

Bergische Universität Wuppertal
Fachbereich C - Mathematik und Naturwissenschaften -
Arbeitsgruppe Optimierung und Approximation



Primal-Duale Innere-Punkte-Methoden

Lösungsverfahren
für
lineare Optimierungsaufgaben
lineare Komplementaritätsprobleme
Variationsungleichungen
konvexe Optimierungsaufgaben

Vorlesungsskript WS 2009/10

von

Prof. Dr. MANFRED MENDEL

KOMMENTAR: Das Skript wird parallel zur Vorlesung erstellt. Stand 01. 02. 2010:
Kapitel 1 bis Kapitel 8.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	3
1.1	Zum Begriff der Komplexität	4
1.2	Komplexität des Simplexverfahrens	5
1.3	Erste polynomiale Verfahren	5
2	Grundlagen für lineare Probleme	6
2.1	Das primal-duale Problem	6
2.2	Barrieremethoden	9
2.3	Der zentrale Pfad	14
2.4	Das Newton-Verfahren	18
2.5	Grundzüge primal-dualer Pfad-Verfolgungs-Verfahren	20
3	Pfadfolgende Innere-Punkte-Verfahren	25
3.1	Ein Verfahren mit kurzen Schritten	26
3.2	Ein Prediktor-Korrektor Verfahren	31
3.3	Ein Verfahren mit langen Schritten	35
3.4	Ergänzende Bemerkungen	39
4	Pfadfolgende Äußere-Punkte-Verfahren	41
4.1	Das grundlegende Verfahren EPF	41
4.2	Der Konvergenzbeweis	44
4.3	Weitere Konvergenzresultate	47
5	Eine Variante zu EPF und praktische Aspekte	48
5.1	Das global konvergente Verfahren EPF+	48
5.2	Ermittlung der Schrittweite	51
5.3	Systeme zur Berechnung der Suchrichtung	52
6	Glättungsverfahren	54
6.1	Glättungsfunktionen	54
6.2	Ein Glättungsverfahren	59
6.3	Zur Konvergenz des Verfahrens	62

7	Lineare Komplementaritätsprobleme	63
7.1	Einführung in LCP	63
7.2	Ein Pivotisierungsverfahren von Lemke	65
7.3	Ein unzulässiges Inneres-Punkte-Verfahren	72
7.4	Ein Glättungsverfahren	77
8	Variationsungleichungen	82
8.1	Definition und Beispiele	82
8.2	Monotone Funktionen	85
8.3	Projektionen auf konvexe Mengen	89
8.4	Existenz- und Eindeutigkeitssätze	91
8.5	Numerische Verfahren	94
8.5.1	Fixpunkt- oder Projektionsverfahren	94
8.5.2	Josephy-Newton-Verfahren	98
8.5.3	Ein Inneres-Punkte-Verfahren	101
9	Literaturverzeichnis	105

Kapitel 1

Einleitung

Für die Lösung linearer Optimierungsaufgaben hat sich die Simplexmethode (Dantzig 1947) als sehr effizient erwiesen. Praktische Untersuchungen zeigen, dass die durchschnittliche Anzahl der Iterationen bei etwa $3n$ liegt (n Anzahl der Variablen des Problems). Dagegen ist das Worst-Case-Verhalten der Simplexmethode extrem ungünstig. Klee/Minty haben 1973 eine Beispielklasse von LP-Problemen angegeben, derzufolge die Anzahl der Iterationen exponentiell anwächst. In der Folgezeit ist nach Lösungsverfahren gesucht worden, deren Komplexitätsschranke (obere Schranke für die Anzahl der Iterationen) ein polynomialer Ausdruck der Terme ist, die die Größe des LP-Problems beschreiben. Im Jahr 1979 wurde erstmals von Khachian ein Algorithmus zur Lösung linearer Optimierungsaufgaben publiziert mit polynomialer Komplexität (die so genannte Ellipsoid-Methode). Das Verfahren hat sich aber in der praktischen Anwendung nicht bewährt. 1984 hat dann Karmarkar ein Lösungsverfahren mit polynomialer Komplexität („polynomiales Verfahren“) vorgestellt, das auch in der Praxis effizient arbeitet. Dieses Verfahren stellt den Ausgangspunkt für die Entwicklung der so genannten Inneren-Punkte-Verfahren dar, von denen einige Varianten außerordentlich effizient und dem Simplexverfahren bei der Lösung großer Probleme ($m + n \geq 2500$, m Anzahl der Restriktionen) überlegen sind. Die für lineare Optimierungsaufgaben entwickelten Inneren-Punkte-Verfahren wurden im Laufe der Zeit auf weitere Problemklassen übertragen, unter anderem auf quadratische und konvexe Optimierungsaufgaben und auf Lineare Komplementaritätsprobleme.

Zugrunde gelegt wird im Folgenden ein LP-Problem im sog. „Standardformat“

$$(P) \quad \begin{cases} \min & c^T x \\ \text{s.d.} & Ax = b \\ & x \geq 0 \end{cases}$$

mit $c \in \mathbb{R}^n$, $b \in \mathbb{R}^m$, $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$.

1.1 Zum Begriff der Komplexität

Es ist von Interesse, den Rechenaufwand eines Algorithmus als Funktion der Problemgröße im „worst case“ nach oben abzuschätzen. Eine solche Schranke für den Rechenaufwand bezeichnet man als Komplexität des Verfahrens. Im Fall des Problems (P) wurde vorgeschlagen, als Problemgröße die Input-Länge L des Problems (d.h. die Anzahl der Bits, die zur Speicherung von (P) benötigt werden) zu verwenden. Komplexitätsuntersuchungen beschäftigen sich nun damit, den Rechenaufwand eines Verfahrens in der Form $C f(m, n, L)$ anzugeben (wobei f eine Funktion von m, n, L und C eine von m, n, L unabhängige Konstante ist). Der Rechenaufwand besteht dabei in der Anzahl der elementaren Rechenoperationen, die ein Algorithmus bis zum Abbruch (bei endlicher Genauigkeit) benötigt. Ist diese Anzahl durch $C f(m, n, L)$ abgeschätzt, so sagt man auch, das Verfahren besitzt die Komplexität $\mathcal{O}(f(m, n, L))$. Ist f ein Polynom in m, n, L , so liegt polynomiale Komplexität vor; man nennt das Verfahren dann auch polynomial.

In der Praxis ist eine Aufgabe der Form (P) mit rationalen Zahlen c_j, a_{ij}, b_i gegeben. Eine solche Aufgabe läßt sich äquivalent so umformen, dass alle Problemdaten ganzzahlig sind. Bei ganzzahligen Problemdaten kann man L leicht angeben.

Man beachte nun, dass man zur Speicherung einer positiven ganzen Zahl α mit $\alpha \in [2^r, 2^{r+1})$ $r+1$ binäre Bits, d.h. also $\lceil \log_2(1+\alpha) \rceil$ Bits benötigt. Unter Berücksichtigung des Vorzeichens für ganze Zahlen kann man als Input-Länge eines Problems (P) die folgende Größe bezeichnen:

$$L := \lceil 1 + \log(1 + m) \rceil + \lceil 1 + \log(1 + n) \rceil + \sum_{j=1}^n \lceil 1 + \log(1 + |c_j|) \rceil \\ + \sum_{i=1}^m \lceil 1 + \log(1 + |b_i|) \rceil + \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^m \lceil 1 + \log(1 + |a_{ij}|) \rceil$$

Es ist häufig nicht sinnvoll, den Rechenaufwand in Form der insgesamt benötigten Rechenoperationen zu beschreiben. Die im Verfahren verwendeten Prozeduren (oder Unterverfahren) können auf sehr unterschiedliche Weise umgesetzt werden, so dass eine einheitliche Angabe der Anzahl der Rechenoperationen gar nicht möglich ist. In den meisten Fällen beziehen sich Komplexitätsaussagen auf die Anzahl der Iterationen, die ein Algorithmus bis zum Abbruch benötigt. Dies gilt auch für die in diesem Skript dargestellten Algorithmen. Da die berechneten Lösungen Näherungslösungen sind, hängt die Iterationszahl von der geforderten Genauigkeit ε der Lösung ab. Aus diesem Grunde werden die Schranken in der Regel auch in Abhängigkeit von ε angegeben.

1.2 Komplexität des Simplexverfahrens

Für $\delta \in (0, 0.5)$ und beliebiges $n \in \mathbb{N}$ mit $n \geq 2$ betrachten wir folgendes Beispiel von Klee/Minty:

$$\begin{cases} \min & -x_n \\ \text{s.d.} & 0 \leq x_1 \leq 1 \\ & \delta x_{i-1} \leq x_i \leq (1 - \delta)x_{i-1} \quad (i = 2, \dots, n) \\ & x_i \geq 0 \quad (i = 1, \dots, n) \end{cases} \quad (1.1)$$

Der zulässige Bereich der Aufgabe (1.1) ist ein konvexes Polyeder in \mathbb{R}^n in Form eines deformierten Würfels (eine Skizze wird in der Vorlesung angegeben). Man sieht direkt ein, dass der Ursprung eine zulässige Basislösung ist. Startet man das Simplexverfahren damit und wählt man die Pivotspalte wie üblich danach aus, dass der Zielfunktionskoeffizient a_{0k} maximal ist, dann durchläuft das Simplexverfahren alle Ecken des Würfels, d.h. es werden 2^{n-1} Iterationen ausgeführt. Mit n wächst somit die Anzahl der Iterationen exponentiell.

Man könnte einwenden, dass bei anderer (geeigneter) Pivotwahl bereits nach einer Iteration die Optimallösung erreicht wird. Bisher konnte aber stets gezeigt werden, dass für jede vorgegebene Pivotwahl ein Beispiel existiert, so dass die Anzahl der Iterationen exponentiell mit der Problemgröße ansteigt. Das Simplexverfahren ist also kein polynomiales Verfahren.

1.3 Erste polynomiale Verfahren

Khachians Ellipsoid Algorithmus aus dem Jahre 1979 war das erste polynomiale Verfahren zur Lösung von LP-Problemen. Zu Lösung benötigt es höchstens $\mathcal{O}(n^2L)$ Iterationen. Leider ist diese Methode viel langsamer als das Simplexverfahren, sogar bei kleinen Problemen.

