zu den bisher betrachteten statischen Optimierungsproblemen, bei denen die Optimierungsvariablen $\mathbf{x}$ in einem *finit-dimensionalen Euklidischen Vektorraum* $\mathbb{R}^n$ definiert sind, wird bei dynamischen Optimierungsaufgaben nach dem Minimum (Maximum) eines *Kostenfunktionals* $J : \mathcal{V} \to \mathbb{R}$ bezüglich einer (reellen vektorwertigen) Funktion $\mathbf{x}(t)$ aus einem geeigneten *Funktionenraum* $\mathcal{V}$ gesucht. In vielen Fällen entspricht die *unabhängige Variable* t der Zeit. Die totale Ableitung nach t wird mit $\dot{(\,\cdot\,)} = \mathrm{d}(\,\cdot\,)/\mathrm{d}t$ abgekürzt. Typischerweise hat das Kostenfunktional die Form (*Lagrange Problem der Variationsrechnung*)

$$J(\mathbf{x}) = \int_{t_0}^{t_1} l(t, \mathbf{x}(t), \dot{\mathbf{x}}(t))\,\mathrm{d}t \tag{4.1}$$

oder (*Bolza Problem der Variationsrechnung*)

$$J(\mathbf{x}) = \varphi(t_0, \mathbf{x}(t_0), t_1, \mathbf{x}(t_1)) + \int_{t_0}^{t_1} l(t, \mathbf{x}(t), \dot{\mathbf{x}}(t))\,\mathrm{d}t\ . \tag{4.2}$$

Dabei wird $\mathbf{x}(t) = [x_1(t) \quad \dots \quad x_n(t)]^{\mathrm{T}} : [t_0, t_1] \to \mathbb{R}^n$ häufig als *Trajektorie* bezeichnet. Die reellwertige Funktion $l(t, \mathbf{x}(t), \dot{\mathbf{x}}(t)) : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ nennt man *Lagrangesche Dichte* und $\varphi(t_0, \mathbf{x}(t_0), t_1, \mathbf{x}(t_1)) : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n \times \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ beschreibt die *Rand-* oder *Endkostenfunktion* (englisch: *boundary costs* oder *terminal costs*). Die Lagrangesche Dichte l sollte nicht mit der in Abschnitt 3.1.2.1 eingeführten Lagrangefunktion L verwechselt werden.

Man nennt eine Trajektorie $\mathbf{x}(t)$ *zulässig*, wenn im Intervall $[t_0, t_1]$ sämtliche Beschränkungen eingehalten werden. Die Menge aller zulässigen Trajektorien wird im Weiteren mit $\mathcal{X}$ bezeichnet. Es wird zwischen den folgenden Arten von Beschränkungen unterschieden:

- **Punktbeschränkungen:** Die einfachste Form von Punktbeschränkungen ist, dass beide Endpunkte fixiert sind, d. h. $\mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}_0$ und $\mathbf{x}(t_1) = \mathbf{x}_1$. Folglich gilt dann $\mathcal{X} = \{\mathbf{x}(t) \in \mathcal{V} \,|\, \mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}_0,\, \mathbf{x}(t_1) = \mathbf{x}_1\}$. Eine weitere Möglichkeit für Punktbeschränkungen ist, dass die Trajektorie zwar an einem festen Punkt $(t_0, \mathbf{x}_0)$ startet aber zu einem *freien* Zeitpunkt $t_1 \in [t_0, T]$ auf einem vorgegebenen Gebiet zu liegen kommen muss, welches implizit durch Gleichungen der Art

  $$\boldsymbol{\psi}(t_1, \mathbf{x}(t_1)) = \mathbf{0} \quad \text{bzw.} \quad \boldsymbol{\psi}(t_1, \mathbf{x}(t_1)) \leq \mathbf{0} \tag{4.3}$$

  definiert ist. In diesem Fall ist die freie Endzeit t_1 eine zu optimierende Größe und die zulässige Menge für $\mathbf{x}(t)$ lautet $\mathcal{X} = \{\mathbf{x}(t) \in \mathcal{V} \,|\, \mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}_0,\ \boldsymbol{\psi}(t_1, \mathbf{x}(t_1)) = \mathbf{0}\}$ bzw. $\mathcal{X} = \{\mathbf{x}(t) \in \mathcal{V} \,|\, \mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}_0,\ \boldsymbol{\psi}(t_1, \mathbf{x}(t_1)) \leq \mathbf{0}\}$.

- **Pfadbeschränkungen:** Pfadbeschränkungen (englisch: *path constraints*) können in der Form

$$\psi(t, \mathbf{x}(t), \dot{\mathbf{x}}(t)) = 0 \quad \text{bzw.} \quad \psi(t, \mathbf{x}(t), \dot{\mathbf{x}}(t)) \leq 0, \quad \forall\, t \in I \subseteq [t_0, t_1] \tag{4.4}$$

  mit einem Intervall I, dessen Länge größer Null ist, formuliert werden.

- **Isoperimetrische Beschränkungen:** Als isoperimetrische Beschränkungen werden Beschränkungen der Form

$$\int_{t_0}^{t_1} \psi(t, \mathbf{x}(t), \dot{\mathbf{x}}(t))\, \mathrm{d}t = 0 \quad \text{bzw.} \quad \int_{t_0}^{t_1} \psi(t, \mathbf{x}(t), \dot{\mathbf{x}}(t))\, \mathrm{d}t \leq 0 \tag{4.5}$$

  verstanden.

Die bei der Variationsrechnung typischerweise betrachteten Funktionenräume sind die im Intervall $[t_0, t_1]$ *stetig differenzierbaren Funktionen* $(C^1[t_0, t_1])^n$ und die *stückweise stetig differenzierbaren Funktionen*, welche im Weiteren als $(\hat{C}^1[t_0, t_1])^n$ bezeichnet werden. Elemente des Funktionenraumes $(\hat{C}^1[t_0, t_1])^n$ werden auch als global stetig angenommen. Die Definition eines *globalen Minimums* $\mathbf{x}^*$ eines Kostenfunktionals $J(\mathbf{x})$ lässt sich einfach direkt (ohne Verwendung einer Norm) in der Form

$$J(\mathbf{x}^*) \leq J(\mathbf{x}), \quad \forall \mathbf{x} \in \mathcal{X} \tag{4.6}$$

angeben. Die Beschreibung des *lokalen* Verhaltens in der Umgebung des Minimums $\mathbf{x}^*$ hingegen verlangt die Definition einer Norm. Eine zulässige Lösung $\mathbf{x}^*$ ist ein *lokales Minimum* in $\mathcal{X}$ bezüglich der Norm $\|\cdot\|$, wenn gilt

$$\exists \gamma > 0 \text{ so, dass gilt } J(\mathbf{x}^*) \leq J(\mathbf{x}), \quad \forall \mathbf{x} \in \{\mathbf{x} \in \mathcal{X} \,|\, \|\mathbf{x} - \mathbf{x}^*\| < \gamma\}\ . \tag{4.7}$$

Da in infinit-dimensionalen Vektorräumen Normen grundsätzlich nicht äquivalent sind, kann $\mathbf{x}^*$ zwar bezüglich einer Norm ein lokales Minimum sein, aber bezüglich einer anderen Norm nicht. Im Funktionenraum $(C^1[t_0, t_1])^n$ werden häufig die Normen

$$\|\mathbf{x}(t)\|_\infty := \max_{t_0 \leq t \leq t_1} \|\mathbf{x}(t)\| \quad \text{und} \quad \|\mathbf{x}(t)\|_{1,\infty} := \max_{t_0 \leq t \leq t_1} \|\mathbf{x}(t)\| + \max_{t_0 \leq t \leq t_1} \|\dot{\mathbf{x}}(t)\| \tag{4.8}$$

verwendet, wobei $\|\mathbf{x}(t)\|$ eine Norm im finit-dimensionalen Vektorraum $\mathbb{R}^n$ beschreibt.

4.1.2 Optimalitätsbedingungen

Zur Herleitung notwendiger Optimalitätsbedingungen benötigt man den Begriff der *Variation eines Funktionals*.

Definition 4.1 (Variation eines Funktionals, Gâteaux Ableitung)**.** Die *erste Variation des Funktionals* $J(\mathbf{x})$ am Punkt $\mathbf{x} \in \mathcal{V}$ in Richtung $\boldsymbol{\xi} \in \mathcal{V}$, auch als *Gâteaux Ableitung* von $J(\mathbf{x})$ bezüglich $\boldsymbol{\xi}$ am Punkt $\mathbf{x}$ bezeichnet, ist in der Form

$$\delta J(\mathbf{x}; \boldsymbol{\xi}) := \lim_{\eta \to 0} \frac{J(\mathbf{x} + \eta\boldsymbol{\xi}) - J(\mathbf{x})}{\eta} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\eta} J(\mathbf{x} + \eta\boldsymbol{\xi}) \bigg|_{\eta=0} \tag{4.9}$$

definiert. Falls $\delta J(\mathbf{x};\boldsymbol{\xi})$ für alle $\boldsymbol{\xi} \in \mathcal{V}$ definiert ist, dann nennt man $J(\mathbf{x})$ *Gâteaux differenzierbar* am Punkt $\mathbf{x}$.

Für die Existenz der Gâteaux Ableitung muss also die Ableitung von $J(\mathbf{x}+\eta\boldsymbol{\xi})$ bezüglich η an der Stelle $\eta = 0$ existieren.

Beispiel 4.1. Die Gâteaux Ableitung des Funktionals $J(x) = \int_{t_0}^{t_1} x^2(t)\,\mathrm{d}t$, $x \in C^1[t_0,t_1]$ lautet

$$\begin{aligned}\delta J(x;\xi) &= \lim_{\eta\to 0}\frac{1}{\eta}\left(\int_{t_0}^{t_1}(x(t)+\eta\xi(t))^2\,\mathrm{d}t - \int_{t_0}^{t_1} x^2(t)\,\mathrm{d}t\right)\\ &= \lim_{\eta\to 0}\left(\int_{t_0}^{t_1} 2x(t)\xi(t)\,\mathrm{d}t + \eta\int_{t_0}^{t_1}\xi^2(t)\,\mathrm{d}t\right) = 2\int_{t_0}^{t_1} x(t)\xi(t)\,\mathrm{d}t\end{aligned} \tag{4.10}$$

für alle $\xi \in C^1[t_0,t_1]$, weshalb $J(x)$ an jedem Punkt $x \in C^1[t_0,t_1]$ Gâteaux differenzierbar ist.

Beispiel 4.2. Man betrachte das Funktional $J(x) = \int_0^1 |x(t)|\,\mathrm{d}t$, $x \in C^1[0,1]$. Für $x_0(t) = 0$ und $\xi_0(t) = t$ lautet dessen Gâteaux Ableitung

$$\delta J(x_0;\xi_0) = \lim_{\eta\to 0}\frac{1}{\eta}\left(\int_0^1 |x_0+\eta\xi_0|\,\mathrm{d}t - \int_0^1 |x_0|\,\mathrm{d}t\right) = \tag{4.11a}$$

$$= \lim_{\eta\to 0}\operatorname{sgn}(\eta)\int_0^1 |t|\,\mathrm{d}t = \begin{cases}\frac{1}{2}, & \eta\to+0\\ -\frac{1}{2}, & \eta\to-0\end{cases}. \tag{4.11b}$$

Dabei erkennt man, dass in Richtung $\xi_0 = t$ an der Stelle $x_0 = 0$ die Gâteaux Ableitung nicht existiert.

Die Gâteaux Ableitung ist eine *lineare Operation*, weshalb gilt

$$\delta(J_1+J_2)(\mathbf{x};\boldsymbol{\xi}) = \delta J_1(\mathbf{x};\boldsymbol{\xi}) + \delta J_2(\mathbf{x};\boldsymbol{\xi}) \tag{4.12}$$

und für jedes reelle α gilt die Beziehung

$$\delta J(\mathbf{x};\alpha\boldsymbol{\xi}) = \alpha\delta J(\mathbf{x};\boldsymbol{\xi})\,. \tag{4.13}$$

Basierend auf der Gâteaux Ableitung lässt sich nun der Begriff der *zulässigen Richtung* eines Funktionals definieren.

Definition 4.2 (Zulässige Richtung)**.** $J : \mathcal{X} \to \mathbb{R}$ sei ein Funktional welches in einer Teilmenge $\mathcal{X}$ eines normierten linearen Vektorraums $(\mathcal{V}, \|\cdot\|)$ definiert ist. An einem (zulässigen) Punkt $\mathbf{x}$ im Inneren von $\mathcal{X}$ bezeichnet man $\boldsymbol{\xi} \in \mathcal{V}$ mit $\boldsymbol{\xi} \neq \mathbf{0}$ als *zulässige Richtung*, wenn

(a) $\delta J(\mathbf{x};\boldsymbol{\xi})$ existiert und

(b) ein (hinreichend kleines) $\varepsilon > 0$ existiert, so dass $\mathbf{x}+\eta\boldsymbol{\xi} \in \mathcal{X}$ für alle $\eta \in (-\varepsilon,\varepsilon)$

gilt.

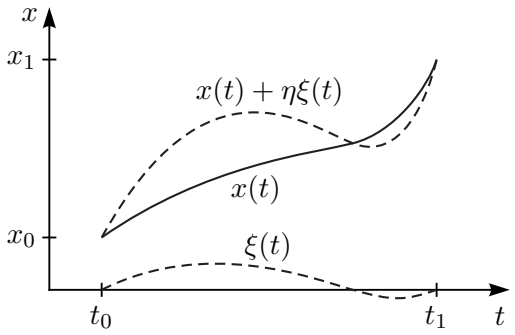


Abbildung 4.1: Zulässige Richtung im Fall $\mathcal{X} = \{x(t) \in C[t_0, t_1] \,|\, x(t_0) = x_0,\ x(t_1) = x_1\}$.

Die Bedingung (b) verlangt natürlich, dass $\mathbf{x}$ im Inneren von $\mathcal{X}$ liegt. Abbildung 4.1 zeigt ein Beispiel für eine zulässige Richtung $\xi(t)$ im Fall $\mathcal{X} = \{x(t) \in C[t_0, t_1] \,|\, x(t_0) = x_0,\ x(t_1) = x_1\}$. Eine zulässige Richtung $\boldsymbol{\xi}$ an einem Punkt $\mathbf{x}$ für die gilt $\delta J(\mathbf{x}; \boldsymbol{\xi}) < 0$ wird *Abstiegsrichtung* des Funktionals J am Punkt $\mathbf{x}$ bezeichnet. Dies stellt eine Generalisierung der Abstiegsrichtung $\mathbf{d}$ der Kostenfunktion $f(\mathbf{x})$ im finit-dimensionalen Fall mit $\mathbf{d}^{\mathrm{T}}(\nabla f)(\mathbf{x}) < 0$ am Punkt $\mathbf{x}$ gemäß Satz 2.1 dar. Es gilt nun folgendes Lemma.

Lemma 4.1 (Ausschluss eines Minimums)**.** *Wenn J ein Funktional in einem normierten linearen Vektorraum $(\mathcal{V}, \|\cdot\|)$ beschreibt und an einem Punkt $\mathbf{x} \in \mathcal{X}$ eine zulässige Richtung $\boldsymbol{\xi} \in \mathcal{V}$ so existiert, dass gilt $\delta J(\mathbf{x}; \boldsymbol{\xi}) < 0$, dann kann $\mathbf{x}$ kein lokales Minimum sein.*

Beweisskizze: Gemäß Definition 4.1 gilt

$$\delta J(\mathbf{x}; \boldsymbol{\xi}) = \lim_{\eta \to 0} \frac{J(\mathbf{x} + \eta\boldsymbol{\xi}) - J(\mathbf{x})}{\eta} < 0 \tag{4.14}$$

und es existiert ein $\gamma > 0$ so, dass

$$J(\mathbf{x} + \eta\boldsymbol{\xi}) < J(\mathbf{x}), \quad \forall \eta \in (0, \gamma)\ . \tag{4.15}$$

Da nun $\boldsymbol{\xi}$ eine zulässige Richtung gemäß Definition 4.2 ist, kann das Funktional J am Punkt $\mathbf{x}$ in Richtung $\eta\boldsymbol{\xi}$ mit beliebigem $\eta \in (0, \gamma)$ weiter verkleinert werden. Da unabhängig von der verwendeten Norm $\|\mathbf{x} + \eta\boldsymbol{\xi} - \mathbf{x}\| = \|\eta\boldsymbol{\xi}\| \to 0$ für $\eta \to 0$ gilt, findet man stets einen hinreichend kleinen Wert $\eta \in (0, \gamma)$, so dass $\mathbf{x} + \eta\boldsymbol{\xi}$ im Sinne der Norm $\|\cdot\|$ in der Umgebung von $\mathbf{x}$ liegt. Folglich kann $\mathbf{x}$ kein lokales Minimum sein. □

Die notwendigen Bedingungen erster Ordnung für ein lokales Minimum eines Funktionals lassen sich nun wie folgt formulieren [4.1].

Satz 4.1 (Notwendige Bedingungen erster Ordnung). *Angenommen $\mathbf{x}^* \in \mathcal{X}$ ist ein (lokales) Minimum des Funktionals J, welches in einer Teilmenge $\mathcal{X}$ eines normierten linearen Vektorraums $(\mathcal{V}, \|\cdot\|)$ definiert ist. Dann gilt*

$$\delta J(\mathbf{x}^*; \boldsymbol{\xi}) = 0 \tag{4.16}$$

für alle zulässigen Richtungen $\boldsymbol{\xi}$ gemäß Definition 4.2 an der Stelle $\mathbf{x}^*$.

Im nächsten Schritt betrachte man das Lagrange Problem der Variationsrechnung gemäß (4.1) mit festem Anfangs- und Endpunkt.

Satz 4.2 (Euler-Lagrange Gleichungen). *Gegeben sei das Funktional*

$$J(\mathbf{x}) = \int_{t_0}^{t_1} l(t, \mathbf{x}(t), \dot{\mathbf{x}}(t))\,\mathrm{d}t \tag{4.17}$$

mit der zulässigen Menge $\mathcal{X} = \left\{\mathbf{x}(t) \in (C^1[t_0, t_1])^n \,|\, \mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}_0,\ \mathbf{x}(t_1) = \mathbf{x}_1\right\}$ und der stetig differenzierbaren Lagrangeschen Dichte $l : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$. Wenn $\mathbf{x}^*(t)$ ein (lokales) Minimum von $J(\mathbf{x})$ auf $\mathcal{X}$ bezeichnet, dann erfüllt $\mathbf{x}^*(t)$ die Euler-Lagrange Gleichungen

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial}{\partial \dot{\mathbf{x}}} l\right)^{\mathrm{T}}(t, \mathbf{x}^*(t), \dot{\mathbf{x}}^*(t)) - \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} l\right)^{\mathrm{T}}(t, \mathbf{x}^*(t), \dot{\mathbf{x}}^*(t)) = \mathbf{0} \tag{4.18}$$

für alle $t \in [t_0, t_1]$.

Beweis. Da $\mathbf{x}^*$ ein Minimum ist, muss wegen Satz 4.1 gelten

$$\begin{aligned}\delta J(\mathbf{x}^*; \boldsymbol{\xi}) &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\eta} J(\mathbf{x}^* + \eta\boldsymbol{\xi})\Big|_{\eta=0} = \int_{t_0}^{t_1} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\eta} l\Big(t, \mathbf{x}^*(t) + \eta\boldsymbol{\xi}(t), \dot{\mathbf{x}}^*(t) + \eta\dot{\boldsymbol{\xi}}(t)\Big)\,\mathrm{d}t\Big|_{\eta=0} \\ &= \int_{t_0}^{t_1} \left[\left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} l\right)(t, \mathbf{x}^*(t), \dot{\mathbf{x}}^*(t))\boldsymbol{\xi} + \left(\frac{\partial}{\partial \dot{\mathbf{x}}} l\right)(t, \mathbf{x}^*(t), \dot{\mathbf{x}}^*(t))\dot{\boldsymbol{\xi}}\right] \mathrm{d}t = 0\ .\end{aligned} \tag{4.19}$$

Wegen der stetigen Differenzierbarkeit der Lagrangeschen Dichte l und da $\boldsymbol{\xi} \in (C^1[t_0, t_1])^n$ ist der Integrand von (4.19) im Intervall $[t_0, t_1]$ stetig und daher ist das Funktional $J(\mathbf{x})$ an allen Punkten $\mathbf{x} \in (C^1[t_0, t_1])^n$ Gâteaux differenzierbar. Eine nach Defintion 4.2 zulässige Richtung $\boldsymbol{\xi}$ muss die Bedingungen $\boldsymbol{\xi}(t_0) = \mathbf{0}$ und $\boldsymbol{\xi}(t_1) = \mathbf{0}$ erfüllen. Führt man für den zweiten Summanden in der zweiten Zeile von (4.19) eine partielle Integration durch, so erhält man

$$\int_{t_0}^{t_1} \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} l\right)\boldsymbol{\xi} + \left(\frac{\partial}{\partial \dot{\mathbf{x}}} l\right)\dot{\boldsymbol{\xi}}\,\mathrm{d}t = \int_{t_0}^{t_1} \left[\left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} l\right) - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial}{\partial \dot{\mathbf{x}}} l\right)\right]\boldsymbol{\xi}\,\mathrm{d}t + \underbrace{\left[\left(\frac{\partial}{\partial \dot{\mathbf{x}}} l\right)\boldsymbol{\xi}\right]_{t_0}^{t_1}}_{=0} = 0\ . \tag{4.20}$$

Wählt man nun nacheinander für festes $i = 1, \ldots, n$ eine Richtung $\boldsymbol{\xi} = [\xi_1 \quad \ldots \quad \xi_n]^{\mathrm{T}} \in$

$(C^1[t_0,t_1])^n$ so, dass gilt $\xi_j = 0$ für $\forall\, j$ mit $j \neq i$ und $\xi_i(t_0) = \xi_i(t_1) = 0$, dann ergibt sich jeweils

$$\int_{t_0}^{t_1} \left[\left(\frac{\partial}{\partial x_i} l \right) - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \left(\frac{\partial}{\partial \dot{x}_i} l \right) \right] \xi_i \, \mathrm{d}t = 0 \; . \tag{4.21}$$

Gemäß dem nachfolgend angeführten *Fundamentallemma der Variationsrechnung* folgt aus (4.21) mit $i = 1, \ldots, n$ unmittelbar das Ergebnis (4.18). □

Lemma 4.2 (Fundamentallemma der Variationsrechnung)**.** *Angenommen $g(t)$ ist eine stückweise stetige Funktion auf dem Intervall $[t_0, t_1]$ und es gilt*

$$\int_{t_0}^{t_1} g(t)\xi_i(t) \, \mathrm{d}t = 0 \tag{4.22}$$

für alle stückweise stetigen Funktionen $\xi_i(t)$ im Intervall $[t_0, t_1]$, dann folgt fast überall (abgesehen von einer abzählbaren Menge von Punkten) $g(t) = 0$, $t \in [t_0, t_1]$.

Eine Funktion $\mathbf{x}(t)$, die die Euler-Lagrange Gleichungen (4.18) erfüllt, wird auch als *stationäre Funktion der Lagrangeschen Dichte l* bezeichnet. In manchen Literaturstellen werden diese Funktionen auch als *extremale Funktionen* oder nur *Extremale* bezeichnet, obwohl es sein kann, dass sie weder ein Minimum noch ein Maximum des Kostenfunktionals beschreiben. Satz 4.2 stellt also nur eine notwendige Bedingung für eine optimale Lösung $\mathbf{x}^*(t)$ dar, wie auch das nachfolgende Beispiel zeigt.

Beispiel 4.3. Das Funktional $J(x) = \int_0^1 x(t)\dot{x}^2(t) \, \mathrm{d}t$, $x \in C^1[0,1]$ mit den Randbedingungen $x(0) = x(1) = 0$ soll minimiert werden. Für diesen Fall ergibt sich die Euler-Lagrange Gleichung (4.18) in der Form

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(2x(t)\dot{x}(t)) - \dot{x}^2(t) = \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\left(x^2(t)\right) - \dot{x}^2(t) = 0 \; . \tag{4.23}$$

Diese Differentialgleichung besitzt für die Randbedingungen $x(0) = x(1) = 0$ die Lösung $x^*(t) = 0$. Folglich ist $x^*(t) = 0$ eine extremale Lösung und der zugehörige Wert des Kostenfunktionals lautet $J(x^*) = 0$. Dies ist aber kein Minimum, denn die ebenfalls zulässige Trajektorie $\breve{x}(t) = -\varepsilon t(1-t)$ mit $\varepsilon > 0$ liefert für das Kostenfunktional $J(\breve{x}) < 0$. Für $\varepsilon \to \infty$ gilt $J(\breve{x}) \to -\infty$, weshalb dieses Optimierungsproblem kein Optimum besitzt. Die Trajektorie $x^*(t) = 0$ stellt auch keine lokal optimale Lösung dar, denn mit $\varepsilon \to 0^+$ kommt $\breve{x}(t)$ der extremalen Lösung $x^*(t)$ im Sinne der Normen $\|\cdot\|_\infty$ und $\|\cdot\|_{1,\infty}$ beliebig nahe.

Mit Satz 4.2 ist es also gelungen, die Minimierung des Funktionals (4.1) in ein *Zweipunktrandwertproblem* mit den Euler-Lagrange Gleichungen umzuformulieren. Das erhaltene Randwertproblem kann meist mit gängigen numerischen Methoden [4.2–4.4], wie z. B. Finite-Differenzenverfahren, Einfach-Schießverfahren, Mehrfach-Schießverfahren und Kollokationsverfahren, gelöst werden. Die Lösung der Euler-Lagrange Gleichungen (4.18) kann für Spezialfälle auch mit Hilfe so genannter *erster Integrale* formuliert werden:

(a) Die Lagrangesche Dichte hängt nicht von der unabhängigen Variablen t ab, d. h.

$l = l(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}})$. Mit der *Hamiltonfunktion*

$$H = \left(\frac{\partial}{\partial \dot{\mathbf{x}}} l\right)\dot{\mathbf{x}} - l(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}) \tag{4.24}$$

folgt aus den Euler-Lagrange Gleichungen (4.18), dass

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} H &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial}{\partial \dot{\mathbf{x}}} l\right)\dot{\mathbf{x}} + \left(\frac{\partial}{\partial \dot{\mathbf{x}}} l\right)\ddot{\mathbf{x}} - \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} l\right)\dot{\mathbf{x}} - \left(\frac{\partial}{\partial \dot{\mathbf{x}}} l\right)\ddot{\mathbf{x}} \\ &= \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial}{\partial \dot{\mathbf{x}}} l\right) - \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} l\right)\right)\dot{\mathbf{x}} = 0 \ . \end{aligned} \tag{4.25}$$

D. h. die Hamiltonfunktion H ist entlang von stationären Funktionen konstant und bildet damit eine *Invariante* des Systems.

(b) Die Lagrangesche Dichte hängt nicht von $\mathbf{x}$ ab, d. h. $l = l(t, \dot{\mathbf{x}})$. Dann folgt aus den Euler-Lagrange Gleichungen (4.18), dass $\frac{\partial}{\partial \dot{x}_i} l$, $i = 1, \ldots, n$ *Invarianten* des Systems sind, denn es gilt

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial}{\partial \dot{x}_i} l\right) = 0 \ . \tag{4.26}$$

Aufgabe 4.1. Nehmen Sie an, dass die Lagrangesche Dichte $l(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}})$ die Lagrangefunktion eines Starrkörpersystems ist (siehe Skriptum Fachvertiefung: Automatisierungs- und Regelungstechnik oder Regelungssysteme 2) und $\mathbf{x}$ bzw. $\dot{\mathbf{x}}$ die generalisierten Lagekoordinaten und deren Geschwindigkeiten bezeichnen. Geben Sie eine physikalische Interpretation der Hamiltonfunktion H von (4.24) und der darin auftretenden Größen $\frac{\partial}{\partial \dot{x}_i} l$, $i = 1, \ldots, n$ an.

Bemerkung 4.1. Konservative Starrkörpersysteme erfüllen die Euler-Lagrange Gleichungen (4.18). Dies gilt im Allgemeinen nicht für nicht-konservative Starrkörpersysteme. Für sie lauten die Euler-Lagrange Gleichungen

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial}{\partial \dot{x}_i} l\right) - \left(\frac{\partial}{\partial x_i} l\right) = \tau_i \tag{4.27}$$

für alle $t \in [t_0, t_1]$ und $i = 1, \ldots, n$ mit den externen generalisierten Kräften τ_j (siehe Skriptum Fachvertiefung: Automatisierungs- und Regelungstechnik oder Regelungssysteme 2).

Bemerkung 4.2. Der Begriff *Lagrangefunktion* hat in der Mechanik eine andere Bedeutung als in der Optimierung.

Beispiel 4.4 (Elastischer Zugstab belastet durch Eigengewicht). Ein gerader, linear elastischer Stab habe die Zugsteifigkeit k und im unbelasteten Zustand die Masse pro Längeneinheit $\bar{m}$ und die Länge x_1. Der Stab wird am Punkt $x = x_0 = 0$ senkrecht befestigt und durch sein Eigengewicht (Erdbeschleunigung g) belastet. Es soll das Verschiebungsfeld $y(x)$ zufolge der Eigengewichtsbelastung berechnet werden. Die

Längskoordinate x sei materialfest, d. h. sie wird im unbelasteten Zustand gemessen.