1984 publizierte Karmarkar einen Algorithmus zur Lösung von LP-Problemen mit einer Komplexitätsschranke von $\mathcal{O}(nL)$ Iterationen. Neben seiner guten Komplexität ist dieses Verfahren in der Lage, auch praktische Probleme effizient zu lösen. Dennoch hat sich dieses Verfahren in der Praxis nicht durchgesetzt, vermutlich deshalb, weil es eine Vorabtransformation benötigt, bevor es angewandt werden kann. Die beste bisher erreichte Komplexitätsschranke zur Lösung von LP-Problemen liegt bei $\mathcal{O}(\sqrt{n}L)$.

Auch wenn sich Verfahren mit günstiger Komplexitätsschranke in der Praxis nicht immer als effiziente Verfahren erwiesen haben, so haben die Forschungsaktivitäten auf diesem Gebiet dazu geführt, dass in den letzten Jahren sehr effiziente Verfahren zur Lösung von LP-Problemen entstanden sind, die insbesondere für große Aufgaben eine gute Alternative zum Simplexverfahren darstellen.

Kapitel 2

Grundlagen für lineare Probleme

2.1 Das primal-duale Problem

Für das LP-Problem legen wir das Standardformat zugrunde:

$$(P) \quad \begin{cases} \min & c^T x \\ \text{s.d.} & Ax = b \\ & x \geq 0 \end{cases}$$

mit $c \in \mathbb{R}^n$, $b \in \mathbb{R}^m$, $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ und $\text{Rg}(A) = m$. \mathcal{P} bezeichne den zulässigen Bereich der Aufgabe (P) . Ferner notieren wir folgende Menge

$$\overset{\circ}{\mathcal{P}} := \{x \in \mathcal{P} \mid x_i > 0 \forall i \in \{1, \dots, n\}\}$$

die Menge der *strikt zulässigen Punkte* oder *inneren Punkte* des Polyeders \mathcal{P} genannt wird. Schließlich setzen wir noch $\partial\mathcal{P} := \mathcal{P} \setminus \overset{\circ}{\mathcal{P}}$ und sprechen dabei von der Menge der Randpunkte von \mathcal{P} . Offenbar gilt:

$$\partial\mathcal{P} = \{x \in \mathcal{P} \mid \exists i \in \{1, \dots, n\} \text{ mit } x_i = 0\}$$

Die zu (P) duale Aufgabe ist gegeben durch

$$(D) \quad \begin{cases} \max & b^T y \\ \text{s.d.} & z + A^T y = c \\ & z \geq 0 \end{cases}$$

Für die duale Aufgabe führen wir entsprechende Bezeichnungen ein:

Der zulässige Bereich, die Menge der strikt zulässigen oder inneren Punkte bzw. die Menge der Randpunkte werden wie folgt notiert:

$$\begin{aligned} \mathcal{D} &:= \{(y, z) \in \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^n \mid z + A^T y = c, z \geq 0\} \\ \overset{\circ}{\mathcal{D}} &:= \{(y, z) \in \mathcal{D} \mid z > 0\} \\ \partial\mathcal{D} &:= \mathcal{D} \setminus \overset{\circ}{\mathcal{D}} \end{aligned}$$

Für einen Vektor $x \in \mathbb{R}^n$ mit $Ax = b$ und ein Paar $(y, z) \in \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^n$ mit $z + A^T y = c$ gilt folgende Beziehung:

$$b^T y = (Ax)^T y = x^T A^T y = x^T (c - z)$$

Daraus folgt für die *Dualitätslücke* („Duality-Gap“) $c^T x - b^T y$ direkt die Identität

$$c^T x - b^T y = x^T z \quad (2.1)$$

Nach dem Dualitätssatz der linearen Optimierung besitzt die primale Aufgabe (P) genau dann einen Minimierer, wenn die duale Aufgabe (D) einen Maximierer besitzt. Optimallösungen x^* bzw. (y^*, z^*) der beiden Aufgaben sind durch die Bedingung

$$c^T x^* = b^T y^* \quad \text{oder äquivalent} \quad x^{*T} z^* = 0 \quad (2.2)$$

gekennzeichnet. Wir fassen die Aufgaben (P) und (D) zu einer Aufgabe, der sog. primal-dualen Aufgabe (PD) , zusammen, die wegen (2.2) wie folgt lautet:

$$(PD) \quad \begin{cases} \min & x^T z \\ \text{s.d.} & Ax = b, x \geq 0 \\ & z + A^T y = c, z \geq 0 \end{cases}$$

Da für einen Minimierer der Aufgabe (PD) nach (2.2) $x^T z = 0$ gilt, erhalten wir das folgende Resultat.

Satz 2.1 *Ein Tripel $(x, y, z) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^n$ ist genau dann ein Minimierer der Aufgabe (PD) , wenn er dem folgenden System von Gleichungen und Ungleichungen genügt:*

$$\begin{aligned} Ax &= b, x \geq 0 \\ z + A^T y &= c, z \geq 0 \\ x^T z &= 0 \end{aligned} \quad (2.3)$$

Der Vektor x ist dann Minimierer von (P) und (y, z) Maximierer von (D) .

Die Bedingungen (2.3) sind die *KKT-Bedingungen* der Aufgabe (PD) , aber auch der Aufgaben (P) und (D) . Wegen $(x, z) \geq 0$ gilt für die letzte Gleichung die Äquivalenz:

$$x^T z = 0 \quad \iff \quad x_i z_i = 0 \quad \forall i \in \{1, \dots, n\}$$

Mit $X := \text{diag}(x_1, \dots, x_n)$ bzw. $Z := \text{diag}(z_1, \dots, z_n)$ können wir $x^T z = 0$ äquivalent auch in der Form

$$X z = 0 \quad \text{bzw.} \quad Z x = 0$$

ausdrücken.

Für die primal-duale Aufgabe (PD) bezeichnen wir den zulässigen Bereich mit \mathcal{F} , die strikt zulässigen Vektoren (oder inneren Punkte) mit $\overset{\circ}{\mathcal{F}}$ und die Randpunkte mit $\partial\mathcal{P}$. Formal sind diese Mengen wie folgt definiert:

$$\begin{aligned}\mathcal{F} &:= \{(x, y, z) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^n \mid Ax = b, x \geq 0, z + A^T y = c, z \geq 0\} \\ \overset{\circ}{\mathcal{F}} &:= \{(x, y, z) \in \mathcal{F} \mid x > 0, z > 0\} \\ \partial\mathcal{F} &:= \mathcal{F} \setminus \overset{\circ}{\mathcal{F}}\end{aligned}$$

Wir stellen ein Hilfsmittel bereit, das häufig Verwendung findet. Benötigt werden dazu der Kern von A und der Bildraum von A^T , die wie folgt bezeichnet werden:

$$\begin{aligned}\mathcal{N}(A) &:= \{x \in \mathbb{R}^n \mid Ax = 0\} \\ \mathcal{R}(A^T) &:= \{u \in \mathbb{R}^n \mid \exists y \in \mathbb{R}^m \text{ mit } u = A^T y\}\end{aligned}$$

Lemma 2.1 Sei $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ mit $Rg(A) = m$.

a) Der Vektorraum \mathbb{R}^n ist orthogonale Zerlegung von $\mathcal{N}(A)$ und $\mathcal{R}(A^T)$, d.h. es gilt: $\mathbb{R}^n = \mathcal{N}(A) \oplus \mathcal{R}(A^T)$ mit $\mathcal{N}(A) \perp \mathcal{R}(A^T)$.

b) Die Projektoren P_A und \bar{P}_A von \mathbb{R}^n auf $\mathcal{N}(A)$ bzw. $\mathcal{R}(A^T)$ lauten:

$$P_A = I - A^T(AA^T)^{-1}A \quad \text{bzw.} \quad \bar{P}_A = A^T(AA^T)^{-1}A$$

BEWEIS: a) Als erstes wird gezeigt, dass \mathbb{R}^n die direkte Summe von $\mathcal{N}(A)$ und $\mathcal{R}(A^T)$ ist. Sei $u \in \mathcal{N}(A) \cap \mathcal{R}(A^T)$ gewählt. Dann existiert ein $y \in \mathbb{R}^m$ mit $u = A^T y$. Wegen $u \in \mathcal{N}(A)$ folgt nun: $AA^T y = Au = 0$. Da wegen $Rg(A) = m$ die Matrix AA^T regulär ist, folgt daraus $y = 0$, somit auch $u = 0$, somit $\mathcal{N}(A) \cap \mathcal{R}(A^T) = \{0\}$.

Es ist $\mathcal{N}(A) \oplus \mathcal{R}(A^T) \subseteq \mathbb{R}^n$. Dass dabei das Gleichheitszeichen gilt, zeigt folgende Dimensionsbetrachtung: $\dim \mathcal{N}(A) = n - Rg(A) = n - m$ und $\dim \mathcal{R}(A^T) = m$.

Zu zeigen ist noch, dass die beiden Räume zueinander orthogonal sind. Sei dazu $x \in \mathcal{N}(A)$ und $u \in \mathcal{R}(A^T)$ gewählt. Dann gilt mit $u = A^T y$ wegen $x \in \mathcal{N}(A)$: $x^T u = x^T(A^T y) = y^T(Ax) = 0$, also sind x und u orthogonal.

b) Nach Teil a) kann jeder Vektor $v \in \mathbb{R}^n$ eindeutig dargestellt werden durch $v = x + u$ mit $x \in \mathcal{N}(A)$ und $u = A^T y \in \mathcal{R}(A^T)$. Anwendung von P_A auf v ergibt:

$$\begin{aligned}P_A v &= P_A x + P_A u \\ &= x - A^T(AA^T)^{-1}Ax + u - A^T(AA^T)^{-1}Au\end{aligned}$$

Da $Ax = 0$ und $u = A^T y$ ist und weiter $(AA^T)^{-1}AA^T = I$ gilt, erhalten wir daraus:

$$P_A v = x + u - A^T y = x$$

Also ist P_A die Projektion von \mathbb{R}^n auf $\mathcal{N}(A)$. Damit ist $\bar{P}_A = I - P_A$ die Projektion auf den orthogonalen Komplementärraum $\mathcal{R}(A^T)$. \square

2.2 Barrieremethoden

Barrieremethoden bestehen darin, zur Zielfunktion einer gegebenen Aufgabe einen sogenannten Barriereterm hinzuzuaddieren, der verhindern soll, dass man sich zu sehr oder zu schnell dem Rand des zulässigen Bereichs von Innen her annähert. Die wesentliche Eigenschaft eines Barriereterms besteht darin, dass seine Funktionswerte gegen Unendlich anwachsen, wenn man sich dem Rand des zulässigen Bereichs annähert. Auf diese Weise soll die strikte Zulässigkeit der Iterierten gewährleistet werden.

Zur Konkretisierung dieser Idee betrachten wir eine Optimierungsaufgabe in der Gestalt

$$(NP) \quad \begin{cases} \min & f(x) \\ \text{s.d.} & x \in \mathcal{X} \end{cases}$$

Dabei ist \mathcal{X} eine Mannigfaltigkeit in \mathbb{R}^n mit Rand $\partial\mathcal{X}$ und $\overset{\circ}{\mathcal{X}} \neq \emptyset$. f sei eine stetige Funktion von \mathcal{X} nach \mathbb{R} .

Eine stetige Funktion $p : \overset{\circ}{\mathcal{X}} \rightarrow \mathbb{R}$ heißt Barrierefunktion für die Aufgabe (NP) , wenn sie die folgende Eigenschaft besitzt:

- für jede Folge $\{x^k\}$ in $\overset{\circ}{\mathcal{X}}$, die gegen einen Punkt $\bar{x} \in \partial\mathcal{X}$ konvergiert, gilt: $p(x^k) \mapsto \infty$.

Ist p eine Barrierefunktion für (NP) und ist $\mu \in (0, \infty)$, so wird

$$(NP_\mu) \quad \begin{cases} \min & f(x) + \mu p(x) \\ \text{s.d.} & x \in \mathcal{X} \end{cases}$$

ein zu (NP) gehöriges Barriereproblem zum Parameter μ genannt. Die Wahl von $\mu \in (0, \infty)$ steuert den Einfluß, den p auf die Zielfunktion hat: Bei kleinem μ ist der Einfluß von $p(x)$ gering, bei großem μ entsprechend größer. Werden die Iterierten in $\overset{\circ}{\mathcal{X}}$ berechnet, so werden sie durch den Einfluß der Barrierefunktion mehr oder weniger vom Rand des zulässigen Bereichs weggehalten.

Beispiel 2.1 Wir geben für die linearen Optimierungsprobleme (P) , (D) und (PD) zugehörige Barriereprobleme an. Für das Polyeder $\mathcal{P} = \{x \in \mathbb{R}^n \mid Ax = b, x \geq 0\}$ wird durch

$$p : \overset{\circ}{\mathcal{P}} \rightarrow \mathbb{R}, \quad p(x) := - \sum_{i=1}^n \ln x_i$$

eine Barrierefunktion definiert. Das zugehörige Barriereproblem lautet somit mit $\mu \in (0, \infty)$:

$$(P_\mu) \quad \begin{cases} \min & c^T x + \mu p(x) \\ \text{s.d.} & Ax = b \\ & x > 0 \end{cases}$$

Die Barriereprobleme zu (D) und (PD) lauten entsprechend:

$$(D_\mu) \quad \begin{cases} \min & -b^T y + \mu p(z) \\ \text{s.d.} & z + A^T y = c \\ & z > 0 \end{cases}$$

$$(PD_\mu) \quad \begin{cases} \min & x^T z + \mu (p(x) + p(z)) \\ \text{s.d.} & Ax = b, x > 0 \\ & z + A^T y = c, z > 0 \end{cases}$$

Dabei ist $p(z)$ gegeben durch $p(z) := -\sum_{i=1}^n \ln z_i$. Die in diesen Beispielen definierte Barrierefunktion wird logarithmische Barrierefunktion genannt. Im Folgenden bezeichnen p stets eine logarithmische Barrierefunktion. \square

Bemerkungen:

1. Jede der Aufgaben (P_μ) , (D_μ) bzw. (PD_μ) ist nur dann definiert, wenn jeweils die Menge der strikt zulässigen Lösungen, also $\overset{\circ}{\mathcal{P}}$, $\overset{\circ}{\mathcal{D}}$ bzw. $\overset{\circ}{\mathcal{F}}$ nichtleer ist.
2. Für je zwei Punkte $(x, y, z), (x^0, y^0, z^0) \in \mathcal{F}$ gilt wegen (2.1):

$$x^T z^0 + (x^0)^T z = c^T x - b^T y^0 + c^T x^0 - b^T y = x^T z + (x^0)^T z^0 \quad (2.4)$$

Die Zielgröße $x^T z$ kann also durch den linearen Term $x^T z^0 + (x^0)^T z$ (bei festem x^0, z^0) ersetzt werden. Wir können also die Aufgabe (PD_μ) in der folgenden Form schreiben:

$$(PD_\mu) \quad \begin{cases} \min & (x^T z^0 + \mu p(x)) + ((x^0)^T z + \mu p(z)) \\ \text{s.d.} & Ax = b, x > 0, \quad z + A^T y = c, z > 0 \end{cases}$$

Daraus ist ersichtlich, dass (PD_μ) zerlegbar ist in die beiden Probleme (P_μ) und (D_μ) . (PD_μ) zu lösen bedeutet also, (P_μ) und (D_μ) zu lösen und umgekehrt.

3. Die Hessematrix der Zielgröße $x^T z + \mu (p(x) + p(z))$ ist gegeben durch

$$\mu \operatorname{diag} \left(\frac{1}{x_1^2}, \dots, \frac{1}{x_n^2}, \frac{1}{z_1^2}, \dots, \frac{1}{z_n^2} \right)$$

Diese Matrix ist für jeden Punkt (x, y, z) mit $x > 0$ und $z > 0$ positiv definit. Damit ist die Zielfunktion auf $\overset{\circ}{\mathcal{F}}$ strikt konvex. Wenn also das Problem (PD_μ) einen Minimierer besitzt, dann ist dieser eindeutig bestimmt. Entsprechendes gilt für die Aufgaben (P_μ) und (D_μ) .

4. Da wir $\operatorname{Rg}(A) = m$ voraussetzen, sind die Spaltenvektoren der Matrix A^T linear unabhängig. Damit ist y in der Gleichung $A^T y = z - c$ durch den Vektor der rechten Seite eindeutig festgelegt. Zu gegebenem z ist also y in der Gleichung $z + A^T y = c$ eindeutig bestimmt.

Das gemeinsame KKT-System der Probleme (P) , (D) und (PD) wurde in (2.3) angegeben. Das KKT-System der Probleme (P_μ) , (D_μ) und (PD_μ) ist zu diesem verwandt. Dabei ist $e := (1, \dots, 1)^T$ und $X := \text{diag}(x_1, \dots, x_n)$.

Satz 2.2 Für jeden Parameter $\mu \in (0, \infty)$ besitzen die Probleme (P_μ) , (D_μ) und (PD_μ) ein KKT-System, das äquivalent ist zu

$$\begin{aligned} Ax &= b, \quad x > 0 \\ z + A^T y &= c, \quad z > 0 \\ Xz &= \mu e \end{aligned} \tag{2.5}$$

Jeder Punkt $(x(\mu), y(\mu), z(\mu))$, der das System (2.5) erfüllt, ist also eine Optimallösung von (PD_μ) , wobei $x(\mu)$ eine solche von (P_μ) und $(y(\mu), z(\mu))$ eine solche von (D_μ) ist.

BEWEIS: Betrachte (P_μ) in folgender Formulierung:

$$(P_\mu) \quad \begin{cases} \min & c^T x - \mu \sum_{i=1}^n \ln x_i =: f_\mu(x) \\ \text{s.d.} & h(x) := b - Ax = 0 \\ & g(x) := -x < 0 \end{cases}$$

Mit den Komponenten h_i und g_j von h und g lauten die KKT-Bedingungen für (P_μ) wie folgt: $\exists y \in \mathbb{R}^m$ und $\tilde{z} \in \mathbb{R}^n$ mit $\tilde{z} \geq 0$, so dass gilt:

$$\begin{aligned} -\nabla f_\mu(x) &= \sum_{i=1}^m y_i \nabla h_i(x) + \sum_{j=1}^n \tilde{z}_j \nabla g_j(x) \\ h(x) &= 0, \quad g(x) < 0 \\ \tilde{z}^T g(x) &= 0 \end{aligned} \tag{2.6}$$

In dieses System werden nun die Ableitungen eingesetzt, die wie folgt lauten:

$$\nabla f_\mu(x) = c - \mu \left(\frac{1}{x_1}, \dots, \frac{1}{x_n} \right)^T = c - \mu X^{-1} e, \quad \nabla h_i(x) = -A_i^T, \quad \nabla g_j(x) = -e_j$$

Damit ist das System (2.6) äquivalent zu

$$\begin{aligned} -c + \mu X^{-1} e &= -A^T y - \tilde{z} \\ Ax &= b, \quad x > 0 \\ \tilde{z}^T x &= 0 \end{aligned} \tag{2.7}$$

Wegen $\tilde{z} \geq 0$, $x > 0$ folgt aus $\tilde{z}^T x = 0$: $\tilde{z} = 0$. Setzt man noch $z := \mu X^{-1} e$, so ist (2.7) äquivalent zu

$$\begin{aligned} z + A^T y &= c, \quad z > 0 \\ Ax &= b, \quad x > 0 \\ Xz &= \mu e \end{aligned}$$

Auf ähnliche Weise kann man begründen, dass die KKT-Bedingungen von (D_μ) und (PD_μ) zu (2.5) äquivalent sind (vergl. [1], Satz 1.3). \square

Da die Probleme (P_μ) , (D_μ) und (PD_μ) ein gemeinsames KKT-System besitzen, gilt für jedes $\mu \in (0, \infty)$: Besitzt eines dieser Probleme eine Optimallösung, so trifft dies auch auf die beiden anderen Probleme zu. Da die Zielfunktion streng konvex ist, ist im Falle der Existenz die Optimallösung jeder dieser Aufgaben eindeutig bestimmt.

Von Interesse ist eine Bedingung, die für jedes $\mu \in (0, \infty)$ die Existenz eines Minimierers der Aufgabe (PD_μ) gewährleistet. Besitzt die Aufgabe (PD) eine strikt zulässige Lösung, d.h. gilt

$$\overset{\circ}{\mathcal{F}} \neq \emptyset \text{ oder äquivalent } \overset{\circ}{\mathcal{P}} \neq \emptyset \wedge \overset{\circ}{\mathcal{D}} \neq \emptyset$$

so sagt man, (PD) genügt der **Inneren-Punkte-Annahme (IPA)**.