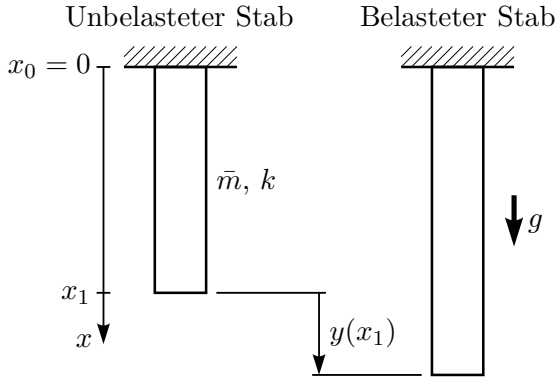


Abbildung 4.2: Elastischer Zugstab belastet durch Eigengewicht.

Zur Lösung dieser Aufgabe kann das *Hamiltonsche Prinzip* der Mechanik [4.5, 4.6] verwendet werden. Angewandt auf den Sonderfall der hier rein statischen Beanspruchung besagt es, dass die potentielle Energie des Stabes im statischen Gleichgewicht extremal sein muss [4.7]. Für ein stabiles statisches Gleichgewicht muss sie minimal sein.

Die bis auf einen konstanten Term definierte potentielle Energie

$$J(y) = \int_0^{x_1} \frac{k(y'(x))^2}{2} - \bar{m}gy(x) \ \mathrm{d}x \tag{4.28}$$

des Stabes setzt sich aus der Dehnungsenergie mit der Längsdehnung $y'(x)$ und der potentiellen Höhenenergie zusammen. Am Befestigungspunkt $x = x_0 = 0$ des Stabes darf keine Verschiebung auftreten und es gilt

$$y(0) = 0 \ . \tag{4.29a}$$

Da am freien Ende $x = x_1$ des Stabes die Zugkraft 0 beträgt, muss dort auch die Dehnung verschwinden, d. h.

$$y'(x_1) = 0 \ . \tag{4.29b}$$

Die Minimierung des Funktionals (4.28) unter Berücksichtigung der Randbedingungen (4.29) kann mit Hilfe der Variationsrechnung erfolgen. Da in der Lagrangeschen Dichte $l(y, y') = k(y')^2/2 - \bar{m}gy$ die unabhängige Variable x nicht explizit auftritt, muss gemäß (4.25) die Hamiltonfunktion eine Invariante des Systems sein, d. h.

$$H = \left(\frac{\partial}{\partial y'} l\right)(y, y')y' - l(y, y') = \frac{k(y')^2}{2} + \bar{m}gy = c_1 = \text{konst.} \tag{4.30}$$

Die Integration dieser Differentialgleichung liefert

$$\left[-\sqrt{2k}\frac{\sqrt{c_1 - \bar{m}gy}}{\bar{m}g}\right]_{y(0)}^{y(x)} = x \ . \tag{4.31}$$

Die Werte c_1 und $y(0)$ folgen schließlich aus den Randbedingungen (4.29) und für die Lösung ergibt sich

$$y(x) = \frac{\bar{m}g}{k}\left(x_1 x - \frac{x^2}{2}\right) . \tag{4.32}$$

Alternativ kann diese Aufgabe natürlich auch direkt mit Satz 4.2 gelöst werden. Aus der Euler-Lagrange Gleichung (4.18) folgt

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(\frac{\partial}{\partial y'}l\right)(y, y') - \frac{\partial}{\partial y}l(y, y') = ky'' + \bar{m}g = 0 \ . \tag{4.33}$$

Die Integration dieser Differentialgleichung liefert bei Berücksichtigung der Randbedingungen (4.29) ebenfalls die Lösung (4.32).

Analog zum finit-dimensionalen Fall, siehe Satz 2.2, können auch für die Minimierung von Funktionalen notwendige Bedingungen zweiter Ordnung formuliert werden.

Satz 4.3 (Notwendige Bedingungen zweiter Ordnung - Legendre Bedingung)**.** *Angenommen $\mathbf{x}^* \in \mathcal{X}$ ist ein lokales Minimum des Funktionals*

$$J(\mathbf{x}) = \int_{t_0}^{t_1} l(t, \mathbf{x}(t), \dot{\mathbf{x}}(t))\,\mathrm{d}t \tag{4.34}$$

mit der zulässigen Menge $\mathcal{X} = \{\mathbf{x}(t) \in \left(C^1[t_0, t_1]\right)^n \,|\, \mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}_0, \mathbf{x}(t_1) = \mathbf{x}_1\}$ und der zweifach stetig differenzierbaren Lagrangeschen Dichte $l : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, dann erfüllt $\mathbf{x}^*$ die Euler-Lagrange Gleichungen (4.18) und die so genannte Legendre Bedingung

$$\mathbf{d}^{\mathrm{T}}\left(\frac{\partial^2 l}{\partial \dot{\mathbf{x}}^2}\right)(t, \mathbf{x}^*(t), \dot{\mathbf{x}}^*(t))\mathbf{d} \geq 0 \qquad \forall\, \mathbf{d} \in \mathbb{R}^n,\ t \in [t_0, t_1] \ . \tag{4.35}$$

Satz 4.4 (Hinreichende Bedingungen zweiter Ordnung - Konvexitätsbedingung)**.** *Gegeben sei das Funktional*

$$J(\mathbf{x}) = \int_{t_0}^{t_1} l(t, \mathbf{x}(t), \dot{\mathbf{x}}(t))\,\mathrm{d}t \tag{4.36}$$

mit der zulässigen Menge $\mathcal{X} = \{\mathbf{x}(t) \in \left(C^1[t_0, t_1]\right)^n \,|\, \mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}_0,\ \mathbf{x}(t_1) = \mathbf{x}_1\}$ und der zweifach stetig differenzierbaren Lagrangeschen Dichte $l : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$. Erfüllt eine Funktion $\mathbf{x}^* \in \mathcal{X}$ die Euler-Lagrange Gleichungen (4.18) und die sogenannte

Konvexitätsbedingung

$$\mathbf{d}^{\mathrm{T}}\begin{bmatrix}\left(\frac{\partial^2 l}{\partial \mathbf{x}^2}\right)(t,\mathbf{x}^*(t),\dot{\mathbf{x}}^*(t)) & \left(\frac{\partial^2 l}{\partial \mathbf{x}\partial \dot{\mathbf{x}}}\right)(t,\mathbf{x}^*(t),\dot{\mathbf{x}}^*(t))\\ \left(\frac{\partial^2 l}{\partial \dot{\mathbf{x}}\partial \mathbf{x}}\right)(t,\mathbf{x}^*(t),\dot{\mathbf{x}}^*(t)) & \left(\frac{\partial^2 l}{\partial \dot{\mathbf{x}}^2}\right)(t,\mathbf{x}^*(t),\dot{\mathbf{x}}^*(t))\end{bmatrix}\mathbf{d}\geq 0 \quad \forall\,\mathbf{d}\in\mathbb{R}^{2n},\ t\in[t_0,t_1]\ , \tag{4.37}$$

d. h. $l(t,\mathbf{x}(t),\dot{\mathbf{x}}(t))$ ist lokal konvex in $\mathbf{x}(t)$ und $\dot{\mathbf{x}}(t)$, dann ist $\mathbf{x}^*(t)$ ein lokales Minimum des Funktionals J. Ist $l(t,\mathbf{x}(t),\dot{\mathbf{x}}(t))$ sogar strikt lokal konvex in $\mathbf{x}(t)$ und $\dot{\mathbf{x}}(t)$ (Gleichung (4.37) ist dann nur für $\mathbf{d}=\mathbf{0}$ mit Gleichheit erfüllt), so ist $\mathbf{x}^*(t)$ ein striktes lokales Minimum.

Der Beweis zu Satz 4.4 findet sich z. B. in [4.1, 4.8].

Satz 4.2 behandelt das Lagrange Problem der Variationsrechnung (4.1). Im nächsten Schritt soll das *Bolza Problem der Variationsrechnung* (4.2) *mit freier Endzeit* näher untersucht werden.

Satz 4.5 (Euler-Lagrange Gleichungen für freie Endzeit)**.** *Gegeben sei das Funktional*

$$J(t_1,\mathbf{x}) = \varphi(t_1,\mathbf{x}(t_1)) + \int_{t_0}^{t_1} l(t,\mathbf{x}(t),\dot{\mathbf{x}}(t))\,\mathrm{d}t \tag{4.38}$$

mit der zulässigen Menge $\mathcal{X} = \left\{(t_1,\mathbf{x}(t))\in(t_0,T)\times\left(C^1[t_0,T]\right)^n \,|\, \mathbf{x}(t_0)=\mathbf{x}_0\right\}$, der hinreichend großen Zeit $T\gg t_1$, der stetig differenzierbaren Lagrangeschen Dichte $l:\mathbb{R}\times\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}$ und der stetig differenzierbaren Endkostenfunktion $\varphi:\mathbb{R}\times\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}$. Wenn $(t_1^*,\mathbf{x}^*(t))$ ein (lokales) Minimum von $J(\mathbf{x})$ auf $\mathcal{X}$ bezeichnet, dann erfüllt $\mathbf{x}^*(t)$ die Euler-Lagrange Gleichungen (4.18) *im Intervall $[t_0,t_1^*]$ und es gelten die Anfangsbedingung $\mathbf{x}^*(t_0)=\mathbf{x}_0$ sowie die* Transversalitätsbedingungen

$$\left[\frac{\partial}{\partial\dot{\mathbf{x}}}l+\frac{\partial}{\partial\mathbf{x}}\varphi\right]_{t=t_1^*,\ \mathbf{x}=\mathbf{x}^*} = \mathbf{0}^{\mathrm{T}} \tag{4.39a}$$

$$\left[l-\left(\frac{\partial}{\partial\dot{\mathbf{x}}}l\right)\dot{\mathbf{x}}+\frac{\partial}{\partial t}\varphi\right]_{t=t_1^*,\ \mathbf{x}=\mathbf{x}^*} = 0\ . \tag{4.39b}$$

Beweis. Es wird angenommen, dass $\mathbf{x}(t)$ in einem hinreichend großen Intervall $[t_0,T]$, $T\gg t_1^*$ definiert ist, und es wird der lineare Funktionenraum $\mathbb{R}\times\left(C^1[t_0,T]\right)^n$ betrachtet. Die Gâteaux Ableitung gemäß Definition 4.1 wird für das Funktional $J(t_1,\mathbf{x})$ in der Form

$$\begin{aligned}\delta J(t_1,\mathbf{x};\xi_{t_1},\boldsymbol{\xi}_x) &:= \lim_{\eta\to 0}\frac{J(t_1+\eta\xi_{t_1},\mathbf{x}+\eta\boldsymbol{\xi}_x)-J(t_1,\mathbf{x})}{\eta}\\ &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\eta}J(t_1+\eta\xi_{t_1},\mathbf{x}+\eta\boldsymbol{\xi}_x)\Big|_{\eta=0}\end{aligned} \tag{4.40}$$

angeschrieben und später in die notwendige Bedingung für ein Minimum gemäß Satz 4.1 eingesetzt. Wendet man (4.40) für zunächst beliebiges η auf (4.38) an, so erhält

man

$$
\begin{aligned}
&\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\eta} J(t_1^* + \eta\xi_{t_1}, \mathbf{x}^* + \eta\boldsymbol{\xi}_x) = \\
&= \Big(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\eta}\varphi\Big)(t_1^* + \eta\xi_{t_1}, \mathbf{x}^*(t_1^* + \eta\xi_{t_1}) + \eta\boldsymbol{\xi}_x(t_1^* + \eta\xi_{t_1})) \\
&\quad + \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\eta}\int_{t_0}^{t_1^*+\eta\xi_{t_1}} l\Big(t, \mathbf{x}^* + \eta\boldsymbol{\xi}_x, \dot{\mathbf{x}}^* + \eta\dot{\boldsymbol{\xi}}_x\Big)\,\mathrm{d}t \\
&= \Big[\Big(\frac{\partial}{\partial t}\varphi\Big)\xi_{t_1} + \Big(\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}\varphi\Big)\Big(\underbrace{\frac{\partial}{\partial t}\mathbf{x}}_{\dot{\mathbf{x}}} + \eta\,\underbrace{\frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{\xi}_x}_{\dot{\boldsymbol{\xi}}_x}\Big)\xi_{t_1} + \Big(\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}\varphi\Big)\boldsymbol{\xi}_x\Big]_{t=t_1^*+\eta\xi_{t_1},\ \mathbf{x}=\mathbf{x}^*+\eta\boldsymbol{\xi}_x} \\
&\quad + \xi_{t_1}\Big[l\Big(t, \mathbf{x}^* + \eta\boldsymbol{\xi}_x, \dot{\mathbf{x}}^* + \eta\dot{\boldsymbol{\xi}}_x\Big)\Big]_{t=t_1^*+\eta\xi_{t_1}} \\
&\quad + \int_{t_0}^{t_1^*+\eta\xi_{t_1}} \Big(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\eta} l\Big)\Big(t, \mathbf{x}^* + \eta\boldsymbol{\xi}_x, \dot{\mathbf{x}}^* + \eta\dot{\boldsymbol{\xi}}_x\Big)\,\mathrm{d}t \qquad (4.41) \\
&= \Big[\Big(\frac{\partial}{\partial t}\varphi\Big)\xi_{t_1} + \Big(\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}\varphi\Big)\Big(\dot{\mathbf{x}} + \eta\dot{\boldsymbol{\xi}}_x\Big)\xi_{t_1} + \Big(\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}\varphi\Big)\boldsymbol{\xi}_x\Big]_{t=t_1^*+\eta\xi_{t_1},\ \mathbf{x}=\mathbf{x}^*+\eta\boldsymbol{\xi}_x} \\
&\quad + \xi_{t_1}\Big[l\Big(t, \mathbf{x}^* + \eta\boldsymbol{\xi}_x, \dot{\mathbf{x}}^* + \eta\dot{\boldsymbol{\xi}}_x\Big)\Big]_{t=t_1^*+\eta\xi_{t_1}} \\
&\quad + \Big[\Big(\frac{\partial}{\partial \dot{\mathbf{x}}} l\Big)\Big(t, \mathbf{x}^* + \eta\boldsymbol{\xi}_x, \dot{\mathbf{x}}^* + \eta\dot{\boldsymbol{\xi}}_x\Big)\boldsymbol{\xi}_x\Big]_{t_0}^{t_1^*+\eta\xi_{t_1}} \\
&\quad + \int_{t_0}^{t_1^*+\eta\xi_{t_1}} \Big(\Big(\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} l\Big)\Big(t, \mathbf{x}^* + \eta\boldsymbol{\xi}_x, \dot{\mathbf{x}}^* + \eta\dot{\boldsymbol{\xi}}_x\Big) \\
&\quad - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\Big(\frac{\partial}{\partial \dot{\mathbf{x}}} l\Big)\Big(t, \mathbf{x}^* + \eta\boldsymbol{\xi}_x, \dot{\mathbf{x}}^* + \eta\dot{\boldsymbol{\xi}}_x\Big)\Big)\boldsymbol{\xi}_x\,\mathrm{d}t\ .
\end{aligned}
$$

Wertet man (4.41) für $\eta = 0$ aus, so lautet die notwendige Optimalitätsbedingung

$$
\begin{aligned}
\delta J(t_1^*, \mathbf{x}^*; \xi_{t_1}, \boldsymbol{\xi}_x) &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\eta} J(t_1^* + \eta\xi_{t_1}, \mathbf{x}^* + \eta\boldsymbol{\xi}_x)\Big|_{\eta=0} \\
&= \left[\left(\frac{\partial}{\partial t}\varphi\right)\xi_{t_1} + \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}\varphi\right)(\dot{\mathbf{x}}\xi_{t_1} + \boldsymbol{\xi}_x) + \xi_{t_1} l\right]_{t=t_1^*, \mathbf{x}=\mathbf{x}^*} \\
&\quad + \left[\left(\frac{\partial}{\partial \dot{\mathbf{x}}} l\right)(t, \mathbf{x}^*, \dot{\mathbf{x}}^*)\boldsymbol{\xi}_x\right]_{t_0}^{t_1^*} \\
&\quad + \int_{t_0}^{t_1^*} \left[\left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} l\right)(t, \mathbf{x}^*, \dot{\mathbf{x}}^*) - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial}{\partial \dot{\mathbf{x}}} l\right)(t, \mathbf{x}^*, \dot{\mathbf{x}}^*)\right]\boldsymbol{\xi}_x \,\mathrm{d}t \\
&= \left[\left(\frac{\partial}{\partial t}\varphi\right)\xi_{t_1} + \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}\varphi\right)(\dot{\mathbf{x}}\xi_{t_1} + \boldsymbol{\xi}_x) + \xi_{t_1} l\right]_{t=t_1^*, \mathbf{x}=\mathbf{x}^*} \\
&\quad + \left[\left(\frac{\partial}{\partial \dot{\mathbf{x}}} l\right)(t, \mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}})(\boldsymbol{\xi}_x + \dot{\mathbf{x}}\xi_{t_1} - \dot{\mathbf{x}}\xi_{t_1})\right]_{t=t_1^*, \mathbf{x}=\mathbf{x}^*} \\
&\quad - \left[\left(\frac{\partial}{\partial \dot{\mathbf{x}}} l\right)(t, \mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}})\boldsymbol{\xi}_x\right]_{t=t_0, \mathbf{x}=\mathbf{x}^*} \\
&\quad + \int_{t_0}^{t_1^*} \left[\left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} l\right)(t, \mathbf{x}^*, \dot{\mathbf{x}}^*) - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial}{\partial \dot{\mathbf{x}}} l\right)(t, \mathbf{x}^*, \dot{\mathbf{x}}^*)\right]\boldsymbol{\xi}_x \,\mathrm{d}t \\
&= \left[l - \left(\frac{\partial}{\partial \dot{\mathbf{x}}} l\right)\dot{\mathbf{x}} + \frac{\partial}{\partial t}\varphi\right]_{t=t_1^*,\ \mathbf{x}=\mathbf{x}^*} \xi_{t_1} \\
&\quad + \left[\frac{\partial}{\partial \dot{\mathbf{x}}} l + \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}\varphi\right]_{t=t_1^*,\ \mathbf{x}=\mathbf{x}^*} (\dot{\mathbf{x}}^*(t_1^*)\xi_{t_1} + \boldsymbol{\xi}_x(t_1^*)) - \left[\frac{\partial}{\partial \dot{\mathbf{x}}} l\right]_{t=t_0, \mathbf{x}=\mathbf{x}^*} \underbrace{\boldsymbol{\xi}_x(t_0)}_{=\mathbf{0}} \\
&\quad + \int_{t_0}^{t_1^*} \left[\left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} l\right)(t, \mathbf{x}^*, \dot{\mathbf{x}}^*) - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial}{\partial \dot{\mathbf{x}}} l\right)(t, \mathbf{x}^*, \dot{\mathbf{x}}^*)\right]\boldsymbol{\xi}_x \,\mathrm{d}t = 0
\end{aligned}
\tag{4.42}
$$

für beliebige zulässige Richtungen ξ_{t_1} und $\boldsymbol{\xi}_x$. Gemäß Fundamentallemma der Variationsrechnung Lemma 4.2 folgen aus (4.42) daher zunächst die Euler-Lagrange Gleichungen (4.18). Da der Anfangswert mit $\mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}_0$ festgelegt ist, muss für eine zulässige Richtung $\boldsymbol{\xi}_x$ die Bedingung $\boldsymbol{\xi}_x(t_0) = \mathbf{0}$ gelten. Da die Endzeit t_1 und der Endwert $\mathbf{x}(t_1)$ frei sind, können ξ_{t_1} und $\boldsymbol{\xi}_x(t_1^*)$ unabhängig voneinander frei gewählt werden. Folglich ist (4.42) nur dann Null, wenn die *Transversalitätsbedingungen* (4.39) erfüllt sind. □

Das Ergebnis von Satz 4.5 lässt sich nun wie folgt verallgemeinern.

(a) Wenn die *Endzeit t_1 fest ist*, dann gilt $\xi_{t_1} = 0$, womit automatisch die drittletzte Zeile von (4.42) verschwindet. Es liegt somit keine Transversalitätsbedingung (4.39b) vor.

  (i) Wenn für eine Komponente $x_k(t)$ von $\mathbf{x}(t)$ gilt, dass *deren Endwert $x_k(t_1) = \bar{x}_k$ mit $\bar{x}_k = \text{const.}$ fest ist*, so folgt daraus $\xi_{x,k}(t_1) = 0$, womit automatisch der zugehörige Eintrag in der zweitletzten Zeile von (4.42) verschwindet. Damit liegt für diese Komponente keine Transversalitätsbedingung vor. Dieser Fall entspricht dem Ergebnis von Satz 4.2.

(ii) Wenn für eine Komponente $x_k(t)$ von $\mathbf{x}(t)$ gilt, dass *deren Endwert* $x_k(t_1)$ *frei ist*, dann lautet die *Transversalitätsbedingung* gemäß (4.42) für diese Komponente

$$\left[\frac{\partial}{\partial \dot{x}_k} l + \frac{\partial}{\partial x_k}\varphi\right]_{t=t_1^*,\ \mathbf{x}=\mathbf{x}^*} = 0\ . \tag{4.43}$$

(b) Wenn *die Endzeit* t_1 *frei ist*, dann muss die Transversalitätsbedingung (4.39b)

$$\left[l - \left(\frac{\partial}{\partial \dot{\mathbf{x}}} l\right)\dot{\mathbf{x}} + \frac{\partial}{\partial t}\varphi\right]_{t=t_1^*,\ \mathbf{x}=\mathbf{x}^*} = 0 \tag{4.44}$$

gelten.

(i) Wenn für eine Komponente $x_k(t)$ von $\mathbf{x}(t)$ gilt, dass *deren Endwert* $x_k(t_1^*) = \bar{x}_k$ *mit* $\bar{x}_k = \text{const.}$ *fest ist*, dann muss für diese Komponente eine zulässige Richtung $(\xi_{t_1}, \xi_{x,k})$ die Bedingung

$$\bar{x}_k = x_k^*(t_1^* + \eta\xi_{t_1}) + \eta\xi_{x,k}(t_1^* + \eta\xi_{t_1}) \tag{4.45}$$

bzw.

$$0 = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\eta}\bar{x}_k\bigg|_{\eta=0} = \xi_{x,k}(t_1^*) + \xi_{t_1}\dot{x}_k^*(t_1^*) \tag{4.46}$$

erfüllen. Damit verschwindet der zugehörige Eintrag in der zweitletzten Zeile von (4.42) und es liegt keine weitere Transversalitätsbedingung für diese Komponente vor.

(ii) Wenn für eine Komponente $x_k(t)$ von $\mathbf{x}(t)$ gilt, dass *deren Endwert* $x_k(t_1^*)$ *frei ist*, dann lautet, analog zum Fall (a)(ii), die *Transversalitätsbedingung* für diese Komponente

$$\left[\frac{\partial}{\partial \dot{x}_k} l + \frac{\partial}{\partial x_k}\varphi\right]_{t=t_1^*,\ \mathbf{x}=\mathbf{x}^*} = 0\ . \tag{4.47}$$

4.1.3 Stückweise stetig differenzierbare Extremale

Bei den bisherigen Betrachtungen, siehe im Speziellen die Sätze 4.2 bis 4.5, wurde stets angenommen, dass $\mathbf{x}(t)$ im Funktionenraum der im Intervall $[t_0, t_1]$ (vektorwertigen) stetig differenzierbaren Funktionen $\left(C^1[t_0, T]\right)^n$ definiert ist. Im Weiteren soll dies auf den Funktionenraum der stückweise stetig differenzierbaren Funktionen $(\hat{C}^1[t_0, T])^n$ erweitert werden, wobei zusätzlich die globale Stetigkeit vorausgesetzt wird. Man nennt nun eine reellwertige Funktion $x(t) \in \hat{C}^1[t_0, t_1]$ *stückweise stetig differenzierbar*, wenn sie stetig ist und eine *Partitionierung* $t_0 = c_0 < c_1 < \ldots < c_{N+1} = t_1$ mit $N < \infty$ so existiert, dass die Funktion $x(t)$ in allen Intervallen (c_k, c_{k+1}), $k = 0, \ldots, N$ stetig differenzierbar ist, siehe Abbildung 4.3. Die inneren Punkte $c_1, \ldots, c_N$ werden als *Eckpunkte von* $x(t)$ bezeichnet. Für stückweise stetig differenzierbare Funktionen $\hat{x}(t) \in \hat{C}^1[t_0, t_1]$ lauten die Normen gemäß (4.8)

$$\|\hat{\mathbf{x}}(t)\|_\infty := \max_{t_0 \le t \le t_1} \|\hat{\mathbf{x}}(t)\| \quad \text{und} \quad \|\hat{\mathbf{x}}(t)\|_{1,\infty} := \max_{t_0 \le t \le t_1} \|\hat{\mathbf{x}}(t)\| + \sup_{t \in \cup_{k=0}^{N}(c_k, c_{k+1})} \left\| \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{\mathbf{x}}(t) \right\| . \tag{4.48}$$

Es gilt nun folgender Satz (vgl. [4.9]).

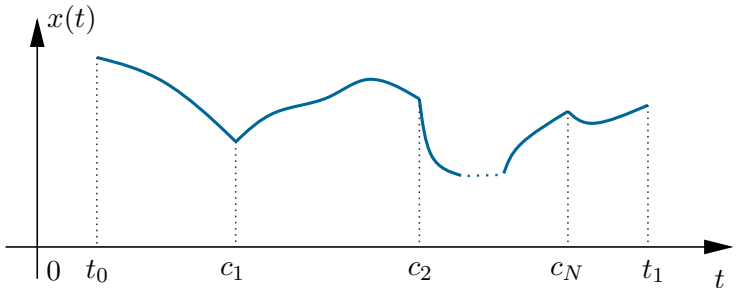


Abbildung 4.3: Beispiel einer Funktion $x(t) \in \hat{C}^1[t_0, t_1]$.

Satz 4.6 (Stückweise stetig vs. stetig differenzierbare Extremale)**.** *Angenommen* $\mathbf{x}^* \in \mathcal{X}$ *ist ein (lokales) Minimum des Funktionals*

$$J(\mathbf{x}) = \int_{t_0}^{t_1} l(t, \mathbf{x}(t), \dot{\mathbf{x}}(t))\,\mathrm{d}t \tag{4.49}$$

mit der zulässigen Menge $\mathcal{X} = \{\mathbf{x}(t) \in (C^1[t_0, t_1])^n \,|\, \mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}_0, \mathbf{x}(t_1) = \mathbf{x}_1\}$ *und der stetig differenzierbaren Lagrangeschen Dichte* $l : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$*, dann ist* $\mathbf{x}^* \in \hat{\mathcal{X}}$ *auch ein (lokales) Minimum des Funktionals* (4.49) *in der zulässigen Menge* $\hat{\mathcal{X}} = \{\mathbf{x}(t) \in (\hat{C}^1[t_0, t_1])^n \,|\, \mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}_0, \mathbf{x}(t_1) = \mathbf{x}_1\}$*. Handelt es sich um ein lokales Minimum, so ist der Begriff* lokal *bezüglich der gleichen Norm* $\|\cdot\|_\infty$ *bzw.* $\|\cdot\|_{1,\infty}$ *zu verstehen.*

Beweisskizze: Zu jedem $\hat{\mathbf{x}} \in \hat{\mathcal{X}}$ und $\varepsilon > 0$ existiert ein $\tilde{\mathbf{x}} \in \mathcal{X}$ so, dass

$$|J(\tilde{\mathbf{x}}) - J(\hat{\mathbf{x}})| < \varepsilon\ . \tag{4.50}$$

Diese plausible Aussage wird z. B. in [4.9] streng bewiesen.

Stellt $\mathbf{x}^* \in \mathcal{X}$ ein *globales* Minimum des Funktionals (4.49) dar, so muss

$$J(\hat{\mathbf{x}}) \geq J(\mathbf{x}^*)\ , \qquad \forall\, \hat{\mathbf{x}} \in \hat{\mathcal{X}} \tag{4.51}$$

gezeigt werden. Es gilt nun für beliebige $\hat{\mathbf{x}} \in \hat{\mathcal{X}}$ und $\varepsilon > 0$ mit $\tilde{\mathbf{x}} \in \mathcal{X}$, welches (4.50) erfüllt,

$$J(\hat{\mathbf{x}}) = J(\tilde{\mathbf{x}}) - (J(\tilde{\mathbf{x}}) - J(\hat{\mathbf{x}})) \geq J(\tilde{\mathbf{x}}) - |J(\tilde{\mathbf{x}}) - J(\hat{\mathbf{x}})| \geq J(\tilde{\mathbf{x}}) - \varepsilon \geq J(\mathbf{x}^*) - \varepsilon\ , \tag{4.52}$$

wobei hier die Optimalität von $\mathbf{x}^*$ im Funktionenraum $\mathcal{X}$ ausgenützt wurde. Im Grenzübergang $\varepsilon \to 0^+$ folgt aus (4.52) der zu zeigende Zusammenhang (4.51).

Stellt $\mathbf{x}^* \in \mathcal{X}$ nur ein *lokales* Minimum (vgl. (4.7)) des Funktionals (4.49) dar, so erfolgt der Beweis völlig analog, wobei $\hat{\mathbf{x}}$ und $\tilde{\mathbf{x}}$ auf das Gebiet $\{\mathbf{x} \in \hat{\mathcal{X}} \,|\, \|\mathbf{x} - \mathbf{x}^*\| < \gamma\}$ einzuschränken sind. □

Die Aussage von Satz 4.6 kann wie folgt genützt werden. Wenn ein (lokales) Minimum $\mathbf{x}^* \in \mathcal{X}$ gefunden wurde, so kann auf die Suche nach einem anderen Minimum im

Funktionenraum $\hat{\mathcal{X}}$ verzichtet werden.