Satz 2.3 Genau dann besitzt die Aufgabe (PD_μ) für jedes $\mu \in (0, \infty)$ einen Minimierer, wenn (PD) die Innere-Punkte-Annahme erfüllt.

BEWEIS: Die IPA sei erfüllt, dann gibt es einen Punkt $(x^0, y^0, z^0) \in \mathcal{F}$ mit $x^0 > 0$ und $z^0 > 0$. Für einen beliebigen Punkt $(x, y, z) \in \mathcal{F}$ gilt dann wegen (2.4)

$$x^T z = (z^0)^T x + (x^0)^T z - (x^0)^T z^0$$

so dass man die Zielfunktion von (PD_μ) ersetzen kann durch

$$f_\mu(x, z) := (z^0)^T x - \mu \sum_{i=1}^n \ln x_i + (x^0)^T z - \mu \sum_{i=1}^n \ln z_i$$

Die Funktion f_μ ist also eine Summe von Funktionen des Typs

$$\varphi : (0, \infty) \mapsto \mathbb{R}, \quad \varphi(t) := \alpha t - \mu \ln t$$

Dabei ist $\alpha = x_i^0$ oder $\alpha = z_i^0$, $t = x_i$ oder $t = z_i$. Wegen $\varphi''(t) = \mu/t^2$ ist die Funktion φ streng konvex auf $(0, \infty)$ und besitzt ferner die Eigenschaften:

$$\lim_{t \rightarrow 0^+} \varphi(t) = \infty = \lim_{t \rightarrow \infty} \varphi(t)$$

Insbesondere ist φ nach unten beschränkt.

Zeige: Für festes $\bar{w} := (\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}) \in \overset{\circ}{\mathcal{F}}$ ist folgende Levelmenge kompakt in $\overset{\circ}{\mathcal{F}}$:

$$U_{\bar{w}} := \{w := (x, y, z) \in \overset{\circ}{\mathcal{F}} \mid f_\mu(x, z) \leq f_\mu(\bar{x}, \bar{z})\}$$

1) $U_{\bar{w}}$ ist abgeschlossen in $\overset{\circ}{\mathcal{F}}$:

Sei $\{w^n\}$ eine Folge in $U_{\bar{w}}$ mit $w^n \mapsto \tilde{w}$. Da \mathcal{F} abgeschlossen ist, ist $\tilde{w} \in \mathcal{F}$. \tilde{w} kann nicht in $\partial\mathcal{F}$ liegen, weil sonst $f_\mu(x^n, z^n) \mapsto \infty$ gelten würde, was aber $f_\mu(x^n, z^n) \leq f_\mu(\bar{x}, \bar{z}) \forall n$ widerspricht. Ferner muss $f_\mu(\tilde{x}, \tilde{z}) \leq f_\mu(\bar{x}, \bar{z})$ gelten. Damit ist $\tilde{w} \in U_{\bar{w}}$ gezeigt.

2) $U_{\bar{w}}$ ist beschränkt:

Wäre $U_{\bar{w}}$ unbeschränkt, so gäbe es eine Folge $\{w^n\}$ in $U_{\bar{w}}$ mit $\|w^n\|_\infty \mapsto \infty$. Dann gibt es eine Teilfolge w^{n_k} , so dass eine Koordinate gegen ∞ strebt, gelte etwa $x_1^{n_k} \mapsto \infty$. Dann folgt aber auch $z_1^0 x_1^{n_k} - \mu \ln x_1^{n_k} \mapsto \infty$. Somit wäre aber auch $f_\mu(x^n, z^n)$ unbeschränkt, im Widerspruch zu $f_\mu(x^n, z^n) \leq f_\mu(\bar{x}, \bar{z})$.

Die Menge aller (x, z) mit $(x, y, z) \in U_{\bar{w}}$ ist somit kompakt.

Wegen $y = (AA^T)^{-1}A(c - z)$ ist auch $U_{\bar{w}}$ kompakt.

Die stetige Funktion f_μ nimmt auf der kompakten Menge $U_{\bar{w}}$ ein globales Minimum in einem Punkt $w^* := (x^*, y^*, z^*)$ an. Nach Definition von $U_{\bar{w}}$ ist w^* globales Minimum auf $\overset{\circ}{\mathcal{F}}$.

Ist umgekehrt w^* globales Minimum auf $\overset{\circ}{\mathcal{F}}$, so ist offenbar w^* strikt zulässig und die IPA erfüllt. \square

Die bisherigen Überlegungen zur Lösung der Aufgabe (PD_μ) werden in folgendem Theorem zusammengefasst, wobei $w(\mu) := (x(\mu), y(\mu), z(\mu))$ gesetzt ist.

Theorem 2.1 *Äquivalent sind folgende Aussagen:*

- a) Die Aufgabe (PD) erfüllt die Innere-Punkte-Annahme.
- b) Für jedes $\mu \in (0, \infty)$ besitzt (PD_μ) genau einen Minimierer $w(\mu)$.
- c) Für jedes $\mu \in (0, \infty)$ besitzt das KKT-System (2.5) genau eine Lösung $w(\mu)$.

BEWEIS: Die Äquivalenz $a) \iff b)$ wird in Satz 2.3, diejenige von $b) \iff c)$ wird in Satz 2.2 festgestellt. \square

Ist für die Aufgabe (PD) die Innere-Punkte-Annahme erfüllt, so gilt für jeden Minimierer $(x(\mu), y(\mu), z(\mu))$ von (PD_μ) auf Grund der KKT-Bedingungen (2.5) die Gleichung

$$X(\mu) z(\mu) = \mu e \quad (\mu \in (0, \infty)) \quad (2.8)$$

Da die rechte Seite in (2.8) unbeschränkt ist, trifft dies auch auf die linke Seite zu. Dies zeigt, dass (unter der IPA) das Polyeder \mathcal{F} unbeschränkt ist. Wir zeigen nun, dass für festes $\bar{w} := (\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}) \in \mathcal{F}$ das Teilpolyeder

$$\mathcal{F}_{\bar{w}} := \{(x, y, z) \in \mathcal{F} \mid x^T z \leq \bar{x}^T \bar{z}\}$$

beschränkt ist (s. Skizze).

Satz 2.4 *Ist $\overset{\circ}{\mathcal{F}} \neq \emptyset$, dann ist für jedes $\bar{w} \in \mathcal{F}$ das Teilpolyeder $\mathcal{F}_{\bar{w}}$ kompakt.*

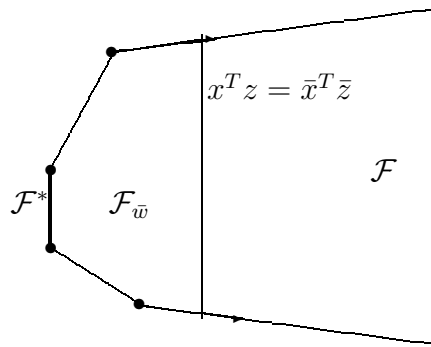
BEWEIS: Sei $w^0 = (x^0, y^0, z^0) \in \overset{\circ}{\mathcal{F}}$ fest gewählt und sei $w = (x, y, z) \in \mathcal{F}$ mit $x^T z \leq \bar{x}^T \bar{z}$. Dann gilt unter Berücksichtigung von (2.4):

$$\begin{aligned} (z^0)^T x + (x^0)^T z &= x^T z + (x^0)^T z^0 \\ &\leq \bar{x}^T \bar{z} + (x^0)^T z^0 \end{aligned}$$

Die Zahl $\gamma := \min\{x_i^0, z_i^0 \mid i \in \{1, \dots, n\}\}$ ist positiv wegen $x^0 > 0$ und $z^0 > 0$. Dann gilt für jede Komponente x_i :

$$0 \leq x_i \leq \frac{1}{z_i^0} [\bar{x}^T \bar{z} + (x^0)^T z^0] \leq \frac{1}{\gamma} [\bar{x}^T \bar{z} + (x^0)^T z^0] =: k$$

Ebenso ist zu begründen, dass $0 \leq z_i \leq k$ ist für alle $i = 1, \dots, n$. Durchläuft nun z eine beschränkte Menge, so auch $y = (AA^T)^{-1}A(c - z)$. Damit ist die Menge $\mathcal{F}_{\bar{w}}$ beschränkt. Dass sie abgeschlossen ist, folgt unmittelbar aus ihrer Definition. \square



Ähnlich begründet man, dass unter der IPA die folgenden Teilpolyeder von \mathcal{P} bzw. \mathcal{D} kompakt sind (Übungsaufgabe):

$$\mathcal{P}_{\bar{x}} := \{x \in \mathcal{P} \mid c^T x \leq c^T \bar{x}\}, \quad \mathcal{D}_{(\bar{y}, \bar{z})} := \{(y, z) \in \mathcal{D} \mid b^T y \geq b^T \bar{y}\}$$

2.3 Der zentrale Pfad

Die KKT-Bedingungen (2.5) der Aufgabe (PD_μ) sollen kompakter formuliert werden. Zu diesem Zweck definieren wir die Funktion $F_\mu : \mathbb{R}_{++}^n \times \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}_{++}^{n+1} \mapsto \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^n$ (mit $\mathbb{R}_{++} := (0, \infty)$) durch

$$F_\mu(x, y, z) := \begin{pmatrix} A^T y + z - c \\ Ax - b \\ Xz - \mu e \end{pmatrix}$$

Damit können die KKT-Bedingungen (2.5) neu formuliert werden in der Gestalt

$$F_\mu(x, y, z) = 0, \quad x > 0, \quad z > 0 \tag{2.9}$$

Lemma 2.2 Die Jacobi-Matrix der Funktion F_μ ist gegeben durch

$$F'_\mu(x, y, z) = \begin{pmatrix} 0 & A^T & I \\ A & 0 & 0 \\ Z & 0 & X \end{pmatrix}$$

Für jeden Vektor (x, y, z) mit $x > 0, z > 0$ ist diese Matrix regulär.