Man kann nun zeigen, dass eine extremale Lösung $\hat{\mathbf{x}}^*(t) \in (\hat{C}[t_0, t_1])^n$ im gesamten Intervall $[t_0, t_1]$ außer an den Eckpunkten $c_1, \ldots, c_N$ die Euler-Lagrange Gleichungen (4.18) und die Legendre-Bedingung (4.35) erfüllt. Die Transversalitätsbedingungen (4.43), (4.44) und (4.47) bleiben im Falle stückweise stetig differenzierbarer Extremale *unverändert*. Die Unstetigkeiten von $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{\mathbf{x}}^*(t)$ an den Eckpunkten $t = c_k,\ k = 1, \ldots, N$ unterliegen nun folgenden Einschränkungen:

Satz 4.7 (Weierstrass-Erdmann Bedingungen)**.** *Angenommen $\hat{\mathbf{x}}^* \in \hat{\mathcal{X}}$ ist ein (lokales) Minimum des Funktionals*

$$J(\hat{\mathbf{x}}) = \int_{t_0}^{t_1} l\Big(t, \hat{\mathbf{x}}(t), \dot{\hat{\mathbf{x}}}(t)\Big)\,\mathrm{d}t \tag{4.53}$$

mit der zulässigen Menge $\hat{\mathcal{X}} = \Big\{\hat{\mathbf{x}}(t) \in (\hat{C}^1[t_0, t_1])^n \,|\, \hat{\mathbf{x}}(t_0) = \hat{\mathbf{x}}_0, \hat{\mathbf{x}}(t_1) = \hat{\mathbf{x}}_1\Big\}$, wobei die Lagrangesche Dichte l sowie die partiellen Ableitungen $\frac{\partial}{\partial \hat{x}_i} l$ und $\frac{\partial}{\partial \dot{\hat{x}}_i} l$ im Gebiet $[t_0, t_1] \times \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$ stetig bezüglich ihrer Argumente t, $\hat{\mathbf{x}}(t)$ und $\dot{\hat{\mathbf{x}}}(t)$ sind. Dann gilt für jeden Eckpunkt $c \in (t_0, t_1)$ von $\hat{\mathbf{x}}^*(t)$, dass die Bedingungen

$$\left(\frac{\partial}{\partial \dot{\hat{\mathbf{x}}}} l\right)\Big(c, \hat{\mathbf{x}}^*(c), \dot{\hat{\mathbf{x}}}^*(c^-)\Big) = \left(\frac{\partial}{\partial \dot{\hat{\mathbf{x}}}} l\right)\Big(c, \hat{\mathbf{x}}^*(c), \dot{\hat{\mathbf{x}}}^*\Big(c^+\Big)\Big) \tag{4.54a}$$

$$H\Big(c, \hat{\mathbf{x}}^*(c), \dot{\hat{\mathbf{x}}}^*(c^-)\Big) = H\Big(c, \hat{\mathbf{x}}^*(c), \dot{\hat{\mathbf{x}}}^*\Big(c^+\Big)\Big) \tag{4.54b}$$

mit der Hamiltonfunktion

$$H\Big(t, \hat{\mathbf{x}}(t), \dot{\hat{\mathbf{x}}}(t)\Big) = \left(\frac{\partial}{\partial \dot{\hat{\mathbf{x}}}} l\right)\Big(t, \hat{\mathbf{x}}(t), \dot{\hat{\mathbf{x}}}(t)\Big)\dot{\hat{\mathbf{x}}}(t) - l\Big(t, \hat{\mathbf{x}}(t), \dot{\hat{\mathbf{x}}}(t)\Big) \tag{4.55}$$

erfüllt sind, wobei $\dot{\hat{\mathbf{x}}}^*(c^-)$ und $\dot{\hat{\mathbf{x}}}^*(c^+)$ den links- bzw. rechtsseitigen Grenzwert von $\dot{\hat{\mathbf{x}}}^*(t)$ an der Stelle $t = c$ bezeichnen.

Die Weierstrass-Erdmann Bedingungen besagen also, dass an den Eckpunkten einer (lokal) extremalen Trajektorie $\hat{\mathbf{x}}^*(t) \in (\hat{C}^1[t_0, t_1])^n$ nur jene Unstetigkeiten von $\dot{\hat{\mathbf{x}}}^*$ erlaubt sind, die die zeitliche Stetigkeit von $\frac{\partial}{\partial \dot{\hat{\mathbf{x}}}} l$ und die zeitliche Stetigkeit der Hamiltonfunktion H erhalten. Die Weierstrass-Erdmann Bedingungen sind *notwendige* Optimalitätsbedingungen. Ihre Herleitung findet sich z. B. in [4.8].

Beispiel 4.5. Gesucht ist ein (lokales) Minimum $x^* \in \mathcal{X}$ des Funktionals

$$J(x) = \int_{-1}^{1} x^2(t)(1 - \dot{x}(t))^2\,\mathrm{d}t \tag{4.56}$$

in der zulässigen Menge $\mathcal{X} = \{x(t) \in C^1[-1, 1] \,|\, x(-1) = 0, x(1) = 1\}$. Da die Lagrangesche Dichte nicht explizit von der Zeit t abhängt, ist die Hamiltonfunktion

$$H = \left(\frac{\partial}{\partial \dot{x}} l\right)\dot{x} - l = -2x^2(1 - \dot{x})\dot{x} - x^2(1 - \dot{x})^2 = x^2\Big(\dot{x}^2 - 1\Big) = -k_1 \tag{4.57}$$

für alle Zeiten $t \in [-1, 1]$ konstant mit der Konstanten k_1 und damit eine Invariante des Systems, siehe auch (4.25). Ersetzt man $x^2(t) = z(t)$ und $2x(t)\dot{x}(t) = \dot{z}(t)$ in (4.57), so ergibt sich

$$z(t) - \frac{1}{4}\dot{z}^2(t) = k_1 \ . \tag{4.58}$$

Die Lösung von (4.58) lautet

$$z(t) = (t + k_2)^2 + k_1 \tag{4.59}$$

mit der Konstanten k_2. Mit $x(-1) = 0$ und $x(1) = 1$ sowie $z(t) = x^2(t)$ folgen die Konstanten k_1 und k_2 zu $k_1 = -\left(\frac{3}{4}\right)^2$ und $k_2 = \frac{1}{4}$ und die mögliche stationäre Lösung $\bar{x}(t)$ des Kostenfunktionals (4.56) lautet

$$\bar{x}(t) = \pm\sqrt{\left(t + \frac{1}{4}\right)^2 - \left(\frac{3}{4}\right)^2} \ . \tag{4.60}$$

Die Wurzel liefert nur für $t \geq \frac{1}{2}$ und $t \leq -1$ ein reellwertiges Ergebnis, weshalb $\bar{x}(t)$ keine stationäre Lösung von (4.56) in der zulässigen Menge $\mathcal{X} = \{x(t) \in C^1[-1, 1] \,|\, x(-1) = 0,\ x(1) = 1\}$ darstellt.

Im nächsten Schritt soll das Kostenfunktional (4.56) in der zulässigen Menge $\hat{\mathcal{X}} = \{\hat{x}(t) \in \hat{C}^1[-1, 1] \,|\, \hat{x}(-1) = 0,\ \hat{x}(1) = 1\}$ minimiert werden. Die Weierstrass-Erdmann Bedingung (4.54a) besagt nun, dass an einem Eckpunkt $c \in (-1, 1)$ gilt

$$-2\hat{x}^2(c)\left[1 - \dot{\hat{x}}(c^-)\right] = -2\hat{x}^2(c)\left[1 - \dot{\hat{x}}\left(c^+\right)\right] \tag{4.61}$$

und folglich

$$\hat{x}^2(c)\left[\dot{\hat{x}}\left(c^+\right) - \dot{\hat{x}}(c^-)\right] = 0 \ . \tag{4.62}$$

Da an einem Eckpunkt $t = c$ gilt $\dot{\hat{x}}(c^+) \neq \dot{\hat{x}}(c^-)$, muss zur Erfüllung von (4.62) die Bedingung $\hat{x}(c) = 0$ eingehalten werden. D. h. eine Unstetigkeit in $\dot{\hat{x}}(t)$ kann nur an Stellen auftreten, an denen der Wert von $\hat{x}(t)$ selbst identisch Null ist. Den minimalen Wert des Kostenfunktionals (4.56), nämlich den Wert Null, erhält man, wenn $\hat{x}(t) = 0$ oder $\dot{\hat{x}}(t) = 1$ für alle t in $[-1, 1]$ gilt. Außerdem sind die Randbedingungen $\hat{x}(-1) = 0$ und $\hat{x}(1) = 1$ zu erfüllen. Aus diesen Überlegungen folgt, dass für die optimale Lösung $\hat{x}(t) = 0\ \forall\, t \in [-1, c]$ und $\dot{\hat{x}}(t) = 1\ \forall\, t \in (c, 1]$ gelten muss. Daraus ergibt sich der Umschaltpunkt $c = 0$ und die optimale Lösung

$$\hat{x}^*(t) = \begin{cases} 0 & \text{für } -1 \leq t \leq 0 \\ t & \text{für } 0 < t \leq 1. \end{cases} \tag{4.63}$$

Diese Lösung ist das eindeutige globale Minimum des Kostenfunktionals (4.56) in der zulässigen Menge $\hat{\mathcal{X}} = \{\hat{x}(t) \in \hat{C}^1[-1, 1] \,|\, \hat{x}(-1) = 0,\ \hat{x}(1) = 1\}$.

4.2 Entwurf von Optimalsteuerungen

4.2.1 Problemformulierung

Eine typische Optimalsteuerungsaufgabe besteht darin, für ein dynamisches System beschrieben durch die Differenzialgleichungen

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(t, \mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t)) \tag{4.64a}$$

mit der Zeit $t \in \mathbb{R}$, dem *Zustand* $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$, dem *Anfangszustand*

$$\mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}_0 \tag{4.64b}$$

und dem *Stelleingang* $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^m$ eine geeignete *Steuertrajektorie* $\mathbf{u}(t), t \in [t_0, t_1]$ so zu finden, dass ein *Kostenfunktional* der Form (siehe auch (4.2))

$$J(\mathbf{u}) = \varphi(t_0, \mathbf{x}(t_0), t_1, \mathbf{x}(t_1)) + \int_{t_0}^{t_1} l(t, \mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t))\,\mathrm{d}t \tag{4.65}$$

bezüglich $\mathbf{u}(t)$ minimiert wird und dabei allfällige Beschränkungen für $\mathbf{x}(t)$ und $\mathbf{u}(t)$ eingehalten werden. Die Abhängigkeit der Funktion φ von t_0 und $\mathbf{x}(t_0)$ ist nur dann relevant, wenn die Anfangsbedingung (4.64b) nicht vorhanden ist. Beim Kostenfunktional $J(\mathbf{u})$ unterscheidet man im Allgemeinen zwischen der *Bolza-Form* (4.65), der *Lagrange-Form*

$$J(\mathbf{u}) = \int_{t_0}^{t_1} l(t, \mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t))\,\mathrm{d}t \tag{4.66}$$

und der *Mayer-Form*

$$J(\mathbf{u}) = \varphi(t_0, \mathbf{x}(t_0), t_1, \mathbf{x}(t_1)) \ . \tag{4.67}$$

Aufgabe 4.2. Zeigen Sie, dass die Lagrange-Form in die Mayer-Form übergeführt werden kann, indem man einen zusätzlichen Zustand

$$\dot{x}_{n+1} = l(t, \mathbf{x}, \mathbf{u}), \quad x_{n+1}(t_0) = 0 \tag{4.68}$$

einführt und das Kostenfunktional in der Form $J(\mathbf{u}) = x_{n+1}(t_1)$ anschreibt.

Zeigen Sie, dass die Mayer-Form in die Lagrange-Form übergeführt werden kann, indem man einen zusätzlichen Zustand

$$\dot{x}_{n+1} = 0, \quad x_{n+1}(t_0) = \frac{1}{t_1 - t_0}\varphi(t_0, \mathbf{x}(t_0), t_1, \mathbf{x}(t_1)) \tag{4.69}$$

einführt und das Kostenfunktional in der Form $J(\mathbf{u}) = \int_{t_0}^{t_1} x_{n+1}(t)\,\mathrm{d}t$ anschreibt.

Zeigen Sie, wie man eine Bolza-Form in die Mayer- oder Lagrange-Form überführt.

Bei den möglichen Beschränkungen unterscheidet man wieder zwischen *Punktbeschränkungen*, beispielsweise Endpunktbeschränkungen der Form

$$\boldsymbol{\psi}(t_1, \mathbf{x}(t_1)) = \mathbf{0} \quad \text{bzw.} \quad \boldsymbol{\psi}(t_1, \mathbf{x}(t_1)) \leq \mathbf{0} \ , \tag{4.70}$$

Pfadbeschränkungen

$$\psi(t, \mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t)) = 0 \quad \text{bzw.} \quad \psi(t, \mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t)) \leq 0, \quad \forall\, t \in I \subseteq [t_0, t_1] \tag{4.71}$$

und *isoperimetrischen Beschränkungen*

$$\int_{t_0}^{t_1} \psi(t, \mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t))\, \mathrm{d}t = 0 \quad \text{bzw.} \quad \int_{t_0}^{t_1} \psi(t, \mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t))\, \mathrm{d}t \leq 0\ . \tag{4.72}$$

Häufig sind Pfadbeschränkungen (4.71) schwieriger zu berücksichtigen, wenn sie nicht von der Stellgröße abhängen. Isoperimetrische Beschränkungen können durch Einführung eines zusätzlichen Zustandes $x_{n+1}(t)$ mit $\dot{x}_{n+1}(t) = \psi(t, \mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t))$ und $x_{n+1}(t_0) = 0$ durch Endpunktbeschränkungen ersetzt werden.

4.2.2 Existenz und Eindeutigkeit einer Lösung

4.2.2.1 Existenz und Eindeutigkeit einer Lösung eines Anfangswertproblems

Im Skriptum Regelungssysteme 2 wurden hinreichende Bedingungen für die lokale Eindeutigkeit und Existenz der Lösung eines *Anfangswertproblems* angegeben. Sie besagen, wenn eine Funktion $\mathbf{g}(t, \mathbf{x})$ stückweise stetig in t ist und der Lipschitz-Bedingung

$$\|\mathbf{g}(t, \mathbf{x}) - \mathbf{g}(t, \mathbf{y})\| \leq L\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|, \quad 0 < L < \infty \tag{4.73}$$

für alle $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in B_\gamma = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_0\| \leq \gamma\}$ und alle $t \in [t_0, t_0 + \tau]$ genügt, dann existiert ein $\delta \in (0, \tau]$ so, dass das Anfangswertproblem

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{g}(t, \mathbf{x}), \quad \mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}_0 \tag{4.74}$$

für $t \in [t_0, t_0 + \delta]$ *genau eine Lösung* besitzt. Wie im Skriptum Regelungssysteme 2 beschrieben, ist die Stetigkeit von $\mathbf{g}(t, \mathbf{x})$ und $\left(\frac{\partial \mathbf{g}}{\partial \mathbf{x}}\right)(t, \mathbf{x})$ bezüglich $\mathbf{x}$ auf der Menge $[t_0, t_0 + \tau] \times B_\gamma$ *hinreichend* dafür, dass $\mathbf{g}(t, \mathbf{x})$ die Lipschitz-Bedingung (4.73) lokal erfüllt.

Da für die obige Existenzaussage nur stückweise Stetigkeit von $\mathbf{g}(t, \mathbf{x})$ in t erforderlich ist, sind mit $\mathbf{g}(t, \mathbf{x}) := \mathbf{f}(t, \mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t))$ entsprechend (4.64) für die Stellgrößen $\mathbf{u}(t)$ auch *stückweise stetige Funktionen* zugelassen, d. h. $\mathbf{u}(t) \in (\hat{C}[t_0, t_1])^m$. Man nennt eine reellwertige Funktion $u(t) \in \hat{C}[t_0, t_1]$ *stückweise stetig*, wenn eine *Partitionierung* $t_0 = c_0 < c_1 < \ldots < c_{N+1} = t_1$ mit $N < \infty$ so existiert, dass die Funktion $u(t)$ in allen Intervallen (c_k, c_{k+1}), $k = 0, \ldots, N$ stetig ist. Für stückweise stetige Stellgrößen $\mathbf{u}(t)$ sind die zugehörigen Zustandsgrößen von (4.64) stückweise stetig differenzierbar, d. h. $\mathbf{x}(t) \in (\hat{C}^1[t_0, t_1])^n$, wobei die Eckpunkte mit den Unstetigkeitsstellen der Stellgrößen übereinstimmen.

4.2.2.2 Existenz und Eindeutigkeit einer Lösung eines Optimalsteuerungsproblems

Die Frage, ob für ein Optimalsteuerungsproblem eine optimale Lösung existiert und sogar eindeutig ist, ist wesentlich schwieriger zu beantworten als die Frage nach der Existenz und Eindeutigkeit einer Lösung eines Anfangswertproblems.

Wie in Beispiel 4.3 gezeigt wurde, folgt aus der Existenz einer extremalen Lösung, welche z. B. durch Lösung von Euler-Lagrange Gleichungen (vgl. Satz 4.2) nachgewiesen werden kann, nicht automatisch die Existenz einer (lokal) optimalen Lösung. Damit aber eine optimale Lösung existieren kann, muss zumindest eine extremale Lösung existieren.

Existiert eine optimale Lösung und sind die extremalen Lösungen eindeutig, so ist auch die optimale Lösung eindeutig. Umgekehrt jedoch folgt aus der Eindeutigkeit einer optimalen Lösung nicht die Eindeutigkeit von extremalen Lösungen. Weitere Erläuterungen zu diesen Aussagen finden sich in [4.10].

In vielen Optimalsteuerungsproblemen unterliegen die Stellgrößen $\mathbf{u}(t)$ gewissen Beschränkungen, d. h. $\mathbf{u}(t) \in U \subset \mathbb{R}^m$. Eine stückweise stetige Stellgröße $\mathbf{u}(t)$ im Intervall $t_0 \leq t \leq t_1$ mit $\mathbf{u}(t) \in U$ für alle $t \in [t_0, t_1]$ wird im Weiteren als *zulässige Stellgröße* bezeichnet.

Eine zulässige Stellgröße wird als *realisierbar* bezeichnet, wenn die zugehörige Zustandstrajektorie $\mathbf{x}(t)$ von (4.64) im gesamten Intervall $t_0 \leq t \leq t_1$ eindeutig definiert ist (vgl. Abschnitt 4.2.2.1) und sämtliche Beschränkungen erfüllt. Wie die nachfolgenden Beispiele verdeutlichen, impliziert die Existenz einer realisierbaren Stellgröße nicht die Existenz einer optimalen Lösung eines Optimalsteuerungsproblems. Umgekehrt jedoch ist die Existenz einer realisierbaren Stellgröße natürlich eine Voraussetzung für die Existenz einer optimalen Lösung.

Beispiel 4.6. Es soll für das dynamische System $\dot{x} = u$ die Stellgröße $u(t) \geq 0$ so gewählt werden, dass der Zustand in minimaler Zeit vom Anfangszustand $x(t_0) = 0$ in den Endzustand $x(t_1) = 1$ (Endzeit t_1 ist frei) übergeführt wird, d. h. das Kostenfunktional

$$J(u) = t_1 - t_0 \tag{4.75}$$

ist zu minimieren. Es existiert keine realisierbare Stellgröße so, dass $J(u) = t_1 - t_0 = 0$ gilt. Die konstante Stellgröße

$$u(t) = \frac{1}{t_1 - t_0} \tag{4.76}$$

mit $t_1 - t_0 > 0$ ist realisierbar. Es existiert jedoch keine optimale Lösung, da zu jedem Wert $1/(t_1 - t_0)$ eine noch größere finite Stellgröße $u(t)$ gefunden werden kann, die $J(u) = t_1 - t_0 > 0$ weiter verkleinert.

Beispiel 4.7. Es sollen für das dynamische System $\dot{x} = u$ die Stellgröße $u(t) \in [0, 1]$ und die Endzeit $t_1 \geq t_0$ so gewählt werden, dass der Zustand vom Anfangszustand $x(t_0) = 0$ in den Endzustand $x(t_1) = 1$ übergeführt wird und das Kostenfunktional

$$J(u) = \int_{t_0}^{t_1} u^2(t)\,\mathrm{d}t \tag{4.77}$$

minimiert wird. Die konstante Stellgröße $u(t) = 0$ ist nicht realisierbar, d. h. für jede realisierbare Stellgröße muss $J(u) > 0$ gelten. Die konstante Stellgröße

$$u(t) = \frac{1}{t_1 - t_0} \tag{4.78}$$

mit $t_1 - t_0 \geq 1$ ist realisierbar und liefert für das Kostenfunktional den Wert

$$J(u) = \int_{t_0}^{t_1} \left(\frac{1}{t_1 - t_0} \right)^2 \mathrm{d}t = \frac{1}{t_1 - t_0} \ . \tag{4.79}$$

Es existiert jedoch keine optimale Lösung, da zu jedem Wert $u(t)$ eine noch kleinere von Null verschiedene Stellgröße gefunden werden kann, die $J(u) = 1/(t_1 - t_0) > 0$ mit $t_1 < \infty$ weiter verkleinert.

In beiden Beispielen ist die Menge der realisierbaren Lösungen *unbeschränkt* und daher *nicht kompakt*. Folglich kann der Satz von Weierstrass Satz 1.1 nicht angewandt werden. In Beispiel 4.6 ist die Stellgröße $u(t)$ selbst unbeschränkt. In Beispiel 4.7 hat das Intervall $[t_0, t_1]$ eine unbeschränkte Länge, weshalb auch hier die Menge der realisierbaren Stellgrößen unbeschränkt (nicht kompakt) ist. Um letzteres Problem zu verhindern, kann bei Optimalsteuerungsproblemen mit freier Endzeit t_1 die Einschränkung $t_0 \leq t_1 \leq T$ mit einem hinreichend großen, festen Wert T verwendet werden.

In den beiden obigen Beispielen ist unmittelbar einsichtig, warum die Menge der realisierbaren Lösungen nicht kompakt ist. Schwieriger kann das Feststellen der Nichtkompaktheit der Menge der realisierbaren Stellgrößen sein, wenn sie mit einer Zustandstrajektorie von (4.64), die eine Beschränkung verletzt oder nicht definiert ist, im Zusammenhang steht. Exemplarisch dafür ist das nachfolgende Beispiel. Hier ist die Menge der realisierbaren Stellgrößen *nicht abgeschlossen* und daher *nicht kompakt*, da am Rand dieser Menge die zugehörige Zustandstrajektorie nicht mehr definiert ist. In diesem Beispiel existiert keine optimale Stellgröße.

Beispiel 4.8. Es soll für das dynamische System $\dot{x} = (1+x)^2 u$ mit dem Anfangszustand $x(0) = 0$ die Stellgröße $u(t) \in [0, 1]$ so gewählt werden, dass das Kostenfunktional

$$J(u) = \int_0^1 \frac{1}{1 + x(t)} \, \mathrm{d}t \tag{4.80}$$

minimiert wird. Der Endzustand $x(1)$ ist frei.

Da hier $x(t) \geq 0$ gilt, ist der Integrand in (4.80) stets nichtnegativ und finit. Um $J(u)$ zu minimieren, ist die Stellgröße $u(t)$ so zu wählen, dass $x(t)$ schnellstmöglich wächst. Die extremale Stellgröße $u(t) = 1$ würde das schnellste Wachstum von $x(t)$ hervorrufen, ist aber nicht realisierbar, da die zugehörige Lösung $x(t) = t/(1 - t)$ für $t = 1$ nicht definiert ist. In diesem Fall würde sich der Wert $J(u) = 1/2$ ergeben. Alternativ kann die konstante realisierbare Stellgröße $u(t) = \alpha$ mit $0 \leq \alpha < 1$ gewählt werden, welche $x(t) = \alpha t/(1 - \alpha t)$ und $J(u) = 1 - \alpha/2 > 1/2$ liefert. Es existiert in diesem Fall also keine optimale Lösung, da zu jeder realisierbaren Stellgröße $u(t)$ eine noch größere realisierbare Stellgröße gefunden werden kann, die $J(u) > 1/2$ weiter

verkleinert.

In diesem Beispiel strebt die optimale Zustandstrajektorie im betrachteten endlichen Zeitintervall $[t_0, t_1]$ gegen Unendlich. Im Englischen wird dieses Verhalten als *finite escape time* bezeichnet. Um derartige Fälle zu vermeiden, kann eine zusätzliche Pfadbeschränkung der Art

$$\|\mathbf{x}(t)\| \leq \alpha, \quad \forall\, t \in [t_0, t_1] \tag{4.81}$$

mit einem endlichen Wert $\alpha > 0$ verwendet werden [4.11]. Diese Beschränkung wird z. B. von dynamischen Systemen erfüllt, die einer der beiden Ungleichungen

$$|\mathbf{f}(t, \mathbf{x}, \mathbf{u}(t))| \leq \beta \|\mathbf{x}\|_1 + \gamma \tag{4.82a}$$

$$|\mathbf{x}^{\mathrm{T}} \mathbf{f}(t, \mathbf{x}, \mathbf{u}(t))| \leq \beta \|\mathbf{x}\|_2^2 + \gamma \tag{4.82b}$$

mit nichtnegativen Konstanten β und γ für alle $t \in [t_0, t_1]$, alle zulässigen $\mathbf{u}(t)$ und alle $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ genügen. Dies gilt für Systeme, die in $\mathbf{x}$ affin sind, d. h. die Struktur $\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{A}(t, \mathbf{u})\mathbf{x} + \mathbf{b}(t, \mathbf{u})$ aufweisen.

Bislang wurde anhand von Negativbeispielen verdeutlicht, dass die Frage nach der Existenz einer Lösung eines Optimalsteuerungsproblems keineswegs einfach zu beantworten ist. Nachfolgend sollen Möglichkeiten skizziert werden, um diese Frage positiv zu beantworten.

Eine Methode zum Nachweis der Existenz einer optimalen Lösung eines Optimalsteuerungsproblems ist die folgende: Findet man eine untere Schranke $\underline{J} > -\infty$ so, dass $J(\mathbf{u}) \geq \underline{J}$ für alle realisierbaren Stellgrößen $\mathbf{u}$ gelten muss, so ist jede realisierbare Stellgröße $\mathbf{u}^*$, welche $J(\mathbf{u}^*) = \underline{J}$ liefert, optimal. Diese Methode wird im nachfolgenden Beispiel verwendet.

Beispiel 4.9. Es soll für das dynamische System $\dot{x} = 1 - (u_1^2 + u_2^2)$ mit dem Anfangszustand $x(0) = 0$ die Stellgröße $\mathbf{u}(t) \in \mathbb{R}^2$ so gewählt werden, dass das Kostenfunktional

$$J(u) = \int_0^1 x^2(t)\, \mathrm{d}t \tag{4.83}$$

minimiert wird. Der Endzustand $x(1)$ ist frei.

Der Wert $\underline{J} = 0$ ist eine unter Schranke für $J(\mathbf{u})$, da der Integrand von (4.83) stets nichtnegativ ist. Jede realisierbare Stellgröße $\mathbf{u}^*(t)$, die $\|\mathbf{u}^*(t)\|_2^2 = 1\ \forall\, t \in [0, 1]$ erfüllt, also z. B.

$$\mathbf{u}(t) = \begin{bmatrix} \sin(\omega t + \phi) \\ \cos(\omega t + \phi) \end{bmatrix} \tag{4.84}$$

mit beliebigen Werten ω und ϕ, ist optimal, da sie $x^*(t) = 0$ und $J(\mathbf{u}^*) = 0$ liefert.

Dieses Beispiel zeigt, dass die Existenz einer optimalen Lösung (Stellgröße) nicht deren Eindeutigkeit impliziert. Auch die hier gegebene Eindeutigkeit der optimalen Zustandstrajektorie $x^*(t) = 0$ ändert daran nichts.

Um die Existenz einer Lösung eines Optimalsteuerungsproblems sicherzustellen, können zwei im nachfolgenden Satz beschriebene Wege beschritten werden: Die zulässigen Stellgrößen können auf spezielle Mengen eingeschränkt werden oder von $\mathbf{f}(t, \mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t))$ und

$l(t, \mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t))$ werden gewisse Konvexitätseigenschaften gefordert. Beweise zum nachfolgenden Satz finden sich z. B. in [4.11, 4.12].

Satz 4.8 (Existenz einer optimalen Lösung). *Werden die nachfolgenden Bedingungen erfüllt, so besitzt ein Optimalsteuerungsproblem mit dem Kostenfunktional (4.65) eine optimale Lösung.*

- *U ist eine kompakte Menge.*
- *Die Zustandstrajektorien von (4.64) genügen der Bedingung (4.81), d. h. sie sind beschränkt.*
- *Der Endzustand $\mathbf{x}(t_1)$ wird basierend auf (4.70) auf eine abgeschlossene Menge beschränkt.*
- *Die Funktionen $\mathbf{f}(t, \mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t))$, $l(t, \mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t))$ und $\varphi(t_0, \mathbf{x}(t_0), t_1, \mathbf{x}(t_1))$ sind stetig.*
- *Die Menge der realisierbaren Stellgrößen ist nichtleer.*
- *Es wird zumindest eine der folgenden Bedingungen erfüllt.*
  - *Es werden nur Stellgrößen $\mathbf{u}(t) \in U$ zugelassen, die die Lipschitz-Bedingung*

$$\|\mathbf{u}(t) - \mathbf{u}(s)\| \leq L_u |t - s|, \quad 0 < L_u < \infty, \quad \forall s, t \in [t_0, t_1] \tag{4.85}$$

    erfüllen.
  - *Es werden nur Stellgrößen $\mathbf{u}(t) \in U$ zugelassen, die stückweise konstant sind mit einer finiten Anzahl an Unstetigkeitsstellen.*
  - *Die Menge $\{[\mathbf{f}^{\mathrm{T}}(t, \mathbf{x}(t), \mathbf{v}) \quad l(t, \mathbf{x}(t), \mathbf{v})]^{\mathrm{T}} \,|\, \mathbf{v} \in U\} \in \mathbb{R}^{n+1}$ ist für feste Werte t und $\mathbf{x}(t)$ konvex.*

Weiterführende Aussagen zur Existenz und Eindeutigkeit von Lösungen eines Optimalsteuerungsproblems finden sich z. B. in [4.10–4.14].

4.2.3 Variationsformulierung

Im Folgenden werden die notwendigen Optimalitätsbedingungen erster Ordnung für ein Optimalsteuerungsproblem mit fester Endzeit und freiem Endwert formuliert.

Satz 4.9 (Optimalsteuerungsproblem mit fester Endzeit und freiem Endwert). *Gesucht ist die Stellgröße $\mathbf{u} \in (C[t_0, t_1])^m$ so, dass das Kostenfunktional (Bolza-Form)*

$$J(\mathbf{u}) = \varphi(\mathbf{x}(t_1)) + \int_{t_0}^{t_1} l(t, \mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t)) \, \mathrm{d}t \tag{4.86}$$

unter der Gleichungsbeschränkung (dynamisches System)

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(t, \mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t)), \quad \mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}_0 \tag{4.87}$$

mit fester Anfangszeit t_0 und fester Endzeit $t_1 > t_0$ minimiert wird. Dabei wird angenommen, dass l und $\mathbf{f}$ stetig in t und stetig differenzierbar bezüglich $\mathbf{x}$ und $\mathbf{u}$ für alle $(t, \mathbf{x}, \mathbf{u}) \in [t_0, t_1] \times \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m$ sind und die Funktion φ stetig und stetig differenzierbar bezüglich $\mathbf{x}_1$ für alle $\mathbf{x}_1 \in \mathbb{R}^n$ ist. Wenn $\mathbf{u}^*(t) \in (C[t_0, t_1])^m$ die optimale Lösung des Optimierungsproblems bezeichnet und $\mathbf{x}^*(t) \in (C^1[t_0, t_1])^n$ die zugehörige Lösung des Anfangswertproblems (4.87) ist, dann existiert ein $\boldsymbol{\lambda}^*(t) \in (C^1[t_0, t_1])^n$ so, dass gilt

$$\dot{\mathbf{x}}^* = \mathbf{f}(t, \mathbf{x}^*(t), \mathbf{u}^*(t)), \quad \mathbf{x}^*(t_0) = \mathbf{x}_0 \tag{4.88a}$$

$$\begin{aligned} \dot{\boldsymbol{\lambda}}^* &= -\left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} l\right)^{\mathrm{T}}(t, \mathbf{x}^*(t), \mathbf{u}^*(t)) - \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \mathbf{f}\right)^{\mathrm{T}}(t, \mathbf{x}^*(t), \mathbf{u}^*(t))\boldsymbol{\lambda}^*(t) \\ \boldsymbol{\lambda}^*(t_1) &= \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\mathbf{x}_1}\varphi\right)^{\mathrm{T}}(\mathbf{x}^*(t_1)) \end{aligned} \tag{4.88b}$$

$$\mathbf{0} = \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} l\right)^{\mathrm{T}}(t, \mathbf{x}^*(t), \mathbf{u}^*(t)) + \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} \mathbf{f}\right)^{\mathrm{T}}(t, \mathbf{x}^*(t), \mathbf{u}^*(t))\boldsymbol{\lambda}^*(t) \tag{4.88c}$$

für $t_0 \leq t \leq t_1$. Die Gleichungen (4.88) werden als Euler-Lagrange Gleichungen des Optimalsteuerungsproblems *und $\boldsymbol{\lambda}^*(t)$ als* adjungierter Zustand *oder* Kozustand *bezeichnet.*

Beweis. Für den Beweis dieses Satzes wird im ersten Schritt die Gâteaux Ableitung $\delta J(\mathbf{u}; \boldsymbol{\xi}_u)$ mit $\mathbf{u}(t)$, $\boldsymbol{\xi}_u(t) \in (C[t_0, t_1])^m$ allgemein berechnet. Im zweiten Schritt wird diese Gâteaux Ableitung in die Optimalitätsbedingung gemäß Satz 4.1 eingesetzt.

Es sei $\mathbf{x}(t)$ die Lösungstrajektorie von (4.87) für einen gegebenen Eingang $\mathbf{u}(t)$. Die Gâteaux Ableitung von $\mathbf{x}(t)$ bezüglich $\boldsymbol{\xi}_u$ am Punkt $\mathbf{u}$ soll mit $\delta\mathbf{x}(\mathbf{u}; \boldsymbol{\xi}_u)|_t \in \mathbb{R}^n$ bezeichnet werden. Wegen der Anfangsbedingung $\mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}_0$ gilt

$$\delta\mathbf{x}(\mathbf{u}; \boldsymbol{\xi}_u)|_{t_0} = \mathbf{0} \ . \tag{4.89a}$$

Die Gâteaux Ableitung der Differenzialgleichung $\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(t, \mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t))$ lautet

$$\delta\dot{\mathbf{x}}(\mathbf{u}; \boldsymbol{\xi}_u)|_t = \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}\mathbf{f}(t, \mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t))\delta\mathbf{x}(\mathbf{u}; \boldsymbol{\xi}_u)|_t + \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}}\mathbf{f}(t, \mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t))\boldsymbol{\xi}_u(t) \ . \tag{4.89b}$$

Um aus dem linearen (zeitvarianten) Anfangswertproblem (4.89) die Gâteaux Ableitung $\delta\mathbf{x}(\mathbf{u}; \boldsymbol{\xi}_u)|_\tau$ zum Zeitpunkt $\tau \in [t_0, t_1]$ auszurechnen, betrachte man die zur Dynamikmatrix $\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}\mathbf{f}(t, \mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t))$ gehörige Transitionsmatrix

$$\boldsymbol{\Phi}(\tau, t) \tag{4.90}$$

für das Zeitintervall $[t, \tau]$. Mit dieser Transitionsmatrix folgt die Lösung von (4.89) in der Form

$$\delta\mathbf{x}(\mathbf{u}; \boldsymbol{\xi}_u)|_\tau = \int_{t_0}^{\tau} \boldsymbol{\Phi}(\tau, t)\frac{\partial}{\partial \mathbf{u}}\mathbf{f}(t, \mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t))\boldsymbol{\xi}_u(t)\,\mathrm{d}t \ . \tag{4.91}$$

Für die gesuchte Gâteaux Ableitung $\delta J(\mathbf{u};\boldsymbol{\xi}_u)$ an einem allgemeinen Punkt $\mathbf{u} \in (C[t_0,t_1])^m$ bezüglich $\boldsymbol{\xi}_u$ ergibt sich daher unter Verwendung der Kettenregel

$$\begin{aligned}
&\delta J(\mathbf{u};\boldsymbol{\xi}_u) \\
&\quad= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\mathbf{x}_1}\varphi(\mathbf{x}(t_1))\delta\mathbf{x}(\mathbf{u};\boldsymbol{\xi}_u)|_{t_1} \\
&\qquad+ \int_{t_0}^{t_1} \frac{\partial}{\partial\mathbf{x}} l(\tau,\mathbf{x}(\tau),\mathbf{u}(\tau))\delta\mathbf{x}(\mathbf{u};\boldsymbol{\xi}_u)|_\tau + \frac{\partial}{\partial\mathbf{u}} l(\tau,\mathbf{x}(\tau),\mathbf{u}(\tau))\boldsymbol{\xi}_u(\tau)\,\mathrm{d}\tau \\
&\quad= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\mathbf{x}_1}\varphi(\mathbf{x}(t_1)) \int_{t_0}^{t_1} \boldsymbol{\Phi}(t_1,t)\frac{\partial}{\partial\mathbf{u}}\mathbf{f}(t,\mathbf{x}(t),\mathbf{u}(t))\boldsymbol{\xi}_u(t)\,\mathrm{d}t \\
&\qquad+ \int_{t_0}^{t_1} \Bigg(\frac{\partial}{\partial\mathbf{x}} l(\tau,\mathbf{x}(\tau),\mathbf{u}(\tau)) \int_{t_0}^{\tau} \boldsymbol{\Phi}(\tau,t)\frac{\partial}{\partial\mathbf{u}}\mathbf{f}(t,\mathbf{x}(t),\mathbf{u}(t))\boldsymbol{\xi}_u(t)\,\mathrm{d}t \\
&\qquad\qquad+ \frac{\partial}{\partial\mathbf{u}} l(\tau,\mathbf{x}(\tau),\mathbf{u}(\tau))\boldsymbol{\xi}_u(\tau)\Bigg)\,\mathrm{d}\tau \qquad (4.92) \\
&\quad= \int_{t_0}^{t_1} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\mathbf{x}_1}\varphi(\mathbf{x}(t_1))\boldsymbol{\Phi}(t_1,t)\frac{\partial}{\partial\mathbf{u}}\mathbf{f}(t,\mathbf{x}(t),\mathbf{u}(t))\boldsymbol{\xi}_u(t)\,\mathrm{d}t \\
&\qquad+ \int_{t_0}^{t_1}\int_{t}^{t_1} \frac{\partial}{\partial\mathbf{x}} l(\tau,\mathbf{x}(\tau),\mathbf{u}(\tau))\boldsymbol{\Phi}(\tau,t)\frac{\partial}{\partial\mathbf{u}}\mathbf{f}(t,\mathbf{x}(t),\mathbf{u}(t))\boldsymbol{\xi}_u(t)\,\mathrm{d}\tau\,\mathrm{d}t \\
&\qquad+ \int_{t_0}^{t_1} \frac{\partial}{\partial\mathbf{u}} l(t,\mathbf{x}(t),\mathbf{u}(t))\boldsymbol{\xi}_u(t)\,\mathrm{d}t \\
&\quad= \int_{t_0}^{t_1} \Bigg[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\mathbf{x}_1}\varphi(\mathbf{x}(t_1))\boldsymbol{\Phi}(t_1,t)\frac{\partial}{\partial\mathbf{u}}\mathbf{f}(t,\mathbf{x}(t),\mathbf{u}(t)) + \frac{\partial}{\partial\mathbf{u}} l(t,\mathbf{x}(t),\mathbf{u}(t)) \\
&\qquad\qquad+ \int_{t}^{t_1} \frac{\partial}{\partial\mathbf{x}} l(\tau,\mathbf{x}(\tau),\mathbf{u}(\tau))\boldsymbol{\Phi}(\tau,t)\,\mathrm{d}\tau\frac{\partial}{\partial\mathbf{u}}\mathbf{f}(t,\mathbf{x}(t),\mathbf{u}(t))\Bigg]\boldsymbol{\xi}_u(t)\,\mathrm{d}t\ .
\end{aligned}$$

Aufgrund von Satz 4.1 muss am optimalen Punkt $\mathbf{u}^* \in (C[t_0,t_1])^m$ die Bedingung $\delta J(\mathbf{u}^*;\boldsymbol{\xi}_u) = 0$ für alle zulässigen Richtungen $\boldsymbol{\xi}_u \in (C[t_0,t_1])^m$ erfüllt sein. Gemäß dem Fundamentallemma der Variationsrechnung Lemma 4.2 folgt daher aus (4.92)

$$\begin{aligned}
&\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\mathbf{x}_1}\varphi(\mathbf{x}^*(t_1))\boldsymbol{\Phi}^*(t_1,t)\frac{\partial}{\partial\mathbf{u}}\mathbf{f}(t,\mathbf{x}^*(t),\mathbf{u}^*(t)) + \frac{\partial}{\partial\mathbf{u}} l(t,\mathbf{x}^*(t),\mathbf{u}^*(t)) \\
&+ \int_{t}^{t_1} \frac{\partial}{\partial\mathbf{x}} l(\tau,\mathbf{x}^*(\tau),\mathbf{u}^*(\tau))\boldsymbol{\Phi}^*(\tau,t)\,\mathrm{d}\tau\frac{\partial}{\partial\mathbf{u}}\mathbf{f}(t,\mathbf{x}^*(t),\mathbf{u}^*(t)) = \mathbf{0}
\end{aligned} \qquad (4.93)$$

für alle $t \in [t_0,t_1]$. Die Transitionsmatrix (4.90) ist auch für das lineare Anfangswertproblem (4.88b) anwendbar. In diesem Fall lautet die zur Dynamikmatrix $-\left(\frac{\partial}{\partial\mathbf{x}}\mathbf{f}\right)^{\mathrm{T}}(t,\mathbf{x}^*(t),\mathbf{u}^*(t))$ und zum Zeitintervall $[\tau,t]$ gehörige Transitionsmatrix $\boldsymbol{\Phi}^{*\mathrm{T}}(\tau,t)$. Damit ergibt sich die Lösung von (4.88b) in der Form

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\lambda}^*(t) &= \boldsymbol{\Phi}^{*\mathrm{T}}(t_1,t)\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\mathbf{x}_1}\varphi\right)^{\mathrm{T}}(\mathbf{x}^*(t_1)) - \int_{t_1}^{t}\boldsymbol{\Phi}^{*\mathrm{T}}(\tau,t)\left(\frac{\partial}{\partial\mathbf{x}}l\right)^{\mathrm{T}}(\tau,\mathbf{x}^*(\tau),\mathbf{u}^*(\tau))\,\mathrm{d}\tau \\ &= \boldsymbol{\Phi}^{*\mathrm{T}}(t_1,t)\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\mathbf{x}_1}\varphi\right)^{\mathrm{T}}(\mathbf{x}^*(t_1)) + \int_{t}^{t_1}\boldsymbol{\Phi}^{*\mathrm{T}}(\tau,t)\left(\frac{\partial}{\partial\mathbf{x}}l\right)^{\mathrm{T}}(\tau,\mathbf{x}^*(\tau),\mathbf{u}^*(\tau))\,\mathrm{d}\tau\ .\end{aligned} \tag{4.94}$$

Einsetzen dieser Lösung in (4.88c) zeigt die Äquivalenz zwischen den Bedingungen (4.88c) und (4.93). □

Aus (4.88) folgt, dass sich die notwendigen Optimalitätsbedingungen für das Optimalsteuerungsproblem (4.86) und (4.87) aus $2n$ *Differentialgleichungen* in $\mathbf{x}^*$ und $\boldsymbol{\lambda}^*$ und m *algebraischen Gleichungen* zusammensetzen. Da für die Differentialgleichung in $\mathbf{x}^*$ der Wert zum Anfangszeitpunkt $t = t_0$ und für die Differentialgleichung in $\boldsymbol{\lambda}^*$ der Wert zum Endzeitpunkt $t = t_1$ gegeben ist, handelt es sich um ein *Zweipunktrandwertproblem*. Analog zum Lagrange-Multiplikator in Satz 3.7 lässt sich der adjungierte Zustand $\boldsymbol{\lambda}(t)$ gemäß (4.94) in der Form interpretieren, dass $\boldsymbol{\lambda}(t)$ (zu einem bestimmten Zeitpunkt t) der *Sensitivität des Kostenfunktionals* (4.86) bezüglich einer (sprungförmigen) Änderung des Zustandes $\mathbf{x}(t)$ (zum selben Zeitpunkt t) entspricht.

Um die Gâteaux Ableitung $\delta J(\mathbf{u};\boldsymbol{\xi}_u)$ und die Optimalitätsbedingungen von Satz 4.9 alternativ mit Hilfe eines Lagrangefunktionals zu formulieren, wird zunächst in Erweiterung zur Definition 4.1 der Begriff der *partiellen Gâteaux Ableitung* definiert.

Definition 4.3 (Partielle Gâteaux Ableitung)**.** Die *partielle Gâteaux Ableitung* des Funktionals $J(\mathbf{x}_1,\dots,\mathbf{x}_n)$ am Punkt $[\mathbf{x}_1^{\mathrm{T}},\dots,\mathbf{x}_n^{\mathrm{T}}]^{\mathrm{T}} \in \mathcal{V}$ bezüglich $\mathbf{x}_i$ mit $i \in \{1,\dots,n\}$ in Richtung $\boldsymbol{\xi}$ mit $\dim(\boldsymbol{\xi}) = \dim(\mathbf{x}_i)$ und $[\mathbf{x}_1^{\mathrm{T}},\dots,\mathbf{x}_i^{\mathrm{T}}+\boldsymbol{\xi}^{\mathrm{T}},\dots,\mathbf{x}_n^{\mathrm{T}}]^{\mathrm{T}} \in \mathcal{V}$ ist in der Form

$$\begin{aligned}\delta_{\mathbf{x}_i}J(\mathbf{x}_1,\dots,\mathbf{x}_n;\boldsymbol{\xi}) :&= \lim_{\eta\to 0}\frac{J(\mathbf{x}_1,\dots,\mathbf{x}_i+\eta\boldsymbol{\xi},\dots,\mathbf{x}_n)-J(\mathbf{x}_1,\dots,\mathbf{x}_n)}{\eta} \\ &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\eta}J(\mathbf{x}_1,\dots,\mathbf{x}_i+\eta\boldsymbol{\xi},\dots,\mathbf{x}_n)\Big|_{\eta=0}\end{aligned} \tag{4.95}$$

definiert.

Wird nun für das Kostenfunktional (4.86) mit den Gleichungsbeschränkungen (4.87) das *Lagrangefunktional*

$$\begin{aligned}L(\mathbf{x},\mathbf{u},\boldsymbol{\lambda}) &= J(\mathbf{u}) + \int_{t_0}^{t_1}\boldsymbol{\lambda}^{\mathrm{T}}(t)(\mathbf{f}(t,\mathbf{x}(t),\mathbf{u}(t)) - \dot{\mathbf{x}}(t))\,\mathrm{d}t \\ &= \varphi(\mathbf{x}(t_1)) + \int_{t_0}^{t_1} l(t,\mathbf{x}(t),\mathbf{u}(t)) + \boldsymbol{\lambda}^{\mathrm{T}}(t)(\mathbf{f}(t,\mathbf{x}(t),\mathbf{u}(t)) - \dot{\mathbf{x}}(t))\,\mathrm{d}t\end{aligned} \tag{4.96}$$

eingeführt (vgl. dazu die Lagrangefunktion (3.24) für ein statisches Optimierungsproblem mit Gleichungsbeschränkungen), so ergibt sich die Gâteaux Ableitung $\delta J(\mathbf{u};\boldsymbol{\xi}_u)$ an einem

allgemeinen Punkt $\mathbf{u} \in (C[t_0, t_1])^m$ bezüglich $\boldsymbol{\xi}_u(t) \in (C[t_0, t_1])^m$ in der Form

$$\begin{aligned} \delta J(\mathbf{u}; \boldsymbol{\xi}_u) &= \delta_{\mathbf{u}} L(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda}; \boldsymbol{\xi}_u) \\ &= \int_{t_0}^{t_1} \left[\frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} l(t, \mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t)) + \boldsymbol{\lambda}^{\mathrm{T}}(t) \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} \mathbf{f}(t, \mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t)) \right] \boldsymbol{\xi}_u(t) \, \mathrm{d}t \, , \end{aligned} \tag{4.97a}$$

wobei die Bedingungen

$$\begin{aligned} \mathbf{0} &= \delta_{\mathbf{x}} L(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda}; \boldsymbol{\xi}_x) \\ &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\mathbf{x}_1} \varphi(\mathbf{x}(t_1)) \boldsymbol{\xi}_x(t_1) \\ &\quad + \int_{t_0}^{t_1} \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} l(t, \mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t)) \boldsymbol{\xi}_x(t) + \boldsymbol{\lambda}^{\mathrm{T}}(t) \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \mathbf{f}(t, \mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t)) \boldsymbol{\xi}_x(t) - \dot{\boldsymbol{\xi}}_x(t) \right) \mathrm{d}t \\ &= \left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\mathbf{x}_1} \varphi(\mathbf{x}(t_1)) - \boldsymbol{\lambda}^{\mathrm{T}}(t_1) \right] \boldsymbol{\xi}_x(t_1) + \boldsymbol{\lambda}^{\mathrm{T}}(t_0) \boldsymbol{\xi}_x(t_0) \\ &\quad + \int_{t_0}^{t_1} \left[\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} l(t, \mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t)) + \boldsymbol{\lambda}^{\mathrm{T}}(t) \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \mathbf{f}(t, \mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t)) + \dot{\boldsymbol{\lambda}}^{\mathrm{T}}(t) \right] \boldsymbol{\xi}_x(t) \, \mathrm{d}t \end{aligned} \tag{4.97b}$$

$$\mathbf{0} = \delta_{\boldsymbol{\lambda}} L(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda}; \boldsymbol{\xi}_\lambda) = \int_{t_0}^{t_1} \boldsymbol{\xi}_\lambda^{\mathrm{T}}(t) [\mathbf{f}(t, \mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t)) - \dot{\mathbf{x}}(t)] \, \mathrm{d}t \tag{4.97c}$$

für alle zulässigen Richtungen $\boldsymbol{\xi}_x(t) \in (C^1[t_0, t_1])^n$ mit $\boldsymbol{\xi}_x(t_0) = \mathbf{0}$ zufolge der Anfangsbedingung $\mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}_0$ und für alle zulässigen Richtungen $\boldsymbol{\xi}_\lambda(t) \in (C^1[t_0, t_1])^n$ einzuhalten sind. Gemäß Fundamentallemma der Variationsrechnung Lemma 4.2 folgt aus (4.97b)

$$\begin{aligned} \dot{\boldsymbol{\lambda}} &= -\left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} l \right)^{\mathrm{T}} (t, \mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t)) - \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \mathbf{f} \right)^{\mathrm{T}} (t, \mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t)) \boldsymbol{\lambda}(t) \\ \boldsymbol{\lambda}(t_1) &= \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\mathbf{x}_1} \varphi \right)^{\mathrm{T}} (\mathbf{x}(t_1)) \end{aligned} \tag{4.98}$$

und aus (4.97c) die Differenzialgleichung (4.87). Um zu sehen, dass (4.97) tatsächlich genau die Gâteaux Ableitung $\delta J(\mathbf{u}; \boldsymbol{\xi}_u)$ gemäß (4.92) liefert, kann die Lösung $\boldsymbol{\lambda}(t)$ von (4.98) analog zu (4.94) mit Hilfe der zur Dynamikmatrix $-\left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \mathbf{f}\right)^{\mathrm{T}} (t, \mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t))$ und zum Zeitintervall $[\tau, t]$ gehörigen Transitionsmatrix $\boldsymbol{\Phi}^{\mathrm{T}}(\tau, t)$ formuliert und in (4.97a) eingesetzt werden. Ein Vergleich zwischen der hier beschriebenen Berechnung der Gâteaux Ableitung $\delta J(\mathbf{u}; \boldsymbol{\xi}_u)$ anhand des Lagrangefunktionals $L(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda})$ mit der Berechnung des reduzierten Gradienten mit Hilfe der Lagrangefunktion in der beschränkten statischen Optimierung gemäß Lemma 3.2 zeigt die strukturelle Ähnlichkeit dieser beiden Methoden. Da am optimalen Punkt $\mathbf{u}^* \in (C[t_0, t_1])^m$ gemäß Satz 4.1 die Bedingung $\delta J(\mathbf{u}^*; \boldsymbol{\xi}_u) = 0$ für alle zulässigen Richtungen $\boldsymbol{\xi}_u(t) \in (C[t_0, t_1])^m$ erfüllt sein muss, folgen aus (4.97a), (4.98) und (4.87) unter Verwendung von Lemma 4.2 genau die Optimalitätsbedingungen (4.88) von Satz 4.9 (Euler-Lagrange Gleichungen).

Alternativ lassen sich diese mit Hilfe der *Hamiltonfunktion*

$$H(t, \mathbf{x}, \mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda}) = l(t, \mathbf{x}, \mathbf{u}) + \boldsymbol{\lambda}^{\mathrm{T}}(t) \mathbf{f}(t, \mathbf{x}, \mathbf{u}) \tag{4.99}$$

auch in der Form

$$\dot{\mathbf{x}}^* = \left(\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\lambda}} H\right)^{\mathrm{T}} (t, \mathbf{x}^*(t), \mathbf{u}^*(t), \boldsymbol{\lambda}^*(t)), \qquad \mathbf{x}^*(t_0) = \mathbf{x}_0 \tag{4.100a}$$

$$\dot{\boldsymbol{\lambda}}^* = -\left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} H\right)^{\mathrm{T}} (t, \mathbf{x}^*(t), \mathbf{u}^*(t), \boldsymbol{\lambda}^*(t)), \qquad \boldsymbol{\lambda}^*(t_1) = \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_1} \varphi\right)^{\mathrm{T}} (\mathbf{x}^*(t_1)) \tag{4.100b}$$

$$\mathbf{0} = \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} H\right)^{\mathrm{T}} (t, \mathbf{x}^*(t), \mathbf{u}^*(t), \boldsymbol{\lambda}^*(t)) \tag{4.100c}$$

für $t_0 \leq t \leq t_1$ anschreiben. Man beachte, dass sich die hier in der dynamischen Optimierung verwendete Hamiltonfunktion H im Vorzeichen von jener der Variationsrechnung (siehe (4.24)) unterscheidet. Die Bedingung (4.100c) zeigt, dass $\mathbf{u}^*$ ein *stationärer Punkt* der Hamiltonfunktion H sein muss. Die Ableitung der Hamiltonfunktion entlang der optimalen Lösung $(\mathbf{x}^*(t), \mathbf{u}^*(t), \boldsymbol{\lambda}^*(t))$ nach der Zeit liefert

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} H &= \frac{\partial}{\partial t} H + \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} H\right) \dot{\mathbf{x}}^* + \underbrace{\left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} H\right)}_{=\mathbf{0}} \dot{\mathbf{u}}^* + \left(\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\lambda}} H\right) \dot{\boldsymbol{\lambda}}^* \\ &= \frac{\partial}{\partial t} H - \left(\dot{\boldsymbol{\lambda}}^*\right)^{\mathrm{T}} \mathbf{f} + (\dot{\mathbf{x}}^*)^{\mathrm{T}} \dot{\boldsymbol{\lambda}}^* = \frac{\partial}{\partial t} H \ . \end{aligned} \tag{4.101}$$

Wenn daher weder $\mathbf{f}$ noch l explizit von der Zeit t abhängen, ist die Hamiltonfunktion H eine *Invariante* des Zweipunktrandwertproblems (4.100).

Im Weiteren muss ähnlich zur Legendre Bedingung gemäß Satz 4.3 für ein Minimum des Kostenfunktionals $J(\mathbf{u})$ die *notwendige Bedingung zweiter Ordnung*

$$\mathbf{d}^{\mathrm{T}} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{u}^2} H(t, \mathbf{x}^*(t), \mathbf{u}^*(t), \boldsymbol{\lambda}^*(t)) \mathbf{d} \geq 0 \qquad \forall\, \mathbf{d} \in \mathbb{R}^m,\ t \in [t_0, t_1] \ . \tag{4.102}$$

erfüllt sein. Sie wird auch *Legendre-Clebsch Bedingung* genannt.

In Satz 4.9 wurde angenommen, dass die optimale Stellgröße $\mathbf{u}^*$ stetig ist, d. h. $\mathbf{u}^*(t) \in (C[t_0, t_1])^m$. Für manche Beispiele findet man keine Lösung der Euler-Lagrange Gleichungen (4.88) in der Klasse der stetigen Stellgrößen. Aus diesem Grund sucht man Extremale in der erweiterten Klasse der stückweise stetigen Stellgrößen $(\hat{C}[t_0, t_1])^m$. Wie bereits im Abschnitt 4.2.2 diskutiert, sind für stückweise stetige Stellgrößen $\mathbf{u}(t)$ die zugehörigen Zustandsgrößen $\mathbf{x}(t)$ von (4.87) stückweise stetig differenzierbar, d. h. $\mathbf{x}(t) \in (\hat{C}^1[t_0, t_1])^n$, wobei die Eckpunkte mit den Unstetigkeitsstellen der Stellgrößen übereinstimmen. Bezeichnet man mit $\hat{\mathbf{u}}^*(t) \in (\hat{C}[t_0, t_1])^m$ die optimale Stellgröße und mit $\hat{\mathbf{x}}^*(t)$ und $\hat{\boldsymbol{\lambda}}^*(t)$ den zugehörigen Zustand und den adjungierten Zustand des Optimalsteuerungsproblems (4.86), (4.87), dann gelten für jeden Eckpunkt $c \in (t_0, t_1)$ die Bedingungen

$$\hat{\mathbf{x}}^*(c^-) = \hat{\mathbf{x}}^*(c^+) \tag{4.103a}$$

$$\hat{\boldsymbol{\lambda}}^*(c^-) = \hat{\boldsymbol{\lambda}}^*(c^+) \tag{4.103b}$$

$$H\left(c^-, \hat{\mathbf{x}}^*(c), \hat{\mathbf{u}}^*(c^-), \hat{\boldsymbol{\lambda}}^*(c)\right) = H\left(c^+, \hat{\mathbf{x}}^*(c), \hat{\mathbf{u}}^*(c^+), \hat{\boldsymbol{\lambda}}^*(c)\right) \ , \tag{4.103c}$$

wobei die Argumente c^- bzw. c^+ jeweils den links- bzw. rechtsseitigen Grenzwert liefern sollen. Man beachte, dass (4.103b) und (4.103c) den Weierstrass-Erdmann Bedingungen gemäß Satz 4.7 entsprechen.