BEWEIS: Sei $p := (p^1, p^2, p^3)$ ein beliebiger Vektor aus $\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^n$ mit

$$F'_\mu(x, y, z) p = 0$$

Nach Definition von $F'_\mu(x, y, z)$ folgt daraus:

$$A^T p^2 + p^3 = 0 \quad (2.10)$$

$$A p^1 = 0 \quad (2.11)$$

$$Z p^1 + X p^3 = 0 \quad (2.12)$$

Wir multiplizieren die erste Gleichung von links mit $(p^1)^T$, dann folgt unter Berücksichtigung von (2.11):

$$0 = (p^1)^T A^T p^2 + (p^1)^T p^3 = (p^1)^T p^3$$

Die letzte Gleichung ist äquivalent zu $-X^{-1} Z p^1 = p^3$. Multipliziert man diese Gleichung mit $(p^1)^T$, so folgt:

$$(p^1)^T X^{-1} Z p^1 = 0$$

Da die Matrix $X^{-1} Z$ positiv definit ist, folgt daraus: $p^1 = 0$. Dann ist aber auch $p^3 = 0$. Aus (2.10) folgt damit $A^T p^2 = 0$. Da wir A generell mit vollem Zeilenrang vorausgesetzt haben, folgt schließlich auch $p^2 = 0$, insgesamt also $p = 0$. Somit ist die Matrix $F'_\mu(x, y, z)$ regulär. \square

Unter der Voraussetzung $\mathcal{F}^\circ \neq \emptyset$ (IPA) besitzt das KKT-System

$$F_\mu(x, y, z) = 0, \quad x > 0, \quad z > 0 \quad (2.13)$$

der Aufgabe (PD_μ) für jedes $\mu \in \mathbb{R}_{++}$ genau eine Lösung. Nach Lemma 2.2 ist die Jacobi-Matrix von $F_\mu(x, y, z)$ regulär. Mit dem Satz über implizite Funktionen folgt, dass es für jedes (feste) μ eine Umgebung $U_\varepsilon(\mu) \subseteq \mathbb{R}_{++}$ gibt, so dass eine stetig differenzierbare Funktion

$$w : U_\varepsilon(\mu) \mapsto \mathcal{F}, \quad w(\tau) = (x(\tau), y(\tau), z(\tau)) \quad (\tau \in U_\varepsilon(\mu))$$

existiert mit $F_\mu(x(\tau), y(\tau), z(\tau)) = 0$ für alle $\tau \in U_\varepsilon(\mu)$. Da dies für beliebiges $\mu \in \mathbb{R}_{++}$ gilt, kann w als Funktion auf ganz \mathbb{R}_{++} fortgesetzt werden. Somit gibt es eine stetig differenzierbare Funktion

$$w : \mathbb{R}_{++} \mapsto \mathcal{F}, \quad w(\mu) = (x(\mu), y(\mu), z(\mu))$$

mit $F_\mu(x(\mu), y(\mu), z(\mu)) = 0$ für alle $\mu \in \mathbb{R}_{++}$. Die Menge der Bildpunkte der Funktion w , also

$$\Gamma := \{w(\mu) \mid \mu \in \mathbb{R}_{++}\} \subset \mathcal{F}$$

heißt **zentraler Pfad** der Aufgabe (PD) . Die KKT-Bedingungen (2.5) bzw. (2.13) von (PD_μ) werden auch **zentrale Pfad-Bedingungen** genannt.

Im Folgenden soll gezeigt werden, dass die Punkte $w(\mu)$ des zentralen Pfades für $\mu \mapsto 0$ dem optimalen Randpolyeder der Aufgabe (PD) beliebig nahe kommen. Zur Formulierung der entsprechenden Aussage gehen wir kurz auf eine Begriffsbildung ein, die in der Optimierung häufiger eine Rolle spielt. Ist (x^*, y^*, z^*) eine Optimallösung von (PD), so gilt nach (2.3)

$$x_i^* z_i^* = 0 \quad \forall i = 1, \dots, n$$

Also ist $x_i^* = 0$ oder $z_i^* = 0$ für jedes $i \in \{1, \dots, n\}$. Eine Optimallösung, in der stets eine der beiden Zahlen ungleich null ist, erhält eine besondere Bezeichnung.

Definition 2.1 Ist (x^*, y^*, z^*) eine Optimallösung von (PD), so dass $x_i^* + z_i^* > 0$ für jedes $i \in \{1, \dots, n\}$ gilt, so wird diese Lösung strikt komplementär genannt.

Satz 2.5 Es gelte $\overset{\circ}{\mathcal{F}} \neq \emptyset$ und es sei $\{\mu_k\} \subseteq \mathbb{R}_{++}$ eine Folge mit $\mu_k \mapsto 0$. Dann ist jeder Häufungspunkt der Folge der Pfadpunkte $w(\mu_k)$ eine strikt komplementäre Optimallösung der Aufgabe (PD).

BEWEIS: a) Sei $\{\mu_k\}$ eine Folge in \mathbb{R}_{++} mit $\mu_k \mapsto 0$. Da $w(\mu_k) = (x(\mu_k), y(\mu_k), z(\mu_k))$ die zentrale Pfad-Bedingungen (2.5) erfüllt, gilt:

$$x(\mu_k)^T z(\mu_k) = n\mu_k \tag{2.14}$$

Nun gibt es ein $\bar{\mu} \in \mathbb{R}_{++}$ mit $n\mu_k \leq \bar{\mu}$ für alle $k \in \mathbb{N}$. Damit gilt:

$$w(\mu_k) \in \mathcal{F}_{\bar{\mu}} := \{(x, y, z) \in \mathcal{F} \mid x^T z \leq \bar{\mu}\}$$

Da das Teilpolyeder $\mathcal{F}_{\bar{\mu}}$ von \mathcal{F} nach Satz 2.4 kompakt ist, besitzt die Folge $\{w(\mu_k)\}$ einen Häufungspunkt $w^* := (x^*, y^*, z^*)$ in \mathcal{F} . Damit gibt es eine Teilfolge $\{w(\mu_{k_\nu})\}$ mit $w(\mu_{k_\nu}) \mapsto w^*$. Mit (2.14) folgt aber

$$(x^*)^T z^* = \lim_{\nu \rightarrow \infty} x(\mu_{k_\nu})^T z(\mu_{k_\nu}) = \lim_{\nu \rightarrow \infty} n\mu_{k_\nu} = 0$$

Somit genügt w^* den KKK-Bedingungen der Aufgabe (PD) (vergl. (2.3)), ist also eine Optimallösung von (PD).

b) Zu zeigen ist noch, dass w^* strikt komplementär ist. Da die Punkte $w(\mu_k), w^*$ in \mathcal{F} liegen, erfüllen sie die Bedingungen $Ax = b$ und $z + A^T y = b$, so dass gilt:

$(x(\mu_k) - x^*) \in \mathcal{N}(A)$ und $(z(\mu_k) - z^*) \in \mathcal{R}(A^T)$. Wegen $\mathcal{N}(A) \perp \mathcal{R}(A^T)$ erhält man daraus: $(x(\mu_k) - x^*)^T (z(\mu_k) - z^*) = 0$. Für die Teilfolge $\{\mu_{k_\nu}\}$ folgt daraus:

$$(x^*)^T z(\mu_{k_\nu}) + (z^*)^T x(\mu_{k_\nu}) = x(\mu_{k_\nu})^T z(\mu_{k_\nu}) + (x^*)^T z^* = n\mu_{k_\nu}$$

Lässt man in den Summen Terme mit $x_i^* = 0$ und $z_i^* = 0$ weg, so folgt:

$$\sum_{i: x_i^* > 0} x_i^* z_i(\mu_{k_\nu}) + \sum_{i: z_i^* > 0} z_i^* x_i(\mu_{k_\nu}) = n\mu_{k_\nu}$$

Division dieser Gleichung durch $\mu_{k_\nu} = x_i(\mu_{k_\nu})z_i(\mu_{k_\nu})$ ergibt:

$$\sum_{i: x_i^* > 0} \frac{x_i^*}{x_i(\mu_{k_\nu})} + \sum_{i: z_i^* > 0} \frac{z_i^*}{z_i(\mu_{k_\nu})} = n$$

Für $\nu \mapsto \infty$ folgt daraus $\sum_{i: x_i^* > 0} 1 + \sum_{i: z_i^* > 0} 1 = n$, was äquivalent ist zu

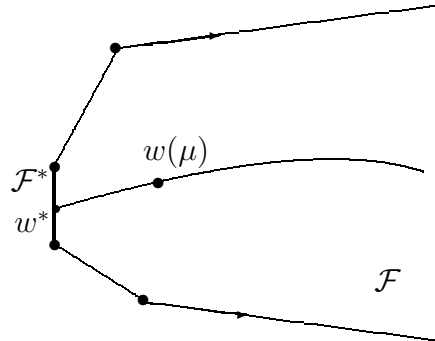
$$|\{i \in \{1, \dots, n\} \mid x_i^* > 0\}| + |\{i \in \{1, \dots, n\} \mid z_i^* > 0\}| = n$$

womit die strikte Komplementariät der Lösung (x^*, y^*, z^*) bewiesen ist. \square

Die Aussage des Satzes 2.5 läßt sich deutlich verschärfen, nämlich in der Weise, dass für jede Folge $\mu_k \mapsto 0$ die Folge $w(\mu_k)$ einen Grenzwert w^* besitzt, und für verschiedene Folgen diese Grenzwerte identisch sind. Man kann also das folgende schärfere Resultat beweisen.

Satz 2.6 *Es gelte $\overset{\circ}{\mathcal{F}} \neq \emptyset$. Dann gibt es genau eine strikt komplementäre Optimallösung w^* , so dass die zentralen Pfadpunkte $w(\mu)$ für $\mu \mapsto 0$ gegen w^* konvergieren.*

Für einen BEWEIS dieser Aussage, die wir im Folgenden nicht benötigen, wird auf [1], Satz 1.4, verwiesen.



Dabei stellt \mathcal{F}^* das Teilpolyeder der Optimallösungen der Aufgabe (PD) dar. Die zentralen Ergebnisse dieses Abschnitts fassen wir in den folgenden drei Punkten zusammen:

Das Problem (PD) besitze strikt zulässige Lösungen, d.h. $\overset{\circ}{\mathcal{F}}$ sei nichtleer. Dann gelten die folgenden Aussagen:

- Für jedes $\mu \in (0, \infty)$ besitzen die zentralen Pfad-Bedingungen genau eine Lösung $(x(\mu), y(\mu), z(\mu))$ in $\overset{\circ}{\mathcal{F}}$.
- Durch die Zuordnung $\mu \mapsto (x(\mu), y(\mu), z(\mu))$ für $\mu \in (0, \infty)$ wird ein stetig differenzierbarer Pfad in $\overset{\circ}{\mathcal{F}}$ definiert.
- Für $\mu \downarrow 0$ konvergieren die Pfadpunkte $(x(\mu), y(\mu), z(\mu))$ gegen eine strikt komplementäre Optimallösung (x^*, y^*, z^*) des linearen Problems (PD).