Im Folgenden werden die notwendigen Bedingungen erster Ordnung für ein Optimalsteuerungsproblem mit freier Endzeit und allgemeinen Endbeschränkungen formuliert.

Satz 4.10 (Optimalsteuerungsproblem mit freier Endzeit und Endbeschränkungen)**.** *Gesucht ist die Stellgröße* $\mathbf{u} \in (C[t_0, t_1])^m$ *so, dass das Kostenfunktional (Bolza-Form)*

$$J(\mathbf{u}, t_1) = \varphi(t_1, \mathbf{x}(t_1)) + \int_{t_0}^{t_1} l(t, \mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t))\,\mathrm{d}t \tag{4.104}$$

unter den Gleichungsbeschränkungen

$$\dot{\mathbf{x}} - \mathbf{f}(t, \mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t)) = \mathbf{0}, \quad \mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}_0 \tag{4.105a}$$

$$G_k(\mathbf{u}, t_1) = \psi_k(t_1, \mathbf{x}(t_1)) = 0, \quad k = 1, \ldots, p \tag{4.105b}$$

mit fester Anfangszeit t_0 *und freier Endzeit* $t_1 \ll T$ *minimiert wird. Dabei wird angenommen, dass* l *und* $\mathbf{f}$ *stetig in* t, $\mathbf{x}$ *und* $\mathbf{u}$ *und stetig differenzierbar bezüglich* $\mathbf{x}$ *und* $\mathbf{u}$ *für alle* $(t, \mathbf{x}, \mathbf{u}) \in [t_0, T] \times \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m$ *sind und die Funktionen* φ *und* ψ_k, $k = 1, \ldots, p$ *stetig und stetig differenzierbar bezüglich* t_1 *und* $\mathbf{x}_1$ *für alle* $(t_1, \mathbf{x}_1) \in [t_0, T] \times \mathbb{R}^n$ *sind. Weiters sei* $(\mathbf{u}^*, t_1^*) \in (C[t_0, T])^m \times [t_0, T)$ *die optimale Lösung des Optimierungsproblems und* $\mathbf{x}^* \in (C^1[t_0, T])^n$ *die zugehörige Lösung des Anfangswertproblems* (4.105a)*. Darüber hinaus wird angenommen, dass für* p *linear unabhängige zulässige Richtungen* $\left(\boldsymbol{\xi}_{x,k}, \xi_{t_1,k}\right) \in (C[t_0, T])^m \times [t_0, T)$, $k = 1, \ldots, p$ *die* Regularitätsbedingung

$$\det\left(\begin{bmatrix} \delta G_1\left(\mathbf{u}^*, t_1^*; \boldsymbol{\xi}_{x,1}, \xi_{t_1,1}\right) & \cdots & \delta G_1\left(\mathbf{u}^*, t_1^*; \boldsymbol{\xi}_{x,p}, \xi_{t_1,p}\right) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \delta G_p\left(\mathbf{u}^*, t_1^*; \boldsymbol{\xi}_{x,1}, \xi_{t_1,1}\right) & \cdots & \delta G_p\left(\mathbf{u}^*, t_1^*; \boldsymbol{\xi}_{x,p}, \xi_{t_1,p}\right) \end{bmatrix}\right) \neq 0 \tag{4.106}$$

gilt. Dann existieren ein $\boldsymbol{\lambda}^* \in (C^1[t_0, t_1^*])^n$ *und ein* $\boldsymbol{\mu}^* \in \mathbb{R}^p$ *so, dass die Beziehungen*

$$\dot{\mathbf{x}}^* = \left(\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\lambda}} H\right)^{\mathrm{T}}(t, \mathbf{x}^*(t), \mathbf{u}^*(t), \boldsymbol{\lambda}^*(t)), \qquad \mathbf{x}^*(t_0) = \mathbf{x}_0 \tag{4.107a}$$

$$\begin{aligned} \dot{\boldsymbol{\lambda}}^* &= -\left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} H\right)^{\mathrm{T}}(t, \mathbf{x}^*(t), \mathbf{u}^*(t), \boldsymbol{\lambda}^*(t)) \\ \boldsymbol{\lambda}^*(t_1^*) &= \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_1} \Phi\right)^{\mathrm{T}}(t_1^*, \mathbf{x}^*(t_1^*), \boldsymbol{\mu}^*) \end{aligned} \tag{4.107b}$$

$$\mathbf{0} = \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} H\right)^{\mathrm{T}}(t, \mathbf{x}^*(t), \mathbf{u}^*(t), \boldsymbol{\lambda}^*(t)) \tag{4.107c}$$

für $t_0 \leq t \leq t_1$ *mit den* Transversalitätsbedingungen

$$\boldsymbol{\psi}(t_1^*, \mathbf{x}^*(t_1^*)) = \mathbf{0} \tag{4.108a}$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t_1}\Phi\right)(t_1^*, \mathbf{x}^*(t_1^*), \boldsymbol{\mu}^*) + H(t_1^*, \mathbf{x}^*(t_1^*), \mathbf{u}^*(t_1^*), \boldsymbol{\lambda}^*(t_1^*)) = 0 \ , \tag{4.108b}$$

und der Hamiltonfunktion $H = l + \boldsymbol{\lambda}^{\mathrm{T}}\mathbf{f}$ *sowie* $\Phi = \varphi + \boldsymbol{\mu}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\psi}$ *mit* $\boldsymbol{\psi}^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix}\psi_1 & \psi_2 & \dots & \psi_p\end{bmatrix}$ *erfüllt sind.*

Beweisskizze: Für das Kostenfunktional (4.104) mit den Gleichungsbeschränkungen (4.105) wird das *Lagrangefunktional*

$$\begin{aligned} &L(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t_1, \boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu}) \\ &\quad = J(\mathbf{u}, t_1) + \boldsymbol{\mu}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\psi}(t_1, \mathbf{x}(t_1)) + \int_{t_0}^{t_1} \boldsymbol{\lambda}^{\mathrm{T}}(t)(\mathbf{f}(t, \mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t)) - \dot{\mathbf{x}}(t))\,\mathrm{d}t \\ &\quad = \varphi(t_1, \mathbf{x}(t_1)) + \boldsymbol{\mu}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\psi}(t_1, \mathbf{x}(t_1)) \\ &\qquad + \int_{t_0}^{t_1} l(t, \mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t)) + \boldsymbol{\lambda}^{\mathrm{T}}(t)(\mathbf{f}(t, \mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t)) - \dot{\mathbf{x}}(t))\,\mathrm{d}t \end{aligned} \tag{4.109}$$

formuliert. Die Gâteaux Ableitung $\delta J(\mathbf{u}, t_1; \boldsymbol{\xi}_u, \xi_{t_1})$ an einem allgemeinen Punkt $(\mathbf{u}, t_1) \in (C[t_0, T])^m \times [t_0, T)$ bezüglich $(\boldsymbol{\xi}_u(t), \xi_{t_1}) \in (C[t_0, T])^m \times [t_0, T)$ lautet

$$\delta J(\mathbf{u}, t_1; \boldsymbol{\xi}_u, \xi_{t_1}) = \delta_{\mathbf{u}} L(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t_1, \boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu}; \boldsymbol{\xi}_u) + \delta_{t_1} L(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t_1, \boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu}; \xi_{t_1}) \tag{4.110a}$$

mit

$$\begin{aligned} &\delta_{\mathbf{u}} L(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t_1, \boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu}; \boldsymbol{\xi}_u) \\ &\quad = \int_{t_0}^{t_1} \left[\frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} l(t, \mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t)) + \boldsymbol{\lambda}^{\mathrm{T}}(t)\frac{\partial}{\partial \mathbf{u}}\mathbf{f}(t, \mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t))\right]\boldsymbol{\xi}_u(t)\,\mathrm{d}t \end{aligned} \tag{4.110b}$$

$$\begin{aligned} &\delta_{t_1} L(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t_1, \boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu}; \xi_{t_1}) \\ &\quad = \Bigg[\frac{\partial}{\partial t_1}\varphi(t_1, \mathbf{x}(t_1)) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_1}\varphi(t_1, \mathbf{x}(t_1))\dot{\mathbf{x}}(t_1) \\ &\qquad + \boldsymbol{\mu}^{\mathrm{T}}\left(\frac{\partial}{\partial t_1}\boldsymbol{\psi}(t_1, \mathbf{x}(t_1)) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_1}\boldsymbol{\psi}(t_1, \mathbf{x}(t_1))\dot{\mathbf{x}}(t_1)\right) \\ &\qquad + l(t_1, \mathbf{x}(t_1), \mathbf{u}(t_1)) + \boldsymbol{\lambda}^{\mathrm{T}}(t_1)(\mathbf{f}(t_1, \mathbf{x}(t_1), \mathbf{u}(t_1)) - \dot{\mathbf{x}}(t_1))\Bigg]\xi_{t_1} \ , \end{aligned} \tag{4.110c}$$

wobei die Bedingungen

$$\begin{aligned}\mathbf{0} &= \delta_{\mathbf{x}} L(\mathbf{x},\mathbf{u},t_1,\boldsymbol{\lambda},\boldsymbol{\mu};\boldsymbol{\xi}_x)\\ &= \frac{\partial}{\partial \mathbf{x_1}}\varphi(t_1,\mathbf{x}(t_1))\boldsymbol{\xi}_x(t_1) + \boldsymbol{\mu}^{\mathrm{T}}\frac{\partial}{\partial \mathbf{x_1}}\boldsymbol{\psi}(t_1,\mathbf{x}(t_1))\boldsymbol{\xi}_x(t_1)\\ &\quad + \int_{t_0}^{t_1}\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} l(t,\mathbf{x}(t),\mathbf{u}(t))\boldsymbol{\xi}_x(t) + \boldsymbol{\lambda}^{\mathrm{T}}(t)\left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}\mathbf{f}(t,\mathbf{x}(t),\mathbf{u}(t))\boldsymbol{\xi}_x(t) - \dot{\boldsymbol{\xi}}_x(t)\right)\mathrm{d}t\\ &= \left[\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_1}\varphi(\mathbf{x}(t_1)) + \boldsymbol{\mu}^{\mathrm{T}}\frac{\partial}{\partial \mathbf{x_1}}\boldsymbol{\psi}(t_1,\mathbf{x}(t_1)) - \boldsymbol{\lambda}^{\mathrm{T}}(t_1)\right]\boldsymbol{\xi}_x(t_1) + \boldsymbol{\lambda}^{\mathrm{T}}(t_0)\boldsymbol{\xi}_x(t_0)\\ &\quad + \int_{t_0}^{t_1}\left[\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} l(t,\mathbf{x}(t),\mathbf{u}(t)) + \boldsymbol{\lambda}^{\mathrm{T}}(t)\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}\mathbf{f}(t,\mathbf{x}(t),\mathbf{u}(t)) + \dot{\boldsymbol{\lambda}}^{\mathrm{T}}(t)\right]\boldsymbol{\xi}_x(t)\,\mathrm{d}t\end{aligned} \tag{4.110d}$$

$$\mathbf{0} = \delta_{\boldsymbol{\lambda}} L(\mathbf{x},\mathbf{u},\boldsymbol{\lambda},\boldsymbol{\mu};\boldsymbol{\xi}_\lambda) = \int_{t_0}^{t_1}\boldsymbol{\xi}_\lambda^{\mathrm{T}}(t)[\mathbf{f}(t,\mathbf{x}(t),\mathbf{u}(t)) - \dot{\mathbf{x}}(t)]\,\mathrm{d}t \tag{4.110e}$$

$$\mathbf{0} = \left(\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\mu}} L\right)^{\mathrm{T}}(\mathbf{x},\mathbf{u},t_1,\boldsymbol{\lambda},\boldsymbol{\mu}) = \boldsymbol{\psi}(t_1,\mathbf{x}(t_1)) \tag{4.110f}$$

für alle zulässigen Richtungen $\boldsymbol{\xi}_x(t) \in (C^1[t_0,T])^n$ mit $\boldsymbol{\xi}_x(t_0) = \mathbf{0}$ zufolge der Anfangsbedingung $\mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}_0$ und für alle zulässigen Richtungen $\boldsymbol{\xi}_\lambda(t) \in (C^1[t_0,T])^n$ einzuhalten sind. Gemäß Fundamentallemma der Variationsrechnung Lemma 4.2 folgt aus (4.110d)

$$\dot{\boldsymbol{\lambda}} = -\left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} l\right)^{\mathrm{T}}(t,\mathbf{x}(t),\mathbf{u}(t)) - \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}\mathbf{f}\right)^{\mathrm{T}}(t,\mathbf{x}(t),\mathbf{u}(t))\boldsymbol{\lambda}(t) \tag{4.111a}$$

$$\boldsymbol{\lambda}(t_1) = \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\mathbf{x}_1}\varphi\right)^{\mathrm{T}}(\mathbf{x}(t_1)) + \boldsymbol{\mu}^{\mathrm{T}}\frac{\partial}{\partial \mathbf{x_1}}\boldsymbol{\psi}(t_1,\mathbf{x}(t_1)) \tag{4.111b}$$

und aus (4.110e) die Differenzialgleichung (4.105a). Wegen (4.111b) vereinfacht sich (4.110c) zu

$$\begin{aligned}&\delta_{t_1} L(\mathbf{x},\mathbf{u},t_1,\boldsymbol{\lambda},\boldsymbol{\mu};\xi_{t_1})\\ &\qquad = \left[\frac{\partial}{\partial t_1}\varphi(t_1,\mathbf{x}(t_1)) + \boldsymbol{\mu}^{\mathrm{T}}\frac{\partial}{\partial t_1}\boldsymbol{\psi}(t_1,\mathbf{x}(t_1))\right.\\ &\qquad\quad \left. + l(t_1,\mathbf{x}(t_1),\mathbf{u}(t_1)) + \boldsymbol{\lambda}^{\mathrm{T}}(t_1)\mathbf{f}(t_1,\mathbf{x}(t_1),\mathbf{u}(t_1))\right]\xi_{t_1}\ .\end{aligned} \tag{4.112}$$

Da am optimalen Punkt $(\mathbf{u}^*,t_1^*) \in (C[t_0,T])^m \times [t_0,T)$ gemäß Satz 4.1 die Bedingung $\delta J(\mathbf{u},t_1;\boldsymbol{\xi}_u,\xi_{t_1}) = 0$ für alle zulässigen Richtungen $(\boldsymbol{\xi}_u,\xi_{t_1}) \in (C[t_0,T])^m \times [t_0,T)$ erfüllt sein muss, folgen aus (4.110a), (4.110b), (4.110f), (4.111), (4.112) und (4.105a) unter Verwendung von Lemma 4.2 genau die Optimalitätsbedingungen (4.107) und (4.108) von Satz 4.10.

Für den Beweis der Notwendigkeit der Regularitätsbedingung (4.106) wird auf [4.1] verwiesen. Diese Regularitätsbedingung sichert die Existenz einer Lösung $\mathbf{u}(t)$, so

dass der zugehörige Endzustand $\mathbf{x}(t_1)$ die Gleichungsbeschränkung (4.105b) erfüllt. □

Aufgabe 4.3. Beweisen Sie Satz 4.10 ohne Verwendung des Lagrangefunktionals (4.109). **Hinweis:** Orientieren Sie sich dabei am Beweis von Satz 4.9.

Zur Berechnung der $m + 2n + p + 1$ *unbekannten Größen* $(\mathbf{u}^*(t), \mathbf{x}^*(t), \boldsymbol{\lambda}^*(t), \boldsymbol{\mu}^*, t_1^*)$ stehen mit Satz 4.10 $m + 2n + p + 1$ *Bedingungen* zur Verfügung. Das sind m algebraische Gleichungen (4.107c), $p + 1$ algebraische Gleichungen in Form der Transversalitätsbedingungen (4.108) und $2n$ Differentialgleichungen (4.107a) und (4.107b) für $\mathbf{x}^*$ und $\boldsymbol{\lambda}^*$. Zu diesen Differentialgleichungen gehören die in (4.107a) und (4.107b) angegebenen $2n$ Randbedingungen. Aus den genannten Gleichungen lassen sich eindeutig die unbekannten Größen $(\mathbf{u}^*(t), \mathbf{x}^*(t), \boldsymbol{\lambda}^*(t), \boldsymbol{\mu}^*, t_1^*)$ bestimmen.

Für eine Zusammenfassung der Ergebnisse von Satz 4.10 werden in weiterer Folge nur sogenannte partielle Endbedingungen der Form

$$\psi_j = x_k(t_1) - \overline{x}_k, \quad j = 1, \dots, p \tag{4.113}$$

mit $\overline{x}_k = \text{konst.}$ als fixem Endwert der Komponente $x_k(t)$ von $\mathbf{x}(t)$ betrachtet. Für diesen Spezialfall kann die Endbedingung für $\boldsymbol{\lambda}^*(t_1^*)$ in (4.107b) ersetzt werden und unter Berücksichtigung von (4.110d) und (4.112) gilt Folgendes:

(a) Wenn die *Endzeit* t_1 *fest ist* und damit $\xi_{t_1} = 0$ gilt, wird (4.112) automatisch erfüllt. Es liegt somit keine Transversalitätsbedingung gemäß (4.108b) vor.

(i) Wenn für eine Komponente $x_k(t)$ von $\mathbf{x}(t)$ gilt, dass *deren Endwert fest ist*, so folgt daraus $\xi_{x,k}(t_1) = 0$, womit automatisch der zugehörige Summand in der vorletzten Zeile von (4.110d) verschwindet. Damit liegt für diese Komponente keine Endbedingung für den zugehörigen adjungierten Zustand $\lambda_k^*(t_1)$ in (4.111b) vor.

(ii) Wenn für eine Komponente $x_k(t)$ von $\mathbf{x}(t)$ gilt, dass *deren Endwert frei ist*, so folgt daraus die Zulässigkeit von $\xi_{x,k}(t_1) \neq 0$. Aus dem zugehörigen Summanden in der vorletzten Zeile von (4.110d) ergibt sich daher, dass die Komponente des zugehörigen adjungierten Zustands $\lambda_k^*(t_1)$ die Endbedingung

$$\lambda_k^*(t_1) = \frac{\partial}{\partial x_{1,k}} \varphi(t_1, \mathbf{x}^*(t_1)) \tag{4.114}$$

erfüllen muss.

(b) Wenn *die Endzeit frei ist*, muss die Transversalitätsbedingung

$$\frac{\partial}{\partial t_1} \Phi(t_1^*, \mathbf{x}^*(t_1^*), \boldsymbol{\mu}^*) + H(t_1^*, \mathbf{x}^*(t_1^*), \mathbf{u}^*(t_1^*), \boldsymbol{\lambda}^*(t_1^*)) = 0, \quad H = l + \boldsymbol{\lambda}^{\mathrm{T}} \mathbf{f} \tag{4.115}$$

gelten. In Abhängigkeit davon, ob der Endwert einer Komponente $x_k(t)$ von $\mathbf{x}(t)$ fest oder frei ist, können die Unterpunkte (i) und (ii) vom Fall (a) auch direkt hier angewandt werden.

Wenn in Satz 4.10 die Gleichungsbeschränkungen (4.105b) durch *Ungleichungsbeschränkungen* der Form

$$\psi_k(t_1, \mathbf{x}(t_1)) \leq 0, \quad k = 1, \dots, p \tag{4.116}$$

ersetzt werden, so ändert sich lediglich (4.108a) zu

$$\psi_k(t_1^*, \mathbf{x}^*(t_1^*)) \leq 0 \tag{4.117a}$$
$$\boldsymbol{\mu}^* \geq \mathbf{0} \tag{4.117b}$$
$$(\boldsymbol{\mu}^*)^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\psi}(t_1^*, \mathbf{x}^*(t_1^*)) = 0\ , \tag{4.117c}$$

wobei (4.117c) auch als *complementary slackness condition* bezeichnet wird.

Aufgabe 4.4. Gesucht ist eine Lösung des Optimierungsproblems

$$\min_{u(\cdot)} \quad \int_0^1 \frac{1}{2} u^2 + \frac{a}{2} x^2 \ \mathrm{d}t, \quad a > 0 \tag{4.118a}$$
$$\text{u.B.v.} \quad \dot{x} = u, \quad x(0) = 1, \quad x(1) = 0\,. \tag{4.118b}$$

Zeigen Sie, dass die Lösung durch

$$x^*(t) = \frac{1}{1 - \mathrm{e}^{2\sqrt{a}}} \left(\mathrm{e}^{\sqrt{a}t} - \mathrm{e}^{\sqrt{a}(2-t)} \right), \quad u^*(t) = \frac{\sqrt{a}}{1 - \mathrm{e}^{2\sqrt{a}}} \left(\mathrm{e}^{\sqrt{a}t} + \mathrm{e}^{\sqrt{a}(2-t)} \right) \tag{4.119}$$

gegeben ist und interpretieren Sie die Ergebnisse, die in Abbildung 4.4 für verschiedene Parameterwerte a dargestellt sind.

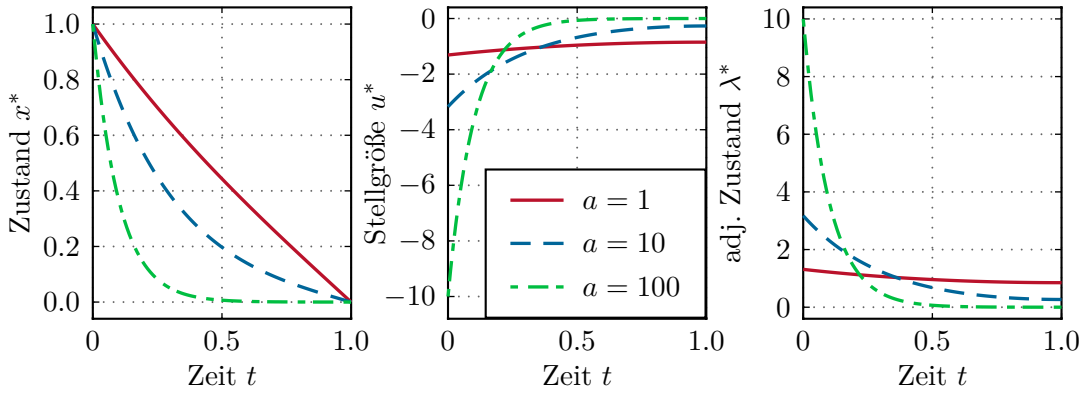


Abbildung 4.4: Optimale Trajektorien in Aufgabe 4.4.

Aufgabe 4.5. Gesucht ist eine Lösung des Optimierungsproblems

$$\min_{u(\cdot)} \quad \frac{a}{2} x_2^2(1) + \int_0^1 \frac{1}{2} u^2 \ \mathrm{d}t, \quad a \geq 0 \tag{4.120a}$$
$$\text{u.B.v.} \quad \dot{x}_1 = x_2, \quad x_1(0) = 1, \quad x_1(1) = 0 \tag{4.120b}$$
$$\dot{x}_2 = u, \quad x_2(0) = 0. \tag{4.120c}$$

Zeigen Sie, dass sich für den (freien) Endzustand $x_2^*(1) = -6/(4+a)$ in Abhängigkeit des Parameters $a \geq 0$ ergibt und dass die optimale Lösung durch

$$x_1^*(t) = \frac{2(1+a)}{4+a}\, t^3 - \frac{3(2+a)}{a+4}\, t^2 + 1, \quad u^*(t) = \frac{12(1+a)}{4+a}\, t - \frac{6(2+a)}{a+4} \tag{4.121}$$

gegeben ist. Interpretieren Sie die Ergebnisse in Abbildung 4.5.

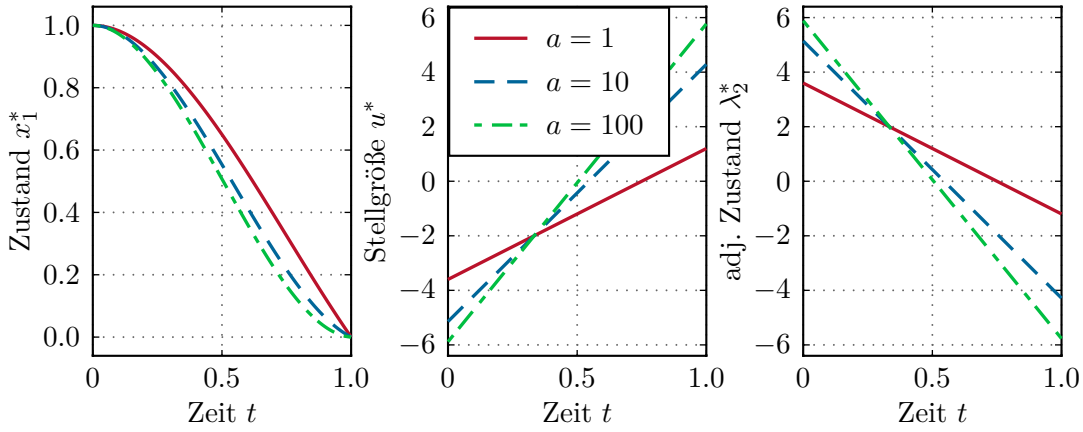


Abbildung 4.5: Optimale Trajektorien in Aufgabe 4.5.

Beispiel 4.10. Betrachtet wird eine Punktmasse mit der Masse m in der (x, y)-Ebene, auf die eine konstante Kraft $F = ma$ wirkt. Die Stellgröße u des Problems ist der Winkel zwischen der Schubrichtung und der x-Achse, siehe Abbildung 4.6. Ziel ist es, die Punktmasse in *minimaler Zeit* $[t_0 = 0, t_1^*]$ zu einem *fest vorgegebenen Zielpunkt* $(\bar{x}_1, \bar{y}_1)$ zu steuern. Unter der Annahme, dass außer dem Schub keine weiteren Kräfte auftreten, kann das Optimalsteuerungsproblem wie folgt formuliert werden

$$\min_{u(\cdot)} \quad t_1 \tag{4.122a}$$

$$\text{u.B.v.} \quad \dot{x} = v\,, \qquad x(0) = x_0\,, \quad x(t_1) = \bar{x}_1 \tag{4.122b}$$

$$\dot{v} = a\cos(u)\,, \quad v(0) = v_0 \tag{4.122c}$$

$$\dot{y} = w\,, \qquad y(0) = y_0\,, \quad y(t_1) = \bar{y}_1 \tag{4.122d}$$

$$\dot{w} = a\sin(u)\,, \quad w(0) = w_0\,. \tag{4.122e}$$

Man beachte, dass der Endzustand nur für die Position (x, y) aber nicht für die Geschwindigkeiten (v, w) vorgegeben ist.

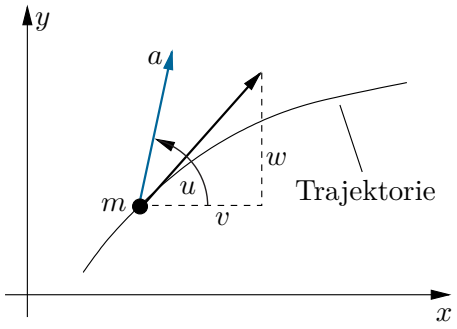


Abbildung 4.6: Bewegung einer Punktmasse der Masse m in der (x, y)-Ebene.