2.4 Das Newton-Verfahren

Innere-Punkte-Methoden beruhen darauf, dass man auf die Gleichungen, die innerhalb der zentralen Pfadbedingungen auftreten, das Newton-Verfahren anwendet. Dieses wohl bekannteste Verfahren zur Lösung nichtlinearer Gleichungssysteme dürfte aus der Numerik bereits bekannt sein, es wird hier nochmals in seinen Grundzügen wiedergegeben.

Sei $F : \mathbb{R}^p \mapsto \mathbb{R}^p$ eine stetig differenzierbare Abbildung. Gesucht sei eine Lösung $x^* \in \mathbb{R}^p$ des nichtlinearen Gleichungssystems

$$F(x) = 0 \tag{2.15}$$

Sei x^k eine Näherung an eine Lösung x^* des Gleichungssystems (2.15). Zur Bestimmung einer besseren Lösung x^{k+1} linearisiert man die Funktion F zunächst um den aktuellen Iterationspunkt; wir bezeichnen die linearisierte Funktion mit F_k . Sie ist definiert durch

$$F_k(x) := F(x^k) + F'(x^k)(x - x^k)$$

Da wir das nichtlineare System $F(x) = 0$ nur schwer lösen können, approximieren wir es in der k -ten Iteration durch das lineare Gleichungssystem

$$F_k(x) = 0 \text{ oder äquivalent: } F(x^k) + F'(x^k)(x - x^k) = 0$$

Die Lösung dieses Systems ergibt dann die neue Iterierte x^{k+1} . Durch Auflösen folgt:

$$x^{k+1} = x^k - F'(x^k)^{-1}F(x^k) \tag{2.16}$$

sofern die Inverse $F'(x^k)^{-1}$ existiert. Natürlich berechnet man wegen des erheblichen Aufwands im Allgemeinen nicht explizit die Inverse. Vielmehr berechnet man einen sog. Korrekturvektor Δ^k als Lösung des linearen Gleichungssystems

$$F'(x^k) \Delta = -F(x^k) \tag{2.17}$$

und setzt anschließend

$$x^{k+1} = x^k + \Delta^k$$

Das liefert offenbar den gleichen Vektor x^{k+1} wie in (2.16). Das Gleichungssystem (2.17) wird häufig als **Newtongleichung** bezeichnet. Die Vorgehensweise wird dann iterativ fortgesetzt und man erhält auf diese Weise das Newton-Verfahren zur Lösung des Gleichungssystems (2.15).

Algorithmus NV(Newton-Verfahren)

- (0) Wähle $x^0 \in \mathbb{R}^p$, und setze $k := 0$.
- (1) Ist $F(x^k) = 0$: STOP.
- (2) Bestimme Δ^k als Lösung des linearen Gleichungssystems $F'(x^k) \Delta = -F(x^k)$

(3) Setze $x^{k+1} = x^k + \Delta^k$, $k := k + 1$, und gehe zu (1).

Das Abbruchkriterium in Schritt (1) wird in der Anwendung des Verfahrens natürlich durch $\|F(x^k)\| \leq \varepsilon$ ersetzt.

Beispiel 2.2 Das Verfahren wird an folgendem einfachen Beispiel demonstriert. Gegeben sei die Funktion $F : \mathbb{R}^2 \mapsto \mathbb{R}^2$ durch

$$F(x) := \begin{pmatrix} x_1 + x_2 - 3 \\ x_1^2 + x_2^2 - 9 \end{pmatrix}$$

Gesucht ist ein Vektor $x^* \in \mathbb{R}^2$ mit $F(x^*) = 0$. Die Jacobi-Matrix lautet dann:

$$F'(x) = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 2x_1 & 2x_2 \end{pmatrix}$$

Als Startpunkt wird $x^0 = (1, 5)^T$ gewählt. Das Gleichungssystem $F'(x^0) \Delta = -F(x^0)$ lautet dann konkret:

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 10 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \Delta_1 \\ \Delta_2 \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} 3 \\ 17 \end{pmatrix}$$

Als Lösung dieses Gleichungssystems erhält man $\Delta^0 = -(1.625, 1.375)^T$, so dass folgt: $x^1 = x^0 + \Delta^0 = (-0.625, 3.625)^T$.

Das Gleichungssystem $F'(x^1) \Delta = -F(x^1)$ lautet ausführlich:

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -\frac{5}{4} & \frac{29}{4} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \Delta_1 \\ \Delta_2 \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{145}{32} \end{pmatrix}$$

Für die Lösung gilt: $\Delta^1 = (0.533, -0.533)^T$, so dass für x^2 folgt: $x^2 = x^1 + \Delta^1 = (-0.092, 3.092)^T$. Da eine Nullstelle von F gegeben ist durch $x^* = (0, 3)^T$, scheint das Verfahren in diesem Fall ganz gut zu funktionieren. \square

Bereits im Fall $p = 1$ kann man einfache Beispiele finden, für die das Verfahren versagt. Unter den in folgendem Satz angegebenen scharfen Voraussetzungen gilt folgendes Konvergenzresultat, das wir hier nicht beweisen. Ein Beweis findet man in [2], Unterabschnitt 5.5.1.

Satz 2.7 Seien $F : \mathbb{R}^p \mapsto \mathbb{R}^p$ stetig differenzierbar, x^* eine Nullstelle von F und die Jacobi-Matrix $F'(x^*)$ regulär. Dann existiert ein $\varepsilon > 0$, so dass für jeden Startpunkt $x^0 \in \mathcal{U}_\varepsilon(x^*)$ gelten:

- Das Newton-Verfahren ist wohldefiniert und erzeugt eine gegen x^* konvergente Folge $\{x^k\}$.
- Die Konvergenzrate ist superlinear.
- Ist F' noch lokal Lipschitz-stetig, so ist die Konvergenzrate sogar quadratisch.

2.5 Grundzüge primal-dualer Pfad-Verfolgungs-Verfahren

Die im Folgenden betrachteten Pfad-Verfolgungs-Verfahren beruhen im Wesentlichen auf dem Newton-Verfahren, welches auf die Gleichungen innerhalb der Pfad-Bedingungen angewandt wird. Wie auch schon im letzten Abschnitt setzen wir zur Vereinfachung der Notation

$$w := (x, y, z) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^n$$

Ist $w = w^k$ ein gegebener Iterationspunkt mit $x > 0$, $z > 0$, so wird im Newton-Verfahren der Korrekturvektor (oder die Suchrichtung) $\Delta w = (\Delta x, \Delta y, \Delta z)$ im Punkt w aus der *Newton-Gleichung* bestimmt:

$$F'_\mu(w) \Delta w = -F_\mu(w) \quad (2.18)$$

Da die Matrix $F'_\mu(w)$ regulär ist, ist Δw eindeutig bestimmt. Der folgende Iterationspunkt w^{k+1} wird nun mit einer Schrittweite t_k gebildet wie folgt:

$$w^{k+1} := w^k + t_k \Delta w$$

wobei $t_k \in (0, 1]$ als erstes die Bedingung erfüllen soll, dass $x^{k+1} > 0$, $z^{k+1} > 0$ gilt.

Speziell für die zentrale Pfadbedingungen (2.5) lautet die Newton-Gleichung (2.18) in einem Iterationspunkt $(x, y, z) = (x^k, y^k, z^k)$ wie folgt:

$$\begin{pmatrix} 0 & A^T & I \\ A & 0 & 0 \\ Z & 0 & X \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta x \\ \Delta y \\ \Delta z \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} A^T y + z - c \\ Ax - b \\ Xz - \mu e \end{pmatrix} \quad (2.19)$$

Wie dabei die Wahl des Pfadparameters $\mu = \mu^k$ vorzunehmen ist, wird noch geklärt. Es ist üblich, μ mit einem $\sigma > 0$ wie folgt einzusetzen:

$$\mu := \sigma \frac{x^T z}{n}$$

Die Punkte $w(t) = w + t\Delta w$ mit $0 \leq t \leq 1$ stellen einen vom Punkt w in Richtung Δw ausgehenden Strahl dar, den wir **Suchrichtungstrahl** nennen. Ausführlich ist dieser durch

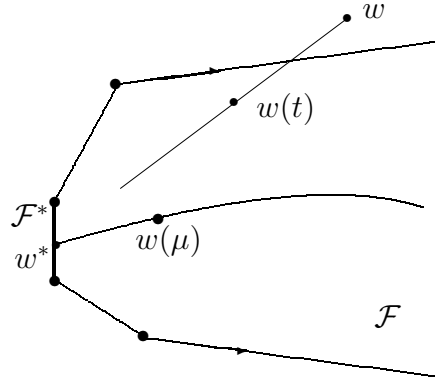
$$(x(t), y(t), z(t)) := (x, y, z) + t(\Delta x, \Delta y, \Delta z) \quad \text{für } t \in [0, 1] \quad (2.20)$$

gegeben und in folgender Skizze veranschaulicht.

Wir wollen feststellen, wie sich die folgenden Größen für Punkte $(x(t), y(t), z(t))$ auf diesem Strahl verändern:

- das duale Residuum $r_c(y(t), z(t)) := A^T y(t) + z(t) - c$
- das primale Residuum $r_b(x(t)) := Ax(t) - b$

- die Dualitätslücke $x(t)^T z(t)$



Beachte, dass wir die Punkte auf dem zentralen Pfad und jene auf dem Suchrichtungstrahl lediglich durch die Parameter μ bzw. t unterscheiden und dafür keine eigenen Symbole einführen.