Die beiden fest vorgegebenen Endwerte für x und y können als Gleichungsbeschränkungen gemäß (4.105b) in der Form

$$\psi_1(t_1, \mathbf{x}(t_1)) = x(t_1) - \bar{x}_1, \quad \psi_2(t_1, \mathbf{x}(t_1)) = y(t_1) - \bar{y}_1 \tag{4.123}$$

formuliert werden. Die Hamiltonfunktion H und die Funktion Φ gemäß Satz 4.10 lauten dann für das vorliegende Optimierungsproblem

$$H(\mathbf{x}, u, \boldsymbol{\lambda}) = \lambda_x v + \lambda_v a\cos(u) + \lambda_y w + \lambda_w a\sin(u) \tag{4.124a}$$
$$\Phi(t_1, \mathbf{x}(t_1), \boldsymbol{\mu}) = \varphi + \mu_x\psi_1 + \mu_y\psi_2 = t_1 + \mu_x(x(t_1) - \bar{x}_1) + \mu_y(y(t_1) - \bar{y}_1) \tag{4.124b}$$

mit $\mathbf{x} = [x \quad v \quad y \quad w]^{\mathrm{T}}$, dem adjungierten Zustand $\boldsymbol{\lambda} = [\lambda_x \quad \lambda_v \quad \lambda_y \quad \lambda_w]^{\mathrm{T}}$ und dem *konstanten Lagrange-Multiplikator* $\boldsymbol{\mu} = [\mu_x \quad \mu_y]^{\mathrm{T}}$. Die Randbedingungen für den adjungierten Zustand errechnen sich gemäß (4.107b) zu

$$\lambda_x^*(t_1^*) = \left(\frac{\partial}{\partial x_1}\Phi\right)(t_1^*, \mathbf{x}^*(t_1^*), \boldsymbol{\mu}^*) = \mu_x^*, \quad \lambda_v^*(t_1^*) = \left(\frac{\partial}{\partial v_1}\Phi\right)(t_1^*, \mathbf{x}^*(t_1^*), \boldsymbol{\mu}^*) = 0 \tag{4.125a}$$

$$\lambda_y^*(t_1^*) = \left(\frac{\partial}{\partial y_1}\Phi\right)(t_1^*, \mathbf{x}^*(t_1^*), \boldsymbol{\mu}^*) = \mu_y^*, \quad \lambda_w^*(t_1^*) = \left(\frac{\partial}{\partial w_1}\Phi\right)(t_1^*, \mathbf{x}^*(t_1^*), \boldsymbol{\mu}^*) = 0\ . \tag{4.125b}$$

Damit lautet das adjungierte System

$$\dot{\lambda}_x^* = -\left(\frac{\partial H}{\partial x}\right)(\mathbf{x}^*, \mathbf{u}^*, \boldsymbol{\lambda}^*) = 0\,, \qquad \lambda_x^*(t_1^*) = \mu_x^* \tag{4.126a}$$
$$\dot{\lambda}_v^* = -\left(\frac{\partial H}{\partial v}\right)(\mathbf{x}^*, \mathbf{u}^*, \boldsymbol{\lambda}^*) = -\lambda_x^*\,, \quad \lambda_v^*(t_1^*) = 0 \tag{4.126b}$$
$$\dot{\lambda}_y^* = -\left(\frac{\partial H}{\partial y}\right)(\mathbf{x}^*, \mathbf{u}^*, \boldsymbol{\lambda}^*) = 0\,, \qquad \lambda_y^*(t_1^*) = \mu_y^* \tag{4.126c}$$
$$\dot{\lambda}_w^* = -\left(\frac{\partial H}{\partial w}\right)(\mathbf{x}^*, \mathbf{u}^*, \boldsymbol{\lambda}^*) = -\lambda_y^*\,, \quad \lambda_w^*(t_1^*) = 0\,, \tag{4.126d}$$

woraus direkt

$$\lambda_x^* = \mu_x^*\,, \quad \lambda_v^* = \mu_x^*(t_1^* - t)\,, \quad \lambda_y^* = \mu_y^*\,, \quad \lambda_w^* = \mu_y^*(t_1^* - t) \tag{4.127}$$

folgt. Des Weiteren muss die Hamiltonfunktion H gemäß (4.107) extremal sein, weshalb die Bedingung

$$\left(\frac{\partial H}{\partial u}\right)(\mathbf{x}^*, \mathbf{u}^*, \boldsymbol{\lambda}^*) = -\lambda_v^* a \sin(u^*) + \lambda_w^* a \cos(u^*) = 0\,, \tag{4.128}$$

erfüllt sein muss und u^* sich in der Form

$$\begin{aligned} \tan(u^*) = \frac{\lambda_w^*}{\lambda_v^*} &\overset{(4.127)}{=} \frac{\mu_y^*(t_1^* - t)}{\mu_x^*(t_1^* - t)} = \frac{\mu_y^*}{\mu_x^*} = \text{konst.} \\ \Rightarrow \quad u^* &= \arctan\left(\frac{\mu_y^*}{\mu_x^*}\right) \quad \text{mit} \quad -\frac{\pi}{2} < u^* < \frac{\pi}{2} \end{aligned} \tag{4.129}$$

berechnen lässt. Die optimale Steuerung u^* ist also auf dem gesamten Zeitintervall $[t_0, t_1^*]$ konstant und die zugehörigen optimalen Zustandstrajektorien $\mathbf{x}^*(t)$ können durch Lösen der Differentialgleichungen (4.122) und Einsetzen der Anfangsbedingungen in der Form

$$x^*(t) = g_x(\mu_x^*, \mu_y^*, t) = x_0 + v_0 t + \frac{1}{2} a \cos(u^*) t^2\,, \quad \cos(u^*) = \frac{1}{\sqrt{1 + (\mu_y^*/\mu_x^*)^2}} \tag{4.130a}$$

$$v^*(t) = g_v(\mu_x^*, \mu_y^*, t) = v_0 + a \cos(u^*) t \tag{4.130b}$$

$$y^*(t) = g_y(\mu_x^*, \mu_y^*, t) = y_0 + w_0 t + \frac{1}{2} a \sin(u^*) t^2\,, \quad \sin(u^*) = \frac{\mu_y^*}{\mu_x^* \sqrt{1 + (\mu_y^*/\mu_x^*)^2}} \tag{4.130c}$$

$$w^*(t) = g_w(\mu_x^*, \mu_y^*, t) = w_0 + a \sin(u^*) t\,. \tag{4.130d}$$

bestimmt werden. Dabei wurden die trigonometrischen Beziehungen

$$\sin(\arctan(b)) = \frac{b}{\sqrt{1 + b^2}}, \quad \cos(\arctan(b)) = \frac{1}{\sqrt{1 + b^2}} \tag{4.131}$$

verwendet. Da die Endzeit t_1 frei ist, muss zusätzlich die Transversalitätsbedingung (4.108b) gelten, wobei sich die Hamiltonfunktion (4.124a) aufgrund der Endbedingungen $\lambda_v^*(t_1^*) = \lambda_w^*(t_1^*) = 0$ entsprechend vereinfacht

$$\begin{aligned} 0 &= \left(\frac{\partial}{\partial t_1}\Phi\right)(t_1^*, \mathbf{x}^*(t_1^*), \boldsymbol{\mu}^*) + H(\mathbf{x}^*(t_1^*), \mathbf{u}^*(t_1^*), \boldsymbol{\lambda}^*(t_1^*)) \\ &= 1 + \mu_x^*\, g_v(\mu_x^*, \mu_y^*, t_1^*) + \mu_y^*\, g_w(\mu_x^*, \mu_y^*, t_1^*)\,. \end{aligned} \tag{4.132}$$

Mit Hilfe der zwei Gleichungsbeschränkungen (4.123) und der Transversalitätsbedingung (4.132) lässt sich ein Gleichungssystem für die verbleibenden drei Unbekannten

μ_x^*, μ_y^* und t_1^* in der Form

$$\begin{bmatrix} g_x(\mu_x^*, \mu_y^*, t_1^*) \\ g_y(\mu_x^*, \mu_y^*, t_1^*) \\ \mu_x^* \, g_v(\mu_x^*, \mu_y^*, t_1^*) + \mu_y^* \, g_w(\mu_x^*, \mu_y^*, t_1^*) \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \bar{x}_1 \\ \bar{y}_1 \\ -1 \end{bmatrix} = \mathbf{0} \tag{4.133}$$

formulieren, welches auf *numerischem Wege* gelöst werden kann. Eine geeignete MATLAB-Funktion zur Lösung von nichtlinearen Gleichungen ist mit dem Befehl *fsolve* aus der Optimization Toolbox gegeben. Die Funktion fsolve verwendet standardmäßig die Methode der Vertrauensbereiche (siehe Abschnitt 2.4), um ein Gleichungssystem in Residuenform $\mathbf{F}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ als Minimierungsproblem in $\mathbf{x}$ zu lösen. Als Beispiel ist in der Code-Auflistung 4.1 der MATLAB-Code dargestellt, wie fsolve zur Lösung von (4.133) verwendet werden kann. Der gewünschte Endpunkt $(\bar{x}_1, \bar{y}_1)$ wird beim Aufruf der Funktion punktmasse(x1,y1) übergeben, wobei angenommen wird, dass die Punktmasse am Punkt $(x_0, y_0) = (0, 0)$ mit der Geschwindigkeit $(v_0, w_0) = (0, 1)$ in vertikale Richtung startet. Abbildung 4.7 stellt die optimalen Bahnen $x^*(t)$, $y^*(t)$ der Punktmasse in der (x, y)-Ebene für verschiedene Endpunkte $(\bar{x}_1, \bar{y}_1)$ dar. Die Pfeile zeigen die (jeweils konstante) Richtung $u^* = \arctan(\mu_y^*/\mu_x^*)$ der angreifenden Kraft ma an.

Listing 4.1: MATLAB-Code für das Punktmasse-Problem unter Verwendung von fsolve.

```
function [t,x,y,p] = punktmasse(x1,y1)
% ------------------------------------------------
% (x1,y1): gewünschter Endpunkt
% (t,x,y): Trajektorien der Punktmasse
% p:      Parameterstruktur

p.a = 1;                                    % Parameter
p.x0=0; p.v0=0; p.y0=0; p.w0=1;             % Anfangsbedingungen
p.x1=x1; p.y1=y1;                           % Endbedingungen (Übergabe aus Funktionsaufruf)

opt  = optimoptions('fsolve','Display','iter'); % Optionen
X0   = [-1,0,1];                            % Startwert
Xopt = fsolve(@eqns,X0,opt,p);              % Numerische Lösung mit fsolve
p.mux=Xopt(1); p.muy=Xopt(2); p.t1=Xopt(3); % Lösung

t = linspace(0,p.t1,100);                   % Trajektorien
x = xfct(p.mux,p.muy,t,p);
y = yfct(p.mux,p.muy,t,p);
% ------------------------------------------------
function res = eqns(X,p)                    % Gleichungen in Residuenform
mux=X(1); muy=X(2); t1=X(3);
res = [ xfct(mux,muy,t1,p) - p.x1;
        yfct(mux,muy,t1,p) - p.y1;
        mux*vfct(mux,muy,t1,p) + muy*wfct(mux,muy,t1,p) + 1 ];
% ------------------------------------------------
function x = xfct(mux,muy,t,p)              % Funktionen für x und v
cosu = 1/sqrt(1+(muy/mux)^2);
x = p.x0 + p.v0*t + p.a/2*cosu*t.^2;        % 't.^2' steht für komponentenweise Auswertung
function v = vfct(mux,muy,t,p)
cosu = 1/sqrt(1+(muy/mux)^2);
v = p.v0 + p.a*cosu*t;
% ------------------------------------------------
```

```
function y = yfct(mux,muy,t,p)              % Funktionen für y und w
sinu = muy/(mux*sqrt(1+(muy/mux)^2));
y = p.y0 + p.w0*t + p.a/2*sinu*t.^2;        % 't.^2' steht für komponentenweise Auswertung
function w = wfct(mux,muy,t,p)
sinu = muy/(mux*sqrt(1+(muy/mux)^2));
w = p.w0 + p.a*sinu*t;
```

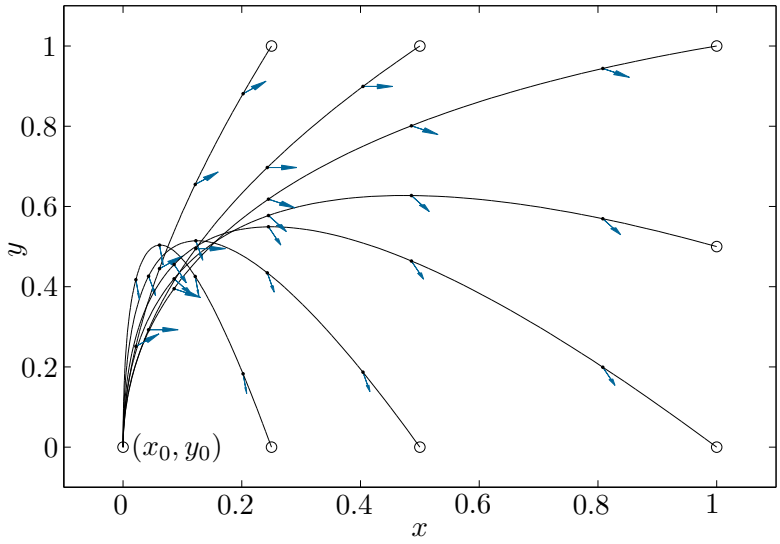


Abbildung 4.7: Zeitoptimale Steuerung einer Punktmasse zu verschiedenen Endpunkten.

Aufgabe 4.6. Gegeben ist ein lineares zeitvariantes Mehrgrößensystem der Form

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{A}(t)\mathbf{x} + \mathbf{B}(t)\mathbf{u}, \quad \mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}_0 \tag{4.134}$$

mit dem Zustand $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ und dem Stelleingang $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^m$. Zeigen Sie, dass das *zeitvariante Zustandsregelgesetz*

$$\mathbf{u}^*(t) = -\mathbf{R}^{-1}(t)\mathbf{B}^{\mathrm{T}}(t)\mathbf{S}(t)\mathbf{x}^*(t) \tag{4.135}$$

mit $\mathbf{S}(t)$ als Lösung der *Matrix-Riccati-Differentialgleichung*

$$\dot{\mathbf{S}} = -\mathbf{S}\mathbf{A} - \mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{S} + \mathbf{S}\mathbf{B}\mathbf{R}^{-1}\mathbf{B}^{\mathrm{T}}\mathbf{S} - \mathbf{Q}, \quad \mathbf{S}(t_1) = \mathbf{S}_1, \quad t_0 \le t \le t_1 \tag{4.136}$$

das Kostenfunktional

$$J(\mathbf{u}) = \frac{1}{2}\int_{t_0}^{t_1} \mathbf{x}^{\mathrm{T}}(t)\mathbf{Q}(t)\mathbf{x}(t) + \mathbf{u}^{\mathrm{T}}(t)\mathbf{R}(t)\mathbf{u}(t)\,\mathrm{d}t + \frac{1}{2}\mathbf{x}^{\mathrm{T}}(t_1)\mathbf{S}_1\mathbf{x}(t_1) \tag{4.137}$$

mit der für alle Zeiten $t_0 \le t \le t_1$ positiv definiten Matrix $\mathbf{R}(t)$, der für alle Zeiten $t_0 \le t \le t_1$ positiv semidefiniten Matrix $\mathbf{Q}(t)$ und der positiv semidefiniten Matrix

$\mathbf{S}_1$ minimiert. Dieses Problem ist auch unter dem Namen *LQR (Linear Quadratic Regulator) Problem* bekannt.

4.2.4 Minimumsprinzip von Pontryagin

Für das Weitere betrachte man im ersten Schritt die Minimierung des Kostenfunktionals

$$J(\mathbf{u}) = \int_{t_0}^{t_1} l(\mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t))\,\mathrm{d}t \tag{4.138}$$

mit der freien Endzeit t_1 und einem festen Endzustand $\mathbf{x}(t_1) = \mathbf{x}_1$ unter der Gleichungsbeschränkung des dynamischen Systems

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(\mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t)), \quad \mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}_0 \tag{4.139}$$

für die zulässigen Stellgrößen

$$\mathbf{u} \in \left(\hat{C}_U[t_0, T]\right)^m := \left\{ \mathbf{u} \in \left(\hat{C}[t_0, T]\right)^m \,\middle|\, \mathbf{u}(t) \in U,\, \forall t_0 \le t \le T \right\} \tag{4.140}$$

mit einer hinreichend großen Zeit $T \gg t_1$ und der nichtleeren Menge der Stellgrößenbeschränkungen U.

Man kann nun das Optimierungsproblem bestehend aus (4.138) und (4.139) durch Erweiterung des Zustandsvektors in der Form $\bar{\mathbf{x}}^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} \mathbf{x}^{\mathrm{T}} & x_{n+1} \end{bmatrix}$ mit

$$x_{n+1}(t) := \int_{t_0}^{t} l(\mathbf{x}(\tau), \mathbf{u}(\tau))\,\mathrm{d}\tau \tag{4.141}$$

wie folgt umformulieren: Gesucht wird eine zulässige Stellgröße $\mathbf{u}(t) \in (\hat{C}_U[t_0, T])^m$ und eine Endzeit t_1 so, dass die Lösung des erweiterten Systems

$$\underbrace{\begin{bmatrix} \dot{\mathbf{x}} \\ \dot{x}_{n+1} \end{bmatrix}}_{\dot{\bar{\mathbf{x}}}} = \underbrace{\begin{bmatrix} \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{u}) \\ l(\mathbf{x}, \mathbf{u}) \end{bmatrix}}_{\bar{\mathbf{f}}(\mathbf{x}, \mathbf{u})}, \quad \bar{\mathbf{x}}(t_0) = \begin{bmatrix} \mathbf{x}_0 \\ 0 \end{bmatrix} \tag{4.142}$$

beim Punkt $\bar{\mathbf{x}}^{\mathrm{T}}(t_1) = \begin{bmatrix} \mathbf{x}_1^{\mathrm{T}} & x_{n+1}(t_1) \end{bmatrix}$ terminiert und dabei $x_{n+1}(t_1)$ möglichst klein gemacht wird. Abbildung 4.8 veranschaulicht diesen Sachverhalt.

Die Linie durch den Punkt $(\mathbf{x}_1, 0)$ parallel zur x_{n+1}-Achse beschreibt alle Punkte einer Familie von Trajektorien $\bar{\mathbf{x}}(t)$ des erweiterten Systems (4.142), die die Bedingung $\mathbf{x}(t_1) = \mathbf{x}_1$ erfüllen und unterschiedliche Werte des Kostenfunktionals $x_{n+1}(t_1)$ ergeben. Keine andere Trajektorie kann diese vertikale Linie an einem kleineren Wert für $x_{n+1}(t_1)$ schneiden als $x_{n+1}^*(t_1^*)$, der mit der optimalen Stellgröße $\mathbf{u}^*(t)$ erreicht wird. Diese geometrischen Überlegungen sind auch der Ausgangspunkt für die Herleitung des Minimumsprinzips von Pontryagin, auf welche hier verzichtet wird. Diese Herleitung wird z. B. in [4.11, 4.15] gezeigt.

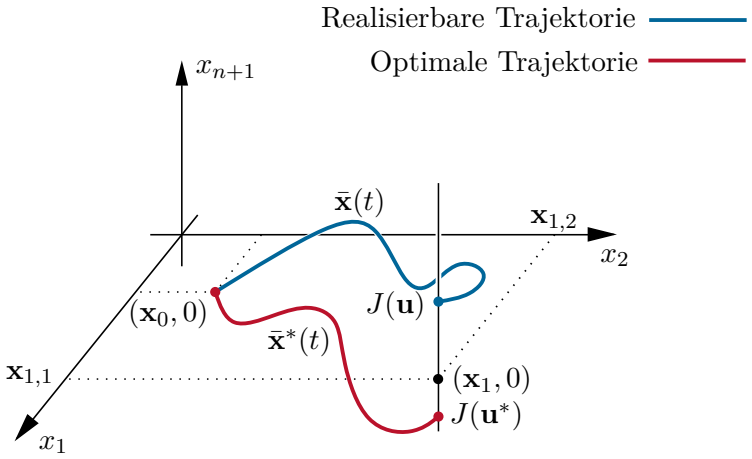


Abbildung 4.8: Zum Minimumsprinzip von Pontryagin.

Satz 4.11 (Minimumsprinzip von Pontryagin, vorgeschriebener Endzustand)**.** *Gesucht ist die Stellgröße* $\mathbf{u} \in (\hat{C}_U[t_0, t_1])^m$ *so, dass das Kostenfunktional (Lagrange-Form)*

$$J(\mathbf{u}) = \int_{t_0}^{t_1} l(\mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t))\,\mathrm{d}t \tag{4.143}$$

unter den Gleichungsbeschränkungen (dynamisches System)

$$\dot{\mathbf{x}} - \mathbf{f}(\mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t)) = \mathbf{0}, \quad \mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}_0, \quad \mathbf{x}(t_1) = \mathbf{x}_1 \tag{4.144}$$

mit fester Anfangszeit t_0 *und freier Endzeit* $t_1 \ll T$ *minimiert wird. Dabei wird angenommen, dass* l *und* $\mathbf{f}$ *stetig in* $\mathbf{x}$ *und* $\mathbf{u}$ *und stetig differenzierbar bezüglich* $\mathbf{x}$ *für alle* $(\mathbf{x}, \mathbf{u}) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m$ *sind. Weiters sei* $(\mathbf{u}^*, t_1^*) \in (\hat{C}_U[t_0, T])^m \times [t_0, T)$ *die optimale Lösung des Optimierungsproblems und* $\mathbf{x}^*$ *die zugehörige Lösung von* (4.144)*. Dann existiert ein* $\bar{\boldsymbol{\lambda}}^* \in (\hat{C}^1[t_0, t_1^*])^{n+1}$, $\bar{\boldsymbol{\lambda}}^* = [\bar{\lambda}_1^* \quad \dots \quad \bar{\lambda}_{n+1}^*]^{\mathrm{T}} \neq \mathbf{0}$ *so, dass die Beziehung*

$$\dot{\bar{\boldsymbol{\lambda}}}^* = -\left(\frac{\partial}{\partial \bar{\mathbf{x}}} H\right)^{\mathrm{T}} \left(\mathbf{x}^*(t), \mathbf{u}^*(t), \bar{\boldsymbol{\lambda}}^*(t)\right) \tag{4.145}$$

für $t_0 \leq t \leq t_1$ *mit* $H\left(\mathbf{x}^*(t), \mathbf{u}^*(t), \bar{\boldsymbol{\lambda}}^*(t)\right) = \bar{\boldsymbol{\lambda}}^{*\mathrm{T}} \bar{\mathbf{f}}(\mathbf{x}^*(t), \mathbf{u}^*(t))$ *erfüllt ist, wobei* $\bar{\mathbf{f}}$ *gemäß* (4.142) *definiert ist, und folgende Eigenschaften gelten:*

(a) Die optimale Lösung $\mathbf{u}^*(t)$ *minimiert die Funktion* $H\left(\mathbf{x}^*(t), \mathbf{u}(t), \bar{\boldsymbol{\lambda}}^*(t)\right)$ *für alle Zeiten* $t_0 \leq t \leq t_1^*$ *in der Menge der Stellgrößenbeschränkungen* U*, d. h.*

$$H\left(\mathbf{x}^*(t), \mathbf{v}, \bar{\boldsymbol{\lambda}}^*(t)\right) \geq H\left(\mathbf{x}^*(t), \mathbf{u}^*(t), \bar{\boldsymbol{\lambda}}^*(t)\right), \quad \forall \mathbf{v} \in U. \tag{4.146}$$

(b) Es gilt für alle Zeiten $t_0 \le t \le t_1^*$

$$\bar{\lambda}_{n+1}^*(t) = \text{konst.} \ge 0 \tag{4.147a}$$

$$H\Big(\mathbf{x}^*(t), \mathbf{u}^*(t), \bar{\boldsymbol{\lambda}}^*(t)\Big) = \text{konst.} \tag{4.147b}$$

(c) Es gilt die folgende Transversalitätsbedingung *(für* t_1 *frei)*

$$H\Big(\mathbf{x}^*(t_1^*), \mathbf{u}^*(t_1^*), \bar{\boldsymbol{\lambda}}^*(t_1^*)\Big) = 0 \ . \tag{4.148}$$

Zur Berechnung der $m + 2n + 3$ *unbekannten Größen* $(\mathbf{u}^*(t), \bar{\mathbf{x}}^*(t), \bar{\boldsymbol{\lambda}}^*(t), t_1^*)$ stehen $m + 2n + 3$ *Bedingungen* zur Verfügung. Das sind m algebraische Bedingungen aus der Forderung, dass gemäß (4.146) die Hamiltonfunktion H zu jedem Zeitpunkt $t_0 \le t \le t_1^*$ am Punkt $\mathbf{u}^*(t)$ in der Menge U ein Minimum aufweisen muss, eine algebraische Gleichung in Form der Transversalitätsbedingung (4.148) und $2n + 2$ Differentialgleichungen für den erweiterten Zustand $\bar{\mathbf{x}}^*$ gemäß (4.142) und den erweiterten adjungierten Zustand $\bar{\boldsymbol{\lambda}}^*$ gemäß (4.145). Zu diesen Differentialgleichungen gehören $n + 1$ Anfangsbedingungen $\bar{\mathbf{x}}^*(t_0) = [\mathbf{x}_0^{\mathrm{T}} \quad 0]^{\mathrm{T}}$, n Endbedingungen $\mathbf{x}^*(t_1^*) = \mathbf{x}_1$ sowie die Bedingung $\bar{\lambda}_{n+1}^*(t_1^*) \ge 0$. Man beachte, dass daraus noch nicht eindeutig die unbekannten Größen $(\mathbf{u}^*(t), \bar{\mathbf{x}}^*(t), \bar{\boldsymbol{\lambda}}^*(t), t_1^*)$ bestimmt werden können. Es sind nun zwei Fälle zu unterscheiden:

(i) Für $\bar{\lambda}_{n+1}^* = 0$ liegt ein *abnormaler Fall* vor, da dann wegen

$$H(\mathbf{x}^*, \mathbf{u}^*, \bar{\boldsymbol{\lambda}}^*) = \bar{\boldsymbol{\lambda}}^{*\mathrm{T}} \bar{\mathbf{f}}(\mathbf{x}^*, \mathbf{u}^*) = \boldsymbol{\lambda}^{*\mathrm{T}} \mathbf{f}(\mathbf{x}^*, \mathbf{u}^*) + \underbrace{\bar{\lambda}_{n+1}^*}_{=0} l(\mathbf{x}^*, \mathbf{u}^*) \tag{4.149}$$

die Hamiltonfunktion H und folglich auch die Optimalitätsbedingungen gemäß Satz 4.11 unabhängig von der Lagrangeschen Dichte l sind. In diesem Fall ist die Optimierungsaufgabe *nicht sinnvoll gestellt.*

(ii) Für $\bar{\lambda}_{n+1}^* > 0$ liegt ein *normaler Fall* vor und $\boldsymbol{\lambda}^*$ ist bis auf einen multiplikativen Faktor durch die genannten Gleichungen definiert. In der Praxis wählt man meist den Wert $\bar{\lambda}_{n+1}^* = 1$ und erhält damit genau die Hamiltonfunktion wie sie bereits in Abschnitt 4.2.3 verwendet wurde, siehe (4.99).

Die notwendigen Bedingungen dafür, dass die Hamiltonfunktion $H(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \bar{\boldsymbol{\lambda}})$ für $\bar{\lambda}_{n+1}^* = 1$ (normaler Fall) bezüglich $\mathbf{u}$ minimal ist, wie in (4.146) gefordert, entsprechen den notwendigen Bedingungen erster und zweiter Ordnung (4.100c) und (4.102), d. h.

$$\left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} H\right)(\mathbf{x}^*, \mathbf{u}^*, \boldsymbol{\lambda}^*) = \mathbf{0} \tag{4.150a}$$

$$\mathbf{d}^{\mathrm{T}} \left(\frac{\partial^2}{\partial \mathbf{u}^2} H\right)(\mathbf{x}^*, \mathbf{u}^*, \boldsymbol{\lambda}^*) \mathbf{d} \ge 0 \quad \forall\, \mathbf{d} \in \mathbb{R}^m,\ t \in [t_0, t_1^*] \ , \tag{4.150b}$$

die im Rahmen der Variationsrechnung hergeleitet wurden. Trotz dieser Analogie ist das Minimumsprinzip von Pontryagin nach Satz 4.11 allgemeiner als die Ergebnisse der Variationsrechnung, da die Bedingung $\frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} H = \mathbf{0}$ im Allgemeinen nicht mehr gültig ist,

wenn das Minimum von H am Rand der Menge U der Stellgrößenbeschränkungen liegt. Im Weiteren fordert man beim Minimumsprinzip von Pontryagin lediglich die Stetigkeit von l und $\mathbf{f}$ bezüglich $\mathbf{u}$, wohingegen bei der Herleitung der Euler-Lagrange Gleichungen die stetige Differenzierbarkeit bezüglich $\mathbf{u}$ gefordert wurde, siehe Satz 4.9.

Beispiel 4.11 (Abnormaler Fall). Gegeben ist das Optimalsteuerungsproblem

$$\min_{u(\cdot)} \quad \int_0^1 l(x,u)\,\mathrm{d}t \tag{4.151a}$$

$$\text{u.B.v.} \quad \dot{x} = u\,, \quad x(0) = 0\,, \quad x(1) = 1 \tag{4.151b}$$

$$u(t) \in [0,1]\,. \tag{4.151c}$$

Es existiert nur eine realisierbare Steuerung $u^*(t) = 1$, die den Zustand $x^*(t) = t$ von $x^*(0) = 0$ nach $x^*(1) = 1$ überführt. Somit ist die optimale Lösung unabhängig von der Wahl der Kostenfunktion $l(x,u)$ und es liegt ein abnormaler Fall vor.

Beispiel 4.12. Gesucht ist das Minimum des Kostenfunktionals

$$J(u) = \frac{1}{2}\int_0^1 u^2(t)\,\mathrm{d}t \tag{4.152}$$

für das dynamische System

$$\dot{x} = -x + u, \quad x(0) = 1, \quad x(1) = 0 \tag{4.153}$$

unter Berücksichtigung der Stellgrößenbeschränkung $-0.6 \leq u(t) \leq 0$ für alle $0 \leq t \leq 1$. Die Hamiltonfunktion H von Satz 4.11 für dieses Beispiel lautet

$$H\left(x,u,\bar{\boldsymbol{\lambda}}\right) = \bar{\lambda}_1(-x+u) + \bar{\lambda}_2\frac{1}{2}u^2 \tag{4.154}$$

und die adjungierten Zustände $\bar{\boldsymbol{\lambda}}$ erfüllen gemäß (4.145) und (4.147a) die Gleichungen

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\bar{\lambda}_1^* = -\left(\frac{\partial}{\partial x}H\right)\left(x^*,u^*,\bar{\boldsymbol{\lambda}}^*\right) = \bar{\lambda}_1^* \tag{4.155a}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\bar{\lambda}_2^* = 0\,. \tag{4.155b}$$

Daraus folgt die Lösung

$$\bar{\lambda}_1^*(t) = C_1\mathrm{e}^t \quad \text{und} \quad \bar{\lambda}_2^*(t) = C_2 \tag{4.156}$$

für geeignete Konstanten C_1 und $C_2 \geq 0$. Im Weiteren setzt man $C_2 = 1$, da ein *normaler Fall* vorliegt. Die optimale Lösung u^* mit $-0.6 \leq u^* \leq 0$ muss gemäß

(4.146) der Ungleichung

$$H\Big(x^*(t), v, \bar{\boldsymbol{\lambda}}^*(t)\Big) \geq H\Big(x^*(t), u^*(t), \bar{\boldsymbol{\lambda}}^*(t)\Big), \quad \forall v \in [-0.6, 0], \quad \forall t \in [0, 1] \tag{4.157}$$

genügen. Aus

$$\left(\frac{\partial}{\partial u} H\right)\Big(x^*, u^*, \bar{\boldsymbol{\lambda}}^*\Big) = \bar{\lambda}_1^* + \bar{\lambda}_2^* u^* = \bar{\lambda}_1^* + u^* \tag{4.158}$$

folgt für die optimale Stellgröße unter Berücksichtigung der Stellgrößenbeschränkung

$$u^*(t) = \begin{cases} 0 & \text{für} \quad \bar{\lambda}_1^* \leq 0 \\ -\bar{\lambda}_1^* = -C_1 \mathrm{e}^t & \text{für} \quad 0 < \bar{\lambda}_1^* < 0.6 \\ -0.6 & \text{für} \quad \bar{\lambda}_1^* \geq 0.6 \ . \end{cases} \tag{4.159}$$

Hieraus folgt, dass $C_1 > 0$ gelten muss, denn für $C_1 \leq 0$ ist $\bar{\lambda}_1^* \leq 0$ und damit $u^*(t) = 0$ für $0 \leq t \leq 1$, woraus aber wegen $x^*(1) = \mathrm{e}^{-1} \neq 0$ keine zulässige Lösung resultiert. Mit $C_1 > 0$ bzw. $\bar{\lambda}_1^* > 0$ muss deshalb die optimale Stellgröße $u^*(t)$ zwischen $-C_1 \mathrm{e}^t$ und -0.6 umschalten. Da $\bar{\lambda}_1^*(t) = C_1 \mathrm{e}^t$ streng monoton steigend in t ist, setzt man eine stückweise stetige Steuerung

$$u^*(t) = \begin{cases} -C_1 \mathrm{e}^t & \text{falls } t \in [0, c^*] \\ -0.6 & \text{falls } t \in (c^*, 1] \end{cases} \tag{4.160}$$

mit einem Umschaltzeitpunkt (Eckpunkt) $t = c^*$ an. Für das Zeitintervall $[0, c^*]$ errechnet sich die Lösung von

$$\dot{x}_{(1)}^*(t) = -x_{(1)}^*(t) + u^*(t), \quad x_{(1)}^*(0) = 1 \tag{4.161}$$

zu

$$x_{(1)}^*(t) = -\frac{1}{2} C_1 \mathrm{e}^t + \mathrm{e}^{-t}\left(\frac{1}{2} C_1 + 1\right) \tag{4.162}$$

und für das Zeitintervall $[c^*, 1]$ folgt aus

$$\dot{x}_{(2)}^*(t) = -x_{(2)}^*(t) + u^*(t), \quad x_{(2)}^*(1) = 0 \tag{4.163}$$

die Lösung zu

$$x_{(2)}^*(t) = 0.6\Big(\mathrm{e}^{1-t} - 1\Big) \ . \tag{4.164}$$

Nach (4.147b) muss die Hamiltonfunktion $H(x^*(t), u^*(t), \bar{\boldsymbol{\lambda}}^*(t))$ im gesamten Zeitintervall konstant sein. Daraus folgt

$$\begin{aligned} &\bar{\lambda}_1^*(\tau_1)\Big(-x_{(1)}^*(\tau_1) + u^*(\tau_1)\Big) + \frac{1}{2}(u^*(\tau_1))^2 = \\ &\qquad \bar{\lambda}_1^*(\tau_2)\Big(-x_{(2)}^*(\tau_2) + u^*(\tau_2)\Big) + \frac{1}{2}(u^*(\tau_2))^2 \quad \forall\, \tau_1 \in [0, c^*],\ \tau_2 \in (c^*, 1] \end{aligned} \tag{4.165a}$$

und nach Einsetzen

$$-C_1\left(1+\frac{1}{2}C_1\right) = -C_1 0.6\mathrm{e} + \frac{1}{2}0.6^2 \ . \tag{4.165b}$$

Hieraus ergeben sich die zwei möglichen Lösungen $C_{1,1} = 0.436$ und $C_{1,2} = 0.826$. Der Zeitpunkt der Umschaltung (Eckpunkt) $t = c^*$ folgt aus der Stetigkeitsbedingung der Zustandsgröße

$$x^*_{(1)}(c^*) = x^*_{(2)}(c^*) \tag{4.166}$$

zu $c_1^* = 0.32$ für $C_{1,1}$ und $c_1^* = -0.32$ für $C_{1,2}$. Die für das betrachtete Zeitintervall $0 \leq t \leq 1$ relevante Lösung lautet daher $C_1 = C_{1,1} = 0.436$.

Im nächsten Schritt wird gezeigt, wie sich das Minimumsprinzip von Pontryagin nach Satz 4.11 ändert, wenn die Endbedingung $\mathbf{x}(t_1) = \mathbf{x}_1$ durch eine *Endbeschränkung* der Form $\mathbf{x}(t_1) \in \mathcal{X}_1$ mit einer glatten Mannigfaltigkeit $\mathcal{X}_1$ (siehe auch Abschnitt 3.1.2.1) der Dimension $n-p$ ersetzt wird. Diese $(n-p)$-dimensionale Mannigfaltigkeit wird durch p Gleichungen der Form

$$\psi_k(\mathbf{x}) = 0, \quad k = 1, \ldots, p \tag{4.167}$$

beschrieben. D. h. es gilt $\mathcal{X}_1 = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \,|\, \psi_k(\mathbf{x}) = 0,\ k = 1, \ldots, p\}$. Der Tangentialraum $\mathcal{T}_{\check{\mathbf{x}}}\mathcal{X}_1$ an der Stelle $\mathbf{x} = \check{\mathbf{x}}$ ist dann in der Form

$$\mathcal{T}_{\check{\mathbf{x}}}\mathcal{X}_1 = \left\{\mathbf{d} \,\middle|\, \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}\psi_k(\check{\mathbf{x}})\right)\mathbf{d} = 0,\ k = 1, \ldots, p\right\} \tag{4.168}$$

definiert (siehe auch Abschnitt 3.1.2.1).

Satz 4.12 (Minimumsprinzip von Pontryagin, beschränkter Endzustand)**.** *Gesucht ist die Stellgröße* $\mathbf{u} \in (\hat{C}_U[t_0, t_1])^m$ *so, dass das Kostenfunktional (Lagrange-Form)*

$$J(\mathbf{u}) = \int_{t_0}^{t_1} l(\mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t))\,\mathrm{d}t \tag{4.169}$$

unter den Gleichungsbeschränkungen (dynamisches System)

$$\dot{\mathbf{x}} - \mathbf{f}(\mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t)) = \mathbf{0}, \quad \mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}_0, \quad \mathbf{x}(t_1) \in \mathcal{X}_1 \tag{4.170}$$

mit fester Anfangszeit t_0*, freier Endzeit* $t_1 \ll T$ *und der glatten* $(n-p)$*-dimensionalen Mannigfaltigkeit* $\mathcal{X}_1$ *minimiert wird. Dabei wird angenommen, dass* l *und* $\mathbf{f}$ *stetig in* $\mathbf{x}$ *und* $\mathbf{u}$ *und stetig differenzierbar bezüglich* $\mathbf{x}$ *für alle* $(\mathbf{x}, \mathbf{u}) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m$ *sind. Weiters sei* $(\mathbf{u}^*, t_1^*) \in (\hat{C}_U[t_0, T])^m \times [t_0, T)$ *die optimale Lösung des Optimierungsproblems und* $\mathbf{x}^*$ *die zugehörige Lösung von* (4.170)*. Dann existiert ein* $\bar{\boldsymbol{\lambda}}^* \in (\hat{C}^1[t_0, t_1^*])^{n+1}$*,* $\bar{\boldsymbol{\lambda}}^* = [(\boldsymbol{\lambda}^*)^{\mathrm{T}} \ \ \bar{\lambda}^*_{n+1}]^{\mathrm{T}} = [\bar{\lambda}^*_1 \ \ \ldots \ \ \bar{\lambda}^*_{n+1}]^{\mathrm{T}} \neq \mathbf{0}$ *so, dass die Beziehungen* (4.145)–(4.148) *von Satz 4.11 erfüllt sind und* $\boldsymbol{\lambda}^*(t_1^*) = [\lambda_1^*(t_1^*) \ \ \ldots \ \ \lambda_n^*(t_1^*)]^{\mathrm{T}}$ orthogonal zum

Tangentialraum $\mathcal{T}_{\mathbf{x}^*(t_1^*)}\mathcal{X}_1$ *ist, d. h. es gelten die* Transversalitätsbedingungen

$$(\boldsymbol{\lambda}^*)^{\mathrm{T}}(t_1^*)\mathbf{d} = 0, \quad \forall \mathbf{d} \in \mathcal{T}_{\mathbf{x}^*(t_1^*)}\mathcal{X}_1 \ . \tag{4.171}$$

Nach Satz 4.12 und (4.168) muss $\boldsymbol{\lambda}^*(t_1^*)$ sich also als Linearkombination der Gradienten $\left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}\psi_k\right)(\mathbf{x}_1^*)$ mit $k = 1, \ldots, p$ darstellen lassen, d. h. in der Form

$$\boldsymbol{\lambda}^*(t_1^*) = \sum_{k=1}^{p} \mu_k \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}\psi_k\right)^{\mathrm{T}}(\mathbf{x}_1^*), \quad \mathbf{x}_1^* = \mathbf{x}^*(t_1^*) \tag{4.172}$$

mit dem Lagrange-Multiplikator $\boldsymbol{\mu} = [\mu_1 \quad \ldots \quad \mu_p]^{\mathrm{T}} \in \mathbb{R}^p$. Die Bedingung

$$\operatorname{rang}\left(\left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}\boldsymbol{\psi}\right)(\mathbf{x}_1^*)\right) = p, \quad \boldsymbol{\psi} = \begin{bmatrix}\psi_1 & \ldots & \psi_p\end{bmatrix}^{\mathrm{T}} \tag{4.173}$$

entspricht der LICQ (linear independence constraint qualification) Bedingung der statischen Optimierung mit Gleichungsbeschränkungen, siehe auch Definition 3.2.

Für *zeitvariante Systeme*

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(t, \mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t)), \quad \mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}_0 \tag{4.174}$$

führt man eine weitere Zustandsgröße der Form $x_{n+1} = t$ ein und entwirft für das erweiterte System

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\underbrace{\begin{bmatrix}\mathbf{x} \\ x_{n+1}\end{bmatrix}}_{\mathbf{x}_e} = \underbrace{\begin{bmatrix}\mathbf{f}(x_{n+1}, \mathbf{x}, \mathbf{u}) \\ 1\end{bmatrix}}_{\mathbf{f}_e(\mathbf{x}_e, \mathbf{u})} \tag{4.175}$$

die optimale Steuerung gemäß Satz 4.11 oder Satz 4.12. Dabei wird vorausgesetzt, dass $\mathbf{f}$ und l stetig differenzierbar in t sind.

4.2.5 Minimumsprinzip für eingangsaffine Systeme

Den weiteren Betrachtungen liege das *eingangsaffine System*

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{u}) = \mathbf{f}_0(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^{m} \mathbf{f}_i(\mathbf{x}) u_i \tag{4.176}$$

mit den Stellgrößenbeschränkungen der Form

$$\mathbf{u} \in U = [\mathbf{u}^-, \mathbf{u}^+] \quad \text{bzw.} \quad u_i \in [u_i^-, u_i^+], \quad i = 1, \ldots, m \tag{4.177}$$

(englisch: *box constraints*) zugrunde.

4.2.5.1 Kostenfunktional mit verbrauchsoptimalem Anteil

In der Literatur findet man im Zusammenhang mit dem Entwurf von *verbrauchsoptimalen Steuerungen* häufig Kostenfunktionale der Form

$$J(\mathbf{u}) = \int_{t_0}^{t_1} l_0(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^{m} r_i |u_i| \, \mathrm{d}t \,, \quad r_i > 0 \,. \tag{4.178}$$

Die zu (4.176) und (4.178) passende Hamiltonfunktion lautet (mit $\bar{\lambda}_{n+1} = 1$)

$$H(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda}) = l_0(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^{m} r_i |u_i| + \boldsymbol{\lambda}^{\mathrm{T}} \left(\mathbf{f}_0(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^{m} \mathbf{f}_i(\mathbf{x}) u_i \right) . \tag{4.179}$$

Da der Anteil $l_0(\mathbf{x}) + \boldsymbol{\lambda}^{\mathrm{T}} \mathbf{f}_0(\mathbf{x})$ in H unabhängig von $\mathbf{u}$ ist, kann er im Minimierungsproblem (4.146) vernachlässigt werden. Die Minimierung von H kann nun für jedes $u_i, \; i = 1, \ldots, m$, separat durchgeführt werden, d. h.

$$\min_{u_i \in [u_i^-, u_i^+]} H_i(u_i) = r_i |u_i| + q_i(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}) u_i, \quad q_i(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}) = \boldsymbol{\lambda}^{\mathrm{T}} \mathbf{f}_i(\mathbf{x}) \,. \tag{4.180}$$

Der Term $q_i(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda})$ spielt eine wichtige Rolle bei der Lösung dieses Problems. Im aktuellen Abschnitt wird davon ausgegangen, dass $u_i^- < 0 < u_i^+$ gilt. Sind diese Bedingungen nicht erfüllt, lassen sich analog zu den nachfolgenden Ausführungen sehr einfach Vorschriften zur Bestimmung der optimalen Stellgröße ableiten. Abbildung 4.9 illustriert die unterschiedlichen Fälle a)–d) mit denen die optimale Stellgröße

$$u_i^* = \begin{cases} u_i^- & \text{falls} \;\; q_i(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}) > r_i \\ 0 & \text{falls} \;\; q_i(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}) \in (-r_i, r_i) \,, \\ u_i^+ & \text{falls} \;\; q_i(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}) < -r_i \end{cases} \qquad \forall \, i = 1, \ldots, m \tag{4.181}$$

komponentenweise bestimmt wird. Ein kritischer Fall liegt vor, falls auf einem Subintervall $I_s \subset [t_0, t_1]$ die Bedingung $q_i(\mathbf{x}(t), \boldsymbol{\lambda}(t)) = \pm r_i$ identisch erfüllt ist. Die optimale Stellgröße u_i^* ist dann nicht mehr eindeutig aus der Minimierungsbedingung (4.180) bestimmbar. Dieser Fall wird als *singulär* bezeichnet und im Abschnitt 4.2.6 näher erläutert.

4.2.5.2 Kostenfunktional mit energieoptimalem Anteil

Unter dem Begriff *energieoptimale Steuerung* wird häufig die Minimierung eines Kostenfunktionals der Form

$$J(\mathbf{u}) = \int_{t_0}^{t_1} l_0(\mathbf{x}) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{m} r_i u_i^2 \, \mathrm{d}t \,, \quad r_i > 0 \tag{4.182}$$

verstanden. Analog zum vorherigen Fall kann die Minimierung der Hamiltonfunktion H wieder für jedes $u_i, \; i = 1, \ldots, m$, separat erfolgen, d. h.

$$\min_{u_i \in [u_i^-, u_i^+]} H_i(u_i) = \frac{1}{2} r_i u_i^2 + q_i(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}) u_i, \quad q_i(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}) = \boldsymbol{\lambda}^{\mathrm{T}} \mathbf{f}_i(\mathbf{x}) \,. \tag{4.183}$$

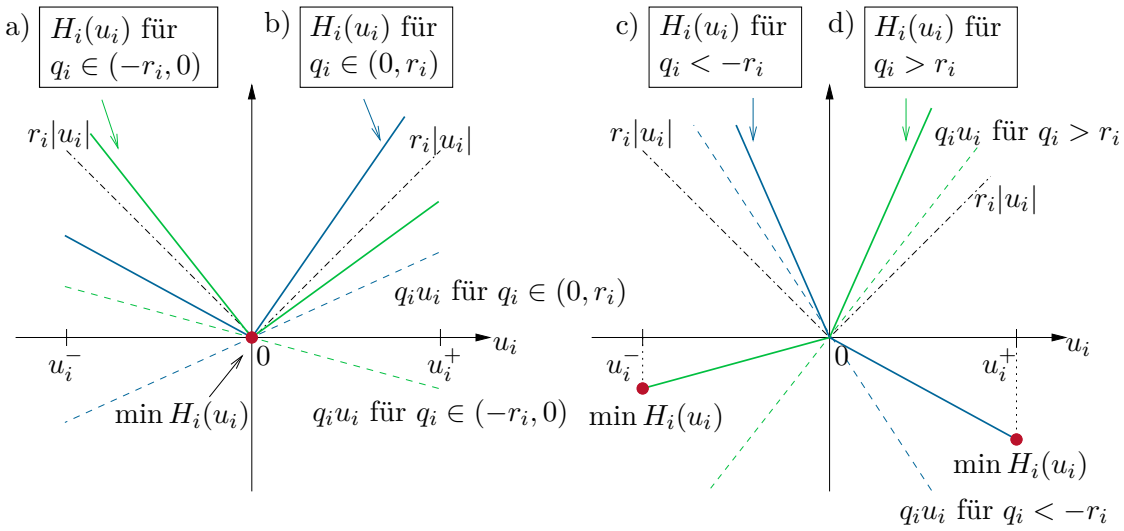


Abbildung 4.9: Verbrauchsoptimaler Fall, grafische Veranschaulichung von (4.180).

Durch den quadratischen Term mit $r_i > 0$ hätte die Funktion $H_i(u_i)$ im unbeschränkten Fall stets ein *Minimum* an der Stelle

$$u_i^0 = -\frac{1}{r_i}\, q_i(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda})\,. \tag{4.184}$$

Falls u_i^0 innerhalb des zulässigen Intervalls $[u_i^-, u_i^+]$ liegt, ist die optimale Lösung von (4.176), (4.177) und (4.182) durch $u_i^* = u_i^0$ gegeben. Falls u_i^0 links (rechts) von $[u_i^-, u_i^+]$ liegt, so befindet sich das Minimum von $H_i(u_i)$ an der Schranke u_i^- (u_i^+), da $H_i(u_i)$ für $u_i^0 < u_i^-$ (bzw. $u_i^0 > u_i^+$) im Intervall $[u_i^-, u_i^+]$ *streng monoton steigend (fallend)* ist, siehe Abbildung 4.10. Somit ist die optimale Stellgröße $\mathbf{u}^*(t)$ komponentenweise wie folgt definiert

$$u_i^* = \begin{cases} u_i^- & \text{falls} \quad u_i^0 \le u_i^- \\ u_i^0 & \text{falls} \quad u_i^0 \in (u_i^-, u_i^+)\,, \\ u_i^+ & \text{falls} \quad u_i^0 \ge u_i^+ \end{cases} \qquad i = 1, \ldots, m\,. \tag{4.185}$$

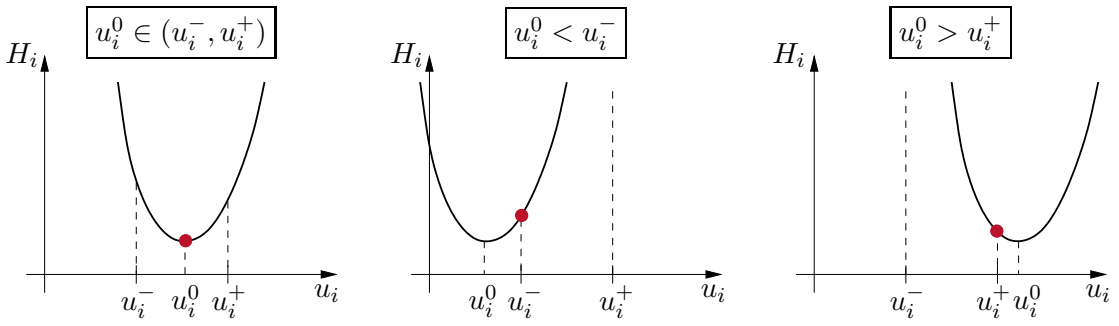


Abbildung 4.10: Energieoptimaler Fall, grafische Veranschaulichung von (4.183).

4.2.5.3 Zeitoptimales Kostenfunktional

Für zeitoptimale Probleme lautet das Kostenfunktional

$$J(\mathbf{u}) = \int_{t_0}^{t_1} 1 \, \mathrm{d}t = t_1 - t_0 \tag{4.186}$$

und die Hamiltonfunktion lässt sich in der Form (mit $\bar{\lambda}_{n+1} = 1$)

$$H(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda}) = 1 + \boldsymbol{\lambda}^{\mathrm{T}} \left(\mathbf{f}_0(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^{m} \mathbf{f}_i(\mathbf{x}) u_i \right) \tag{4.187}$$

anschreiben. Minimiert man die Hamiltonfunktion H wieder für jedes u_i, $i = 1, \ldots, m$ separat

$$\min_{u_i \in [u_i^-, u_i^+]} H_i(u_i) = q_i(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}) u_i, \quad q_i(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}) = \boldsymbol{\lambda}^{\mathrm{T}} \mathbf{f}_i(\mathbf{x}) \ , \tag{4.188}$$

so erhält man die optimale Stellgröße $\mathbf{u}^*$ direkt in Abhängigkeit des Vorzeichens von $q_i(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda})$, $i = 1, \ldots, m$, in der Form

$$u_i^* = \begin{cases} u_i^- & \text{falls} \quad q_i(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}) > 0 \\ u_i^+ & \text{falls} \quad q_i(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}) < 0 \end{cases}, \quad i = 1, \ldots, m \, . \tag{4.189}$$

Diese Steuerung wird in der Literatur häufig als *Bang-Bang-Steuerung* bezeichnet, da lediglich zwischen den Maximal- und Minimalwerten des Stellgrößenbereiches hin- und hergeschaltet wird. Ein singulärer Fall liegt vor, falls $q_i(\mathbf{x}(t), \boldsymbol{\lambda}(t))$ auf einem Subintervall $I_s \subset [t_0, t_1]$ identisch Null ist. Die Hamiltonfunktion H ist dann *unabhängig von* u_i, sodass H für jeden beliebigen Wert von u_i trivialerweise minimal ist. Die Minimumsforderung (4.188) ist damit zwar erfüllt, liefert aber keine Informationen über die Wahl von u_i.

In der Praxis wird der singuläre Fall oft durch einen zusätzlichen *Regularisierungsterm*

$$J(\mathbf{u}) = \int_{t_0}^{t_1} 1 + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{m} r_i u_i^2 \, \mathrm{d}t \, , \quad r_i > 0 \tag{4.190}$$

vermieden, wobei r_i hinreichend klein gewählt wird, um annähernd Zeitoptimalität zu erzielen. Der Regularisierungsterm entspricht natürlich einem energieoptimalen Anteil, so dass (4.190) die Form (4.182) besitzt und die optimale Stellgröße $\mathbf{u}^*$ gemäß (4.185) berechnet werden kann.

Beispiel 4.13 (Doppelintegrator). Zur Veranschaulichung des Minimumsprinzips von Pontryagin wird die *zeitminimale* Überführung eines Doppelintegrators mit beschränktem Eingang in den Ursprung $\mathbf{x}(t_1) = \mathbf{0}$ betrachtet. Das Optimalsteuerungsproblem mit dem Zustand $\mathbf{x} = [x_1 \quad x_2]^{\mathrm{T}}$ kann wie folgt formuliert werden

$$\min_{u(\cdot)} \quad \int_{t_0=0}^{t_1} \mathrm{d}t = t_1 \tag{4.191a}$$

$$\text{u.B.v.} \quad \dot{x}_1 = x_2, \quad \dot{x}_2 = u \tag{4.191b}$$

$$\mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_0 \, , \quad \mathbf{x}(t_1) = \mathbf{0} \tag{4.191c}$$

$$|u(t)| \leq 1 \quad \forall t \in [0, t_1]\,. \tag{4.191d}$$

Mit der Hamiltonfunktion ($\bar{\lambda}_{n+1} = 1$) $H(\mathbf{x}, u, \boldsymbol{\lambda}) = 1 + \lambda_1 x_2 + \lambda_2 u$ ergeben sich die adjungierten Zustände $\boldsymbol{\lambda}^* = [\lambda_1^* \quad \lambda_2^*]^{\mathrm{T}}$ aus (4.145) zu

$$\dot{\lambda}_1^* = 0 \quad \Rightarrow \quad \lambda_1^*(t) = C_1 \tag{4.192a}$$
$$\dot{\lambda}_2^* = -\lambda_1^* \quad \Rightarrow \quad \lambda_2^*(t) = -C_1 t + C_2\,, \tag{4.192b}$$

wobei C_1 und C_2 Integrationskonstanten darstellen. Die Minimierungsbedingung (4.146) für die Hamiltonfunktion führt auf die optimale Stellgröße

$$u^*(t) = \begin{cases} +1 & \text{falls} \quad \lambda_2^* < 0 \\ -1 & \text{falls} \quad \lambda_2^* > 0\,. \end{cases} \tag{4.193}$$

Der *singuläre Fall*, d. h. $\lambda_2^*(t) = 0$ auf einem nicht verschwindenden Subintervall $t \in I_s \subseteq [t_0, t_1]$, kann hier nicht auftreten, da dann aufgrund von (4.192) $\lambda_2^*(t) = 0$ und $\lambda_1^*(t) = 0$ auf dem Gesamtintervall $[0, t_1]$ gelten müsste. Dies widerspricht aber der Transversalitätsbedingung (4.148) für die *freie Endzeit* t_1

$$H(\mathbf{x}^*, u^*, \boldsymbol{\lambda}^*)\big|_{t=t_1^*} = 1 + \lambda_1^*(t_1^*) x_2^*(t_1^*) + \lambda_2^*(t_1^*)\, u^*(t_1^*) = 0\,. \tag{4.194}$$

Der Fall $\lambda_2^*(t) = 0$ kann also nur zu diskreten Zeitpunkten auftreten. Zu diesen Zeitpunkten wird $u^*(t)$ zwischen -1 und $+1$ umgeschaltet. Da $\lambda_2^*(t) = -C_1 t + C_2$, gibt es *maximal einen Umschaltzeitpunkt* $t = t_s$ im Zeitintervall $[0, t_1^*]$, an dem $u^*(t)$ zwischen -1 und $+1$ wechselt. Somit existieren lediglich *vier mögliche Schaltsequenzen* $\{+1\}$, $\{-1\}$, $\{+1, -1\}$, $\{-1, +1\}$, die für eine optimale Lösung in Frage kommen. Da u stets auf einem Zeitintervall konstant ist, stellen die Trajektorien in der (x_1, x_2)-Ebene *Parabeln* dar.

Aufgabe 4.7. Zeigen Sie, dass die Lösung von (4.191b) für $u(t) = \pm 1 = \text{konst.}$ die folgende Parabelgleichung erfüllt

$$x_1 = \frac{x_2^2}{2u} + c\,, \quad u = \pm 1\,. \tag{4.195}$$

Das Optimierungsziel ist das *schnellstmögliche Erreichen des Ursprungs* $\mathbf{x}(t_1) = \mathbf{0}$ ausgehend von einem beliebigen Anfangspunkt $\mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_0$. Der Ursprung ist aber nur über die *Schaltkurve* $x_1 = x_2^2/2$ für $u = 1$ bzw. $x_1 = -x_2^2/2$ für $u = -1$ erreichbar, siehe Abbildung 4.11. Diese beiden Fälle können mit der Funktion

$$S(x_2) = -\frac{1}{2} x_2 |x_2| \tag{4.196}$$

unterschieden werden. Da lediglich die Schaltsequenzen $\{+1\}$, $\{-1\}$, $\{+1,-1\}$, $\{-1,+1\}$ für u in Frage kommen, gibt es nur eine Möglichkeit, um den Systemzustand mit $\mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_0 = [x_{1,0} \quad x_{2,0}]^{\mathrm{T}}$ schnellstmöglich zum Ursprung $\mathbf{x}(t_1) = \mathbf{0}$ zu bringen:

- Falls $x_{1,0} = S(x_{2,0})$ gilt, ist keine Umschaltung notwendig, und $\mathbf{x}(t_1) = \mathbf{0}$ wird direkt über die Schaltkurve mit $u(t) = 1$ für $x_{1,0} > 0$ oder $u(t) = -1$ für $x_{1,0} < 0$ erreicht, siehe Abbildung 4.11.
- Falls $\mathbf{x}_0$ nicht auf der Schaltkurve liegt, d. h. $x_{1,0} < S(x_{2,0})$ oder $x_{1,0} > S(x_{2,0})$, ist genau eine Umschaltung notwendig, um zunächst die Schaltkurve zu erreichen und anschließend entlang dieser Kurve zum Ursprung zu laufen, siehe Abbildung 4.12.

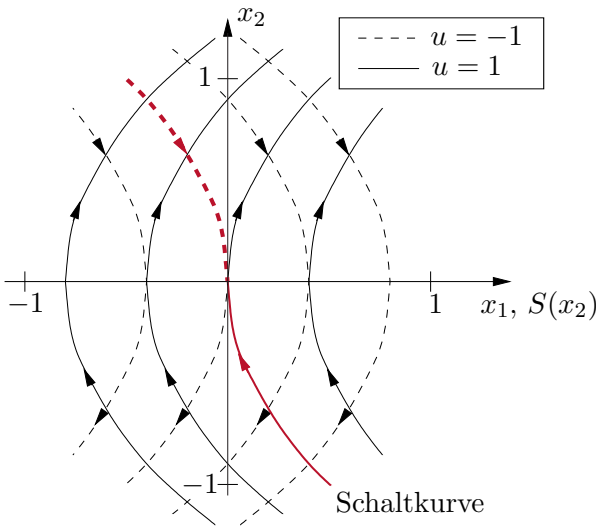


Abbildung 4.11: Mögliche Trajektorien des Doppelintegrators in der (x_1, x_2)-Ebene.