Satz 2.8 *Duales und primales Residuum sowie die Dualitätslücke ändern sich für punkte $w(t)$ ($t \geq 0$) auf dem Suchrichtungstrahl entsprechend folgender Gleichungen:*

$$\begin{aligned} r_c(y(t), z(t)) &= (1-t) r_c(y, z) \\ r_b(x(t)) &= (1-t) r_b(x) \\ x(t)^T z(t) &= [1-t(1-\sigma)] x^T z + t^2 \Delta x^T \Delta z \end{aligned}$$

BEWEIS: Aufgrund der Newton-Gleichung (2.19) gilt: $A^T \Delta y + \Delta z = -(A^T y + z - c) = -r_c(y, z)$ und $A \Delta x = -(Ax - b) = -r_b(x)$. Damit erhalten wir:

$$\begin{aligned} r_c(y(t), z(t)) &= A^T y(t) + z(t) - c \\ &= A^T (y + \Delta y) + z + \Delta z - c \\ &= A^T y + z - c + t(A^T \Delta y + \Delta z) \\ &= r_c(y, z) - t(r_c(y, z)) \\ r_b(x(t)) &= A(x(t)) - b \\ &= A(x + t\Delta x) - b \\ &= Ax - b - t(Ax - b) \\ &= r_b(x) - t r_b(x) \end{aligned}$$

Für das Verhalten der Dualitätslücke entlang des Suchrichtungstrahls ergibt sich:

$$\begin{aligned} x(t)^T z(t) &= (x + t\Delta x)^T (z + t\Delta z) \\ &= x^T z + t(x^T \Delta z + z^T \Delta x) + t^2 (\Delta x)^T \Delta z \end{aligned}$$

Aus der letzten Zeile der Newtongleichung (2.19) erhält man: $Z \Delta x + X \Delta z = -Xz + \mu e$. Durch Summation der Komponenten dieser Gleichung ergibt sich:

$$z^T \Delta x + x^T \Delta z = -x^T z + n\mu = -(1-\sigma)x^T z$$

Setzt man dieses Ergebnis in obige Gleichung ein, so folgt:

$$x(t)^T z(t) = (1 - t(1 - \sigma)) x^T z + t^2 (\Delta x)^T \Delta z$$

Damit ist der Satz bewiesen. \square

Bemerkungen:

1. Entlang des Suchrichtungsstrahls (2.20) werden primales und duales Residuum um den Faktor $(1 - t)$ für $t \in (0, 1]$ abgebaut.
2. Entlang dieses Strahls werden die Werte der Dualitätslücke gemäß einer quadratischen Funktion $\varphi(t) := x(t)^T z(t)$ verändert. Die Tangente an diese Funktion im Punkt $(0, \varphi(0))$ ist offenbar gegeben durch

$$\psi(t) = (1 - t(1 - \sigma)) x^T z$$

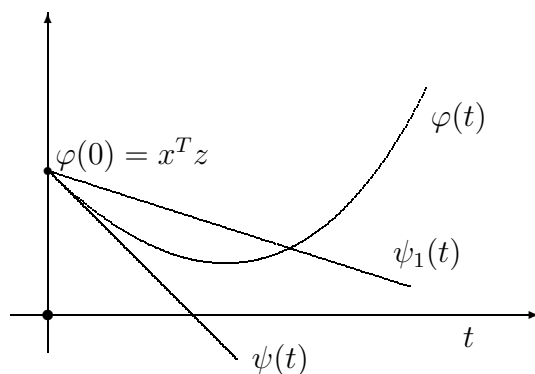
Diese besitzt dann eine negative Steigung, wenn $\sigma \in (0, 1)$ gewählt wird, d.h. in diesem Fall fällt die Dualitätslücke für hinreichend kleine $t > 0$ strikt.

3. Betrachtet wird für ein $\sigma_1 \in (\sigma, 1)$ ferner die affin-lineare Funktion

$$\psi_1(t) = (1 - t(1 - \sigma_1)) x^T z$$

deren Steigung negativ, aber größer als jene von ψ ist.

In folgender Skizze werden die Graphen der drei Funktionen dargestellt:



Die obigen Ausführungen zeigen, dass wir $t_k \in (0, 1]$ so bestimmen können, dass für primales und duales Residuum sowie für die Dualitätslücke folgende Beziehungen gelten:

$$\begin{aligned} r_c(y^{k+1}, z^{k+1}) &= (1 - t_k) r_c(y^k, z^k) \\ r_b(x^k) &= (1 - t_k) r_b(x^k) \\ x^{(k+1)T} z^{k+1} &\leq [1 - t_k(1 - \sigma_1)] x^k T z^k \end{aligned}$$

Man kann daraus *ablesen*: Wird ein Residuum in einem Verfahrensschritt null, so bleibt es im weiteren Verlauf des Verfahrens auch null. Ansonsten wird es in der Norm strikt verkleinert. In jedem Verfahrensschritt wird die Dualitätslücke strikt reduziert.

Wir fassen unsere Überlegungen zu einem ALLGEMEINEN UNZULÄSSIGEN PRIMAL-DUALEN PFADFOLGENDEN VERFAHREN zusammen:

(S.0) Wähle $w^0 := (x^0, y^0, z^0)$ mit $x^0 > 0$, $z^0 > 0$, $\sigma \in (0, 1)$, $\sigma_1 \in (\sigma, 1)$, setze $k := 0$.

(S.1) Sind die folgenden Größen hinreichend klein, dann STOP:

$$x^{kT} z^k, \quad \| r_b(x^k) \|, \quad \| r_c(y^k, z^k) \|$$

(S.2) Setze $\mu_k := \sigma(x^{kT} z^k)/n$ und bestimme eine Lösung $\Delta w^k := (\Delta x^k, \Delta y^k, \Delta z^k)$ der Newtongleichung

$$\begin{pmatrix} 0 & A^T & I \\ A & 0 & 0 \\ Z^k & 0 & X^k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta x \\ \Delta y \\ \Delta z \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} r_c(y^k, z^k) \\ r_b(x^k) \\ X^k z^k - \mu_k e \end{pmatrix} \quad (2.21)$$

(S.3) Bestimme eine Schrittweite $t_k \in (0, 1]$ mit $x^k + t_k \Delta x_k > 0$, $z^k + t_k \Delta z_k > 0$ sowie

$$x(t)^T z(t) \leq [1 - t_k(1 - \sigma_1)] x^{kT} z^k \quad \forall t \in (0, t_k]$$

(S.4) Setze $w^{k+1} := w^k + t_k \Delta w^k$, $k := k + 1$ und gehe zu (S.1). \square

Bricht das Verfahren im Schritt (S.2) ab, so ist die Iterierte w^k „näherungsweise“ zulässig mit einer Dualitätslücke, die nahe bei null liegt. Die Iterierte wird dann als **approximative Optimallösung** der Aufgabe (PD) angesehen.

Startet man mit einem strikt zulässigen Punkt $w^0 := (x^0, y^0, z^0)$, so vereinfachen sich die Schritte (S.2) und (S.3). Da $r_b(x^0) = 0$ und $r_c(y^0, z^0) = 0$ gilt, folgt für alle Iterierten: $r_b(x^k) = 0$ und $r_c(y^k, z^k) = 0$. Aufgrund der Newton-Gleichung (2.21) erhält man dann $\Delta z + A^T \Delta y = 0$ und $A \Delta x = 0$. Da somit $\Delta x \in \mathcal{N}(A)$ und $\Delta z \in \mathcal{R}(A^T)$ sind, folgt: $(\Delta x)^T \Delta z = 0$. In diesem Fall besitzt also $\varphi(t) := x(t)^T z(t)$ die Gestalt

$$\varphi(t) = (1 - t(1 - \sigma)) x^T z$$

d.h. die Dualitätslücke ändert sich entlang des Suchrichtungsstrahls (2.20) im Sinne einer affin-linearen Funktion.

Auf diese Weise entsteht die Grundlage für ein ALLGEMEINES ZULÄSSIGES PRIMAL-DUALES PFADFOLGENDES VERFAHREN:

(S.0) Gegeben sei $w^0 := (x^0, y^0, z^0) \in \overset{\circ}{\mathcal{F}}$. Wähle $\sigma \in (0, 1)$ und setze $k := 0$.

(S.1) Ist die Dualitätslücke $x^{kT} z^k$ hinreichend klein, dann STOP.

(S.2) Setze $\mu_k := \sigma (x^{kT} z^k)/n$ und bestimme eine Lösung $\Delta w^k := (\Delta x^k, \Delta y^k, \Delta z^k)$ der Newtongleichung

$$\begin{pmatrix} 0 & A^T & I \\ A & 0 & 0 \\ Z^k & 0 & X^k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta x \\ \Delta y \\ \Delta z \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ X^k z^k - \mu_k e \end{pmatrix} \quad (2.22)$$

(S.3) Bestimme eine Schrittweite $t_k \in (0, 1]$ mit $x^k + t_k \Delta x_k > 0$, $z^k + t_k \Delta z_k > 0$.

(S.4) Setze $w^{k+1} := w^k + t_k \Delta w^k$, $k := k + 1$ und gehe zu (S.1). \square

Die Darstellung dieser Grundzüge primal-dualer Pfad-Verfolgungsverfahren möchten wir mit folgenden **Bemerkungen** abschließen:

- Die Wahl des Parameters $\sigma \in (0, 1)$ beeinflusst wesentlich die Suchrichtung. Wird σ relativ „groß“ gewählt, so findet eine stärkere Zentrierung (d.h. direktere Ausrichtung zum zentralen Pfad) statt. Bei verhältnismäßig kleinem σ wird die Suchrichtung stärker auf die optimale Randfläche \mathcal{F}^* von (PD) ausgerichtet.
- Die Bestimmung der Schrittweite t_k wird in den Allgemeinen Verfahren nicht beschrieben. Die Schrittweite kann nicht auf beliebige Weise festgelegt werden, weil sonst die Verfahren nicht (global) konvergieren und keine Komplexitätsschranken ermittelt werden können. Dieser Thematik widmen sich nun die folgenden beiden Kapitel.