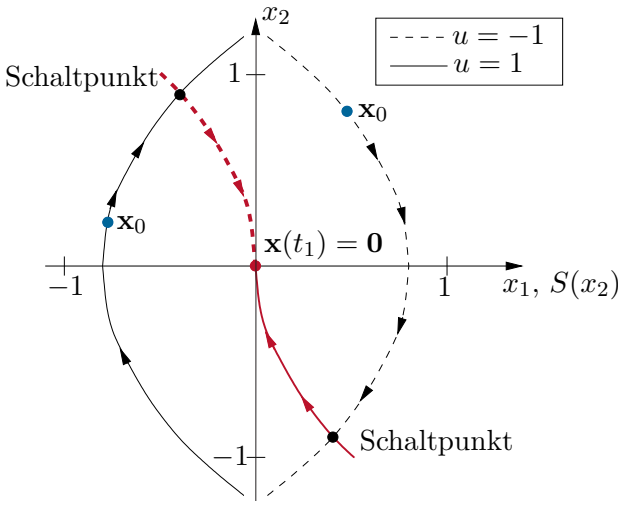


Abbildung 4.12: Optimale Umschaltung für verschiedene Anfangspunkte $\mathbf{x}_0$.

Das *optimale Stellgesetz* lautet also

$$u^*(t) = \begin{cases} +1 & \text{falls} \quad x_1 < S(x_2) \\ +1 & \text{falls} \quad x_1 = S(x_2) \quad \text{und} \quad x_1 > 0 \\ -1 & \text{falls} \quad x_1 > S(x_2) \\ -1 & \text{falls} \quad x_1 = S(x_2) \quad \text{und} \quad x_1 < 0\ . \end{cases} \tag{4.197}$$

Daraus können auch der Schaltzeitpunkt t_s und die minimale Endzeit t_1^* berechnet werden.

Aufgabe 4.8. Verifizieren Sie, dass der optimale Umschaltzeitpunkt t_s und die minimale Endzeit t_1^* wie folgt definiert sind

$$t_s = \begin{cases} x_{2,0} + \sqrt{\frac{1}{2}x_{2,0}^2 + x_{1,0}} & \text{falls} \quad x_{1,0} > S(x_{2,0}) \\ -x_{2,0} + \sqrt{\frac{1}{2}x_{2,0}^2 - x_{1,0}} & \text{falls} \quad x_{1,0} < S(x_{2,0}) \end{cases} \tag{4.198}$$

$$t_1^* = \begin{cases} x_{2,0} + \sqrt{2x_{2,0}^2 + 4x_{1,0}} & \text{falls} \quad x_{1,0} > S(x_{2,0}) \\ -x_{2,0} + \sqrt{2x_{2,0}^2 - 4x_{1,0}} & \text{falls} \quad x_{1,0} < S(x_{2,0}) \\ |x_{2,0}| & \text{falls} \quad x_{1,0} = S(x_{2,0}). \end{cases} \tag{4.199}$$

Abbildung 4.13 zeigt die zeitoptimalen Trajektorien für den Doppelintegrator für verschiedene Anfangswerte $\mathbf{x}_0 = [x_{1,0} \quad x_{2,0}]^{\mathrm{T}}$.

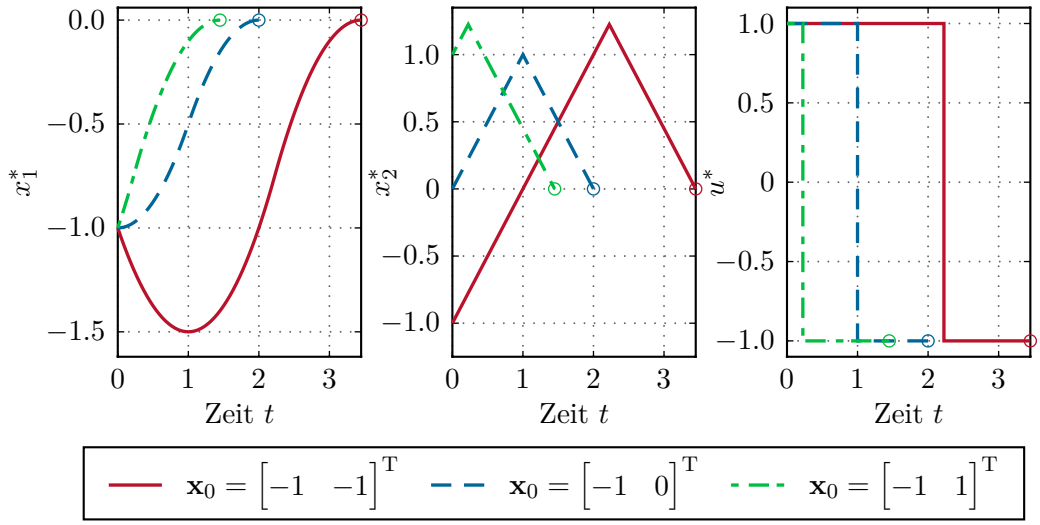


Abbildung 4.13: Zeitoptimale Trajektorien des Doppelintegrators für verschiedene Anfangswerte $\mathbf{x}_0$.

Aufgabe 4.9. Implementieren Sie das System (4.191b) mit dem optimalen Stellgesetz (4.197) in MATLAB/SIMULINK und verifizieren Sie die Ergebnisse in Abbildung 4.13 für verschiedene Anfangswerte $\mathbf{x}_0$. Verwenden Sie t_1^* gemäß (4.199) als Zeithorizont für die Simulation.

4.2.6 Der singuläre Fall

Wenn auf einem endlichen Subintervall $I_s \subseteq [t_0, t_1]$ die optimale Stellgröße $\mathbf{u}^*$ nicht oder nicht vollständig aus der Minimierungsbedingung (4.146) bestimmt werden kann, so liegt ein singulärer Fall vor. Zur Verdeutlichung dieser Problematik soll im Weiteren das Optimalsteuerungsproblem

$$\min_{u(\cdot)} \quad J(u) = \int_{t_0}^{t_1} l_0(\mathbf{x}) + l_1(\mathbf{x})u \ \mathrm{d}t \tag{4.200a}$$

$$\text{u.B.v.} \quad \dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}_0(\mathbf{x}) + \mathbf{f}_1(\mathbf{x})u, \quad \mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}_0 \tag{4.200b}$$

$$u \in \hat{C}_U[t_0, t_1] \tag{4.200c}$$

mit skalarer und affin auftretender Stellgröße $u(t)$ betrachtet werden. Die grundsätzliche Vorgehensweise ist aber auch auf allgemeinere Optimalsteuerungsprobleme anwendbar. Die Hamiltonfunktion

$$H(\mathbf{x}, u, \boldsymbol{\lambda}) = l_0(\mathbf{x}) + \boldsymbol{\lambda}^{\mathrm{T}}\mathbf{f}_0(\mathbf{x}) + \Big(l_1(\mathbf{x}) + \boldsymbol{\lambda}^{\mathrm{T}}\mathbf{f}_1(\mathbf{x})\Big)u \tag{4.201}$$

ist affin in u. Die Funktion

$$\zeta(t) = \left(\frac{\partial}{\partial u}H\right)(\mathbf{x}, u, \boldsymbol{\lambda}) = l_1(\mathbf{x}) + \boldsymbol{\lambda}^{\mathrm{T}}\mathbf{f}_1(\mathbf{x}) \tag{4.202}$$

wird als *Schaltfunktion* bezeichnet und für sie gilt entlang der optimalen Lösung $\zeta^*(t) = \zeta(t)|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}^*(t),\boldsymbol{\lambda}=\boldsymbol{\lambda}^*(t)}$. Wenn $\zeta^*(t) = 0$ auf einem endlichen Zeitintervall $I_s \subseteq [t_0, t_1]$ gilt, so liefert die Minimierungsbedingung (4.146) keine Aussage für die optimale Stellgröße $u^*(t)$ $\forall\, t \in I_s$. Man spricht in diesem Fall von einem *singulären Pfad* (englisch: *singular arc*) und es gilt folglich auch

$$\frac{\mathrm{d}^k}{\mathrm{d}t^k}(\zeta^*(t)) = 0 \qquad \forall\, k \in \mathbb{N},\, t \in I_s\ . \tag{4.203}$$

Entlang des singulären Pfades ist die Minimierungsbedingung (4.146) für alle zulässigen Stellgrößen erfüllt, d. h. es gilt nicht nur $\frac{\partial H}{\partial u} = \zeta(t) = 0$, sondern auch $\frac{\partial^2 H}{\partial u^2} = \frac{\partial \zeta}{\partial u} = 0$. Um dennoch eine optimale Stellgröße $u^*(t)$ ermitteln zu können, sucht man die *kleinste positive natürliche Zahl* $\bar{k}$ so, dass gilt

$$\frac{\partial}{\partial u}\frac{\mathrm{d}^{\bar{k}}}{\mathrm{d}t^{\bar{k}}}(\zeta^*(t)) \neq 0\ . \tag{4.204}$$

Man kann zeigen, dass $\bar{k}$ eine *gerade Zahl* sein muss und nennt $p = \bar{k}/2$ die *Ordnung des singulären Pfades*. Entlang eines singulären Pfades müssen die Zustandsgrößen $\mathbf{x}^*(t)$ und die adjungierten Zustände $\boldsymbol{\lambda}^*(t)$ auf einer Mannigfaltigkeit definiert durch die Gleichungen

$$\frac{\mathrm{d}^k}{\mathrm{d}t^k}(\zeta^*(t)) = 0 \qquad \forall\, k = 0, \ldots, 2p-1 \tag{4.205}$$

zu liegen kommen. Ähnlich der Legendre-Clebsch Bedingung (4.102) muss entlang eines singulären Pfades für alle Zeiten $t \in I_s$ die sogenannte *generalisierte Legendre-Clebsch Bedingung*

$$(-1)^p \frac{\partial}{\partial u}\frac{\mathrm{d}^{2p}}{\mathrm{d}t^{2p}}(\zeta^*(t)) \geq 0 \tag{4.206}$$

erfüllt sein, vgl. [4.16].

Beispiel 4.14. Gesucht ist das Minimum des Kostenfunktionals

$$J(u) = \frac{1}{2}\int_0^2 x_1^2(t)\,\mathrm{d}t \tag{4.207}$$

für das dynamische System

$$\dot{x}_1 = x_2 + u \qquad x_1(0) = 1 \qquad x_1(2) = 0 \tag{4.208a}$$
$$\dot{x}_2 = -u \qquad x_2(0) = 1 \qquad x_2(2) = 0 \tag{4.208b}$$

unter Berücksichtigung der Stellgrößenbeschränkung $-10 \leq u(t) \leq 10$ für alle $t \in [0, 2]$. Die Hamiltonfunktion H für dieses Beispiel lautet (mit $\bar{\lambda}_{n+1} = \bar{\lambda}_3 = 1$)

$$H(\mathbf{x}, u, \boldsymbol{\lambda}) = \lambda_1(x_2 + u) - \lambda_2 u + \frac{1}{2}x_1^2 \tag{4.209}$$

und die adjungierten Zustände $\boldsymbol{\lambda}$ erfüllen gemäß (4.145) die Gleichungen

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\lambda_1^* = -\left(\frac{\partial}{\partial x_1}H\right)(\mathbf{x}^*, u^*, \boldsymbol{\lambda}^*) = -x_1^* \tag{4.210a}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\lambda_2^* = -\left(\frac{\partial}{\partial x_2}H\right)(\mathbf{x}^*, u^*, \boldsymbol{\lambda}^*) = -\lambda_1^* \,. \tag{4.210b}$$

Die optimale Lösung u^* mit $-10 \leq u^* \leq 10$ muss der Ungleichung (4.146)

$$H(\mathbf{x}^*(t), v, \boldsymbol{\lambda}^*(t)) \geq H(\mathbf{x}^*(t), u^*(t), \boldsymbol{\lambda}^*(t)), \quad \forall v \in [-10, 10] \tag{4.211}$$

genügen. Damit folgt zunächst für die optimale Stellgröße unter Berücksichtigung der Stellgrößenbeschränkung

$$u^*(t) = \begin{cases} 10 & \text{für} \quad \lambda_1^* < \lambda_2^* \\ -10 & \text{für} \quad \lambda_1^* > \lambda_2^* \,. \end{cases} \tag{4.212}$$

Für $\lambda_1^* = \lambda_2^*$ tritt ein *singulärer Pfad* auf. Eine Auswertung von (4.204)

$$\left(\frac{\partial}{\partial u}H\right)(\mathbf{x}^*, u, \boldsymbol{\lambda}^*) \qquad = \lambda_1^* - \lambda_2^* \qquad = 0 \tag{4.213a}$$

$$\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial}{\partial u}H\right)(\mathbf{x}^*, u, \boldsymbol{\lambda}^*) \qquad = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\lambda_1^* - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\lambda_2^* = -x_1^* + \lambda_1^* = 0 \tag{4.213b}$$

$$\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\frac{\partial}{\partial u}H\right)(\mathbf{x}^*, u, \boldsymbol{\lambda}^*) \qquad = -x_2^* - u^* - x_1^* \qquad = 0 \tag{4.213c}$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial u}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\frac{\partial}{\partial u}H\right)(\mathbf{x}^*, u, \boldsymbol{\lambda}^*) = -1 \qquad \neq 0 \tag{4.213d}$$

liefert die Ordnung $p = 1$ des singulären Pfades. Aus (4.213c) folgt

$$u^* = -x_2^* - x_1^* \tag{4.214}$$

und aus (4.213d) folgt

$$(-1)^1\left(\frac{\partial}{\partial u}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\frac{\partial}{\partial u}H\right)(\mathbf{x}^*, u, \boldsymbol{\lambda}^*) = 1 > 0 \,. \tag{4.215}$$

Dies zeigt, dass die generalisierte Legendre-Clebsch Bedingung (4.206) hier erfüllt ist. Gemäß (4.147b) muss die Hamiltonfunktion $H(\mathbf{x}^*(t), u^*(t), \boldsymbol{\lambda}^*(t))$ im gesamten Zeitintervall konstant sein, d. h.

$$\lambda_1^* x_2^* + \frac{1}{2}(x_1^*)^2 + (\lambda_1^* - \lambda_2^*)u^* = C = \text{konst.} \tag{4.216}$$

Entlang des singulären Pfades müssen $\mathbf{x}^*(t)$ und $\boldsymbol{\lambda}^*(t)$ auf der durch (4.213a) und (4.213b) definierten Mannigfaltigkeit $\lambda_1^* = \lambda_2^* = x_1^*$ liegen (siehe auch (4.205)), weshalb sich für diesen Fall (4.216) zu

$$x_1^* x_2^* + \frac{1}{2}(x_1^*)^2 = C \tag{4.217}$$

vereinfacht.

Aufgabe 4.10. Plausibilisieren Sie, dass die optimale Stellgröße durch

$$u^*(t) = \begin{cases} 10 & \text{für} \quad 0 \leq t \leq 0.299 \\ -x_2^* - x_1^* & \text{für} \quad 0.299 < t < 1.927 \\ -10 & \text{für} \quad 1.927 \leq t \leq 2 \end{cases} \tag{4.218}$$

gegeben ist.

Aufgabe 4.11. Im unebenen Gelände soll in direkter Linie eine Straße vom Ort $y = y_0$ zum Ort $y = y_1$ gebaut werden. Wie im linken Teil der Abbildung 4.14 skizziert, ist das Geländeprofil entlang der Trasse mit $g(y)$ gegeben. Das Profil der zu errichtenden Straße wird mit $h(y)$ bezeichnet. Die maximal zulässige Steigung der Straße sei s, d. h. $|\,\mathrm{d}h/\,\mathrm{d}y| \leq s$. Wird das Gelände für den Straßenbau aufgeschüttet, so ergeben sich Kosten in Höhe von $k^+ > 0$ je aufgeschütteter Höheneinheit je Längeneinheit y. Wird das Gelände für den Straßenbau abgegraben, so ergeben sich Kosten in Höhe von $k^- > 0$ je abgegrabener Höheneinheit je Längeneinheit y. Brücken oder Tunnels sollen nicht gebaut werden.

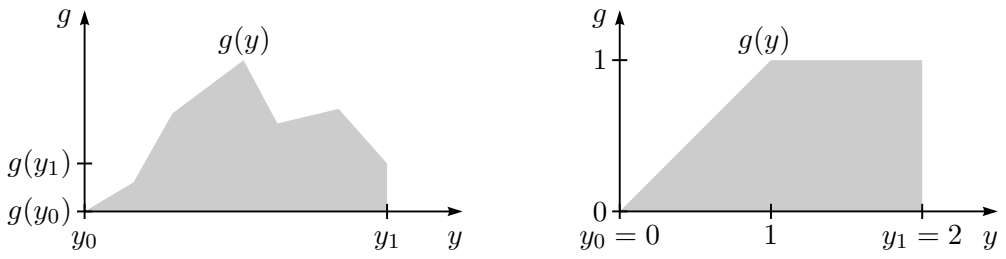


Abbildung 4.14: Geländeprofile.

Entlang von welchem optimalem Profil $h^*(y)$ muss die Straße gebaut werden, um die Baukosten zu minimieren. Geben Sie zunächst allgemein die Optimalitätsbedingungen für diese Optimierungsaufgabe an. Berechnen Sie dann das optimale Profil $h^*(y)$ für das im rechten Teil der Abbildung 4.14 skizzierte Geländeprofil $g(y)$ und die Parameterwerte $s = 1/2$ und $k^+ = k^- = 1$.

Lösung von Aufgabe 4.11. Unter Verwendung der Sprungfunktion

$$\sigma(t) = \begin{cases} 1 & \text{falls } t > 0 \\ 0 & \text{falls } t \leq 0 \end{cases} \tag{4.219}$$

ergeben sich die Gesamtkosten für den Straßenbau in der Form

$$\int_{y_0}^{y_1} (h-g)\Big(k^+\sigma(h-g) - k^-\sigma(g-h)\Big)\,\mathrm{d}y\ . \tag{4.220}$$

Dementsprechend muss die Optimierungsaufgabe

$$\min_{u(\cdot)} \quad \int_{y_0}^{y_1} (h-g)\Big(k^+\sigma(h-g) - k^-\sigma(g-h)\Big)\,\mathrm{d}y \tag{4.221a}$$

$$\text{u.B.v.} \quad \frac{\mathrm{d}h}{\mathrm{d}y} = u \tag{4.221b}$$

$$-s \leq u \leq s \tag{4.221c}$$

mit $u(y) \in \hat{C}[y_0, y_1]$ gelöst werden. Dazu kann das Minimumsprinzip von Pontryagin herangezogen werden. Da g von y abhängt, wird der erweiterte Zustand $\mathbf{x} = [h \quad y]^{\mathrm{T}}$ und das erweiterte dynamische System

$$\frac{\mathrm{d}\mathbf{x}}{\mathrm{d}y} = \begin{bmatrix} u \\ 1 \end{bmatrix} \tag{4.222}$$

mit dem Anfangszustand $x_2(y_0) = y_0$ verwendet. Mit $\bar{\lambda}_{n+1} = 1$ (normaler Fall) folgt die Hamiltonfunktion

$$H(\mathbf{x}, u, \boldsymbol{\lambda}) = (h-g)\Big(k^+\sigma(h-g) - k^-\sigma(g-h)\Big) + \boldsymbol{\lambda}^{\mathrm{T}} \begin{bmatrix} u \\ 1 \end{bmatrix}\ . \tag{4.223}$$

Die optimale Lösung $u^*(y)$, die zugehörige Zustandstrajektorie $\mathbf{x}^*(y)$ und die zugehörige Kozustandstrajektorie $\boldsymbol{\lambda}^*(y)$ müssen (4.221c), (4.222), die Bedingung

$$H(\mathbf{x}^*(y), v, \boldsymbol{\lambda}^*(y)) \geq H(\mathbf{x}^*(y), u^*(y), \boldsymbol{\lambda}^*(y)) \quad \forall v \in [-s, s] \tag{4.224}$$

und die Differenzialgleichung

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{\lambda}^*}{\mathrm{d}y} = -\left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} H\right)^{\mathrm{T}} (\mathbf{x}^*, u^*, \boldsymbol{\lambda}^*) = \begin{bmatrix} -1 \\ \frac{\mathrm{d}g}{\mathrm{d}y} \end{bmatrix} \Big(k^+\sigma(h-g) - k^-\sigma(g-h)\Big) \tag{4.225}$$

erfüllen. Als Randbedingungen treten zusätzlich die Transversalitätsbedingungen

$$\lambda_1^*(y_0) = 0\ , \qquad \lambda_1^*(y_1) = 0 \tag{4.226}$$

auf, da weder $h(y_0)$ noch $h(y_1)$ beschränkt sind (vgl. (4.171)).

Bemerkung 4.3. Würden $h(y_0) = g(y_0)$ und $h(y_1) = g(y_1)$ als weitere Bedingungen in (4.221) auftreten, so könnten keine Randbedingungen für $\lambda_1^*(y_0)$ und $\lambda_1^*(y_1)$ formuliert werden.

Für die Schaltfunktion ergibt sich gemäß (4.202)

$$\zeta(y) = \left(\frac{\partial}{\partial u} H\right)(\mathbf{x}, u, \boldsymbol{\lambda}) = \lambda_1 \ . \tag{4.227}$$

Folglich gilt $u^* = -s$ für $\lambda_1^* > 0$ und $u^* = s$ für $\lambda_1^* < 0$. Im Fall $\lambda_1^* = 0$ tritt ein *singulärer Pfad* auf. Eine Auswertung von (4.203) liefert für den singulären Pfad

$$\frac{\mathrm{d}\zeta^*(y)}{\mathrm{d}y} = \frac{\mathrm{d}\lambda_1^*}{\mathrm{d}y} = k^- \sigma(g - h^*) - k^+ \sigma(h^* - g) = 0 \ , \tag{4.228}$$

d. h. am singulären Pfad muss $h^*(y) = g(y)$ und folglich $u^* = \frac{\mathrm{d}g}{\mathrm{d}y}$ gelten. Die optimale Lösung $u^*(y)$ kann daher in der Form

$$u^* = \begin{cases} -s & \text{falls } \lambda_1^* > 0 \\ s & \text{falls } \lambda_1^* < 0 \\ \frac{\mathrm{d}g}{\mathrm{d}y} & \text{falls } \lambda_1^* = 0 \end{cases} \tag{4.229}$$

zusammengefasst werden. Das optimale Profil $h^*(y)$ der Straße kann schließlich durch einfache Integration von (4.221b) berechnet werden.

Für das im rechten Teil der Abbildung 4.14 angegebene Geländeprofil $g(y)$ und die Parameterwerte $s = 1/2$ und $k^+ = k^- = 1$ wird $\{s, 0\}$ als mögliche Schaltsequenz für die optimale Eingangstrajektorie $u^*(y)$ verwendet. Diese Schaltsequenz ist naheliegend, da das gegebene Geländeprofil $g(y)$ zunächst steiler ansteigt als es für die Straße zulässig ist und danach mit Steigung 0 fortsetzt, welche auch für den Straßenbau geeignet ist. Aus dieser Wahl der Schaltsequenz folgen

$$u^*(y) = \begin{cases} \frac{1}{2} & \text{falls } y \in [0, b) \\ 0 & \text{falls } y \in (b, 2] \end{cases} , \qquad h^*(y) = \begin{cases} h_0 + \frac{y}{2} & \text{falls } y \in [0, b) \\ 1 & \text{falls } y \in [b, 2] \end{cases} \tag{4.230}$$

mit den noch zu bestimmenden Konstanten h_0 und b (siehe Abbildung 4.15). Integration der ersten Zeile von (4.225) liefert unter Berücksichtigung von (4.226)

$$\lambda_1^*(y) = \begin{cases} -y & \text{falls } y \in [0, a) \\ y - 2a & \text{falls } y \in [a, b) \\ 0 & \text{falls } y \in [b, 2] \end{cases} \tag{4.231}$$

mit der noch zu bestimmenden Konstante a. Damit $\lambda_1^*(y)$ am Punkt $y = b$ stetig ist, muss

$$b - 2a = 0 \tag{4.232a}$$

gelten. Weiters müssen die Bedingungen

$$h^*(a) = h_0 + \frac{a}{2} = g(a) = a \ , \qquad h^*(b) = h_0 + \frac{b}{2} = g(b) = 1 \tag{4.232b}$$

erfüllt sein (siehe Abbildung 4.15). Aus (4.232) folgen unmittelbar

$$h_0 = \frac{1}{3} \ , \qquad a = \frac{2}{3} \ , \qquad b = \frac{4}{3} \tag{4.233}$$

und damit das in Abbildung 4.15 rot dargestellte optimale Höhenprofil $h^*(y)$ der Straße. Dieses Höhenprofil genügt den Optimalitätsbedingungen gemäß Satz 4.11 und der Bereich $[b, y_1]$ stellt einen singulären Pfad dar, da in diesem Bereich (4.203) erfüllt ist. Die Schaltsequenz $\{s, 0\}$ ist also optimal.

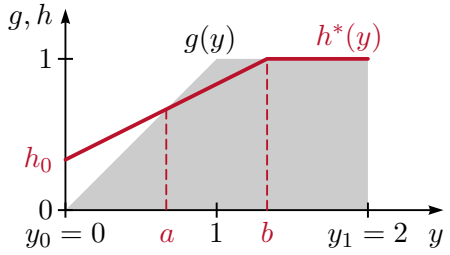


Abbildung 4.15: Optimales Höhenprofil der Straße.

4.3 Literatur

[4.1] B. C. Chachuat, „Nonlinear and Dynamic Optimization: From Theory to Practice“, abrufbar unter http://infoscience.epfl.ch/record/111939, Laboratoire d'Automatique, École Polytechnique Fédérale de Lausanne, 2007, (besucht am 28. 09. 2017).

[4.2] H.R. Schwarz und N. Köckler, *Numerische Mathematik*, 8. Aufl. Wiesbaden: Vieweg+Teubner, 2011.

[4.3] M. Hermann, *Numerik gewöhnlicher Differentialgleichungen: Anfangs- und Randwertprobleme*. München: Oldenbourg, 2004.

[4.4] J. Stoer und R. Bulirsch, *Introduction to Numerical Analysis*, 3. Aufl., Ser. Texts in Applied Mathematics 12. New York, Berlin: Springer, 2002.

[4.5] C. Lanczos, *The Variational Principles of Mechanics*, 4. Aufl. New York: Dover, 1970.

[4.6] L. Meirovitch, *Methods of Analytical Dynamics*, Ser. Advanced Engineering Series. New York: McGraw-Hill, 1970.

[4.7] H. A. Mang und G. Hofstetter, *Festigkeitslehre*, 4. Aufl. Wien, New York: Springer, 2013.

[4.8] M. I. Kamien und N. L. Schwartz, *Dynamic Optimization: The Calculus of Variations and Optimal Control in Economics and Management*, 2. Aufl. Amsterdam: Elsevier, 1991.

[4.9] J. Troutman, *Variational Calculus and Optimal Control: Optimization with Elementary Convextity*, 2. Aufl., Ser. Undergraduate Texts in Mathematics. New York: Springer, 1996.

[4.10] M. Athans und P. L. Falb, *Optimal Control: An Introduction to the Theory and Its Applications*. New York: McGraw-Hill, 1966.

[4.11] J. Macki und A. Strauss, *Introduction to Optimal Control Theory*, Ser. Undergraduate Texts in Mathematics. New York: Springer, 1982.

[4.12] E.B. Lee und L. Markus., *Foundations of optimal control theory*, Ser. The SIAM Series in Applied Mathematics. New York: John Wiley & Sons, 1967.

[4.13] R. Vinter, *Optimal Control*. Boston: Birkhäuser, 2000.

[4.14] D. Liberzon, *Calculus of Variations and Optimal Control Theory, A Concise Introduction*. Princeton, Oxford: Princeton University Press, 2012.

[4.15] L. Pontryagin, V. Boltyanskii, R. Gamkrelidze und E. Mishchenko, *The Mathematical Theory of Optimal Processes*. Pergamon Press, 1964.

[4.16] A. E. Bryson, Jr. und Y.-C. Ho, *Applied Optimal Control: Optimization, Estimation, and Control*. John Wiley & Sons, 1975.

[4.17] R. F. Hartl, S. P. Sethi und R. G. Vickson, „A Survey of the Maximum Principles for Optimal Control Problems with State Constraints“, *SIAM Review*, Jg. 37, Nr. 2, S. 181–218, 1995.

[4.18] M. Papageorgiou, M. Leibold und M. Buss, *Optimierung: Statische, dynamische, stochastische Verfahren für die Anwendung*, 4. Aufl. Springer, 2015.

[4.19] B. van Brunt, *The Calculus of Variations*, Ser. Universitext. Springer, 2004.

[4.20] O. Föllinger, *Optimale Regelung und Steuerung*, Ser. Methoden der Regelungs- und Automatisierungstechnik. R. Oldenbourg Verlag, 1994.

[4.21] D. S. Naidu, *Optimal Control Systems*, Ser. Electrical Engineering Series. CRC Press, 2003.

[4.22] D. E. Kirk, *Optimal Control Theory: An Introduction*. Dover Publications, 2004.