Kapitel 3

Pfadfolgende Innere-Punkte-Verfahren

In diesem Kapitel untersuchen wir spezielle **zulässige** pfadfolgende Verfahren (oder pfadfolgende **Innere-Punkte-Verfahren**), die sich dem Allgemeinen Verfahren aus dem letzten Kapitel unterordnen. Das besondere Merkmal dieser Verfahren besteht darin, dass die Folge $\{w^k\}$ der Iterierten in der strikt zulässigen Menge

$$\overset{\circ}{\mathcal{F}} := \{w := (x, y, z) \in \mathcal{F} \mid x > 0, z > 0\}$$

erzeugt wird. Dies bedeutet insbesondere, dass $r_b(x^k) = 0$ und $r_c(y^k, z^k) = 0$ für alle $k = 0, 1, 2, \dots$ gilt. Ferner gilt die Besonderheit, dass entlang des vom aktuellen Iterationspunkt w^k ausgehenden Suchrichtungsstrahls

$$w(t) := w^k + t\Delta w^k \text{ mit } t \in [0, 1]$$

die Dualitätslücke im Sinne der folgenden affin-linearen Funktion

$$\varphi(t) := x(t)^T z(t) = [1 - t(1 - \sigma)](x^k)^T z^k$$

fällt, wobei $\sigma \in [0, 1)$ gewählt wird. Dabei ist σ mit dem Pfadparameter μ auf folgende Weise verknüpft:

$$\mu_k = \sigma((x^k)^T z^k)/n$$

Zur Erinnerung sei die Bedeutung des „Zentrierungsparameters“ σ nochmals genannt: Wählt man σ nahe bei 1, so wird die Suchrichtung „relativ“ zentral auf den Pfad ausgerichtet; eine Wahl nahe bei null bewirkt dagegen eine Ausrichtung auf die optimale Randfläche \mathcal{F}^* der Aufgabe (PD).

Ein Nachteil zulässiger Verfahren besteht darin, dass sie von einem strikt zulässigen Punkt $w^0 = (x^0, y^0, z^0)$ starten. Bei einzelnen Verfahren soll ein solcher Punkt darüber hinaus noch eine bestimmte Nähe zum zentralen Pfad aufweisen. Um dies zu erreichen, ist eine Vorlaufphase notwendig. Auf diese Problematik wird am Ende des Kapitels eingegangen.

3.1 Ein Verfahren mit kurzen Schritten

Die Idee dieses Verfahrens besteht darin, die Iterierten w^k durchweg in der Nähe des zentralen Pfades zu generieren und einen Zentrierungsparameter σ nahe bei 1 zu wählen („starke Zentrierung“). Dies hat zur Folge, dass der Abstand von w^k zur Lösung $w(\mu^k)$ der zentralen Pfadbedingungen klein ist. Da w^{k+1} eine (verbesserte) Annäherung an $w(\mu^k)$ darstellt, ist auch der Abstand der beiden Iterierten klein. Deshalb spricht man hier von einem Verfahren mit kurzen Schritten.

Die Nähe der Iterierten zum zentralen Pfad Γ wird erreicht, indem man die Iterierten in einer geeigneten Umgebung von Γ erzeugt. Bei diesem Verfahren verwendet man die folgende Pfadumgebung:

$$\mathcal{N}_2(\theta) := \left\{ (x, y, z) \in \overset{\circ}{\mathcal{F}} \mid \|Xz - \mu(x, z)e\|_2 \leq \theta \mu(x, z) \right\}$$

Dabei wird $\theta > 0$ gewählt und es wurde

$$\mu(x, z) := (x^T z)/n$$

gesetzt, d.h. es gilt $\mu = \sigma \mu(x, z)$. Man beachte, dass die Gleichung $Xz - \mu e = 0$ zusammen mit der Forderung $(x, y, z) \in \overset{\circ}{\mathcal{F}}$ gerade die zentralen Pfadbedingungen sind.

Im folgenden Verfahren werden spezielle Werte für θ und σ verwendet, die durch die nachfolgenden Untersuchungen gerechtfertigt werden.

ALGORITHMUS SPF (*Short-Step Path-Following Method*)

(S.0) Wähle $\theta := 0.4$, $\sigma := 1 - 0.4/\sqrt{n}$ und $\varepsilon > 0$. Bestimme sei ein $w^0 := (x^0, y^0, z^0) \in \mathcal{N}_2(\theta)$. Setze $k := 0$.

(S.1) Ist die Dualitätslücke $(x^k)^T z^k \leq \varepsilon$, dann STOP.

(S.2) Setze $\mu_k := \sigma((x^k)^T z^k)/n$ und bestimme eine Lösung $\Delta w^k := (\Delta x^k, \Delta y^k, \Delta z^k)$ der Newtongleichung

$$\begin{pmatrix} 0 & A^T & I \\ A & 0 & 0 \\ Z^k & 0 & X^k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta x \\ \Delta y \\ \Delta z \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ X^k z^k - \mu_k e \end{pmatrix}$$

(S.3) Setze $(x^{k+1}, y^{k+1}, z^{k+1}) := (x^k, y^k, z^k) + (\Delta x^k, \Delta y^k, \Delta z^k)$, $k := k + 1$ und gehe zu Schritt (S.1). \square

Über mehrere sehr technische Lemmata werden wir das folgende Ergebnis herleiten.

Satz 3.1 Die von Algorithmus SPF erzeugte Folge $\{w^k\}$ liegt in der Pfadumgebung $\mathcal{N}_2(0.4)$, so dass insbesondere gilt: $\{w^k\} \subset \overset{\circ}{\mathcal{F}}$.

Es ist nun verhältnismäßig einfach, als Schlußfolgerung daraus das folgende Konvergenzresultat zu gewinnen.

Korollar 3.1 Für die Folge der Dualitätslücken $\{(x^k)^T z^k\}$ der Iterierten gilt:

$$(x^k)^T z^k = \left(1 - \frac{0.4}{\sqrt{n}}\right)^k (x^0)^T z^0$$

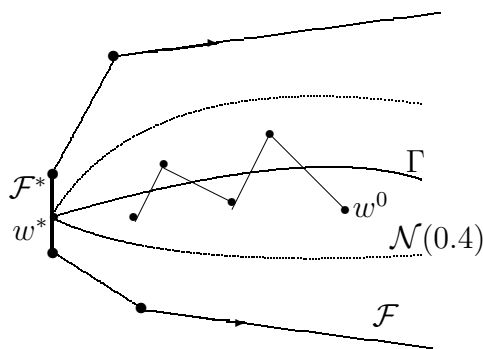
Dies bedeutet insbesondere, dass diese Folge eine Nullfolge ist und Algorithmus SPF nach endlich vielen Durchläufen abbricht.

BEWEIS: Es gilt $(x^{k+1})^T z^{k+1} = [1 - t_k(1 - \sigma)](x^k)^T z^k$. Da im vorliegenden Fall $t_k = 1$ ist, folgt:

$$(x^{k+1})^T z^{k+1} = \sigma(x^k)^T z^k \tag{3.1}$$

Daraus ergibt sich sukzessive die folgende Beziehung: $(x^k)^T z^k = \sigma^k(x^0)^T z^0$. Aus der Festlegung von σ folgt die Behauptung. \square

Diese Konvergenzaussage läßt sich - wie später gezeigt wird - zu einer Komplexitätsaussage verschärfen. Die folgende Skizze soll das Verhalten der vom Algorithmus erzeugten Iteriertenfolge illustrieren.



Das erste der Lemmata kann mit relativ elementaren Hilfsmitteln begründet werden. Wir verzichten hier auf einen Beweis und verweisen auf [2], Lemma 4.9.

Lemma 3.1 Seien $u, v \in \mathbb{R}^n$ zwei Vektoren mit $u^T v = 0$. Dann gilt

$$\|U V e\| \leq 2^{-3/2} \|u + v\|^2$$

wobei $U := \text{diag}(u_1, \dots, u_n)$ und $V := \text{diag}(v_1, \dots, v_n)$ gesetzt wurde.

Mit Hilfe des Lemmas 3.1 können wir eine obere Schranke für die Norm des Vektors $\Delta X \Delta Z e$ herleiten.

Lemma 3.2 *Ist $(x, y, z) \in \mathcal{N}_2(\theta)$, so gilt die Abschätzung*

$$\|\Delta X \Delta Z e\| \leq \frac{\theta^2 + n(1 - \sigma)^2}{2^{3/2}(1 - \theta)} \mu(x, z)$$

BEWEIS: Aufgrund der Newtongleichung gilt die Beziehung $Z\Delta x + X\Delta z = -XZe + \mu e$. Wir multiplizieren die Gleichung mit $(XZ)^{-1/2}$ und erhalten auf diese Weise:

$$(XZ^{-1})^{-1/2}\Delta x + (XZ^{-1})^{1/2}\Delta z = (XZ)^{-1/2}(-XZe + \mu e) \quad (3.2)$$

Mit der Abkürzung $D := (XZ^{-1})^{1/2}$ können wir folgende Abschätzung angeben:

$$\begin{aligned} \|\Delta X \Delta Z e\| &= \|(D^{-1}\Delta X)(D\Delta Z)e\| \\ &\leq 2^{-3/2}\|D^{-1}\Delta x + D\Delta z\|^2 \quad (\text{s. Lemma 3.1}) \\ &= 2^{-3/2}\|(XZ)^{-1/2}(-XZe + \mu e)\|^2 \quad (\text{s. (3.2)}) \\ &= 2^{-3/2}\sum_{i=1}^n \frac{(\mu - x_i z_i)^2}{x_i z_i} \\ &\leq 2^{-3/2} \frac{\|XZe - \mu e\|^2}{\min_i x_i z_i} \end{aligned}$$

Wegen $(x, y, z) \in \mathcal{N}_2(\theta)$ gilt $|x_i z_i - \mu(x, z)| \leq \theta \mu(x, z)$, woraus folgt: $x_i z_i \geq (1 - \theta)\mu(x, z)$. Damit erhält man:

$$\|\Delta X \Delta Z e\| \leq \frac{\|XZe - \mu e\|^2}{2^{3/2}(1 - \theta)\mu(x, z)} \quad (3.3)$$

Unter Beachtung von $\mu = \sigma\mu(x, z)$ leiten wir nun eine obere Schranke des Zählers her:

$$\begin{aligned} \|XZe - \mu e\|^2 &= \|XZe - \mu(x, z)e + (1 - \sigma)\mu(x, z)e\|^2 \\ &= \underbrace{\|XZe - \mu(x, z)e\|^2}_{\leq \theta^2 \mu(x, z)^2} + 2(1 - \sigma)\mu(x, z) \underbrace{e^T(XZe - \mu(x, z)e)}_{=0} \\ &\quad + (1 - \sigma)^2 n \mu(x, z)^2 \\ &\leq (\theta^2 + (1 - \sigma)^2 n) \mu(x, z)^2 \end{aligned}$$

Einsetzen in (3.3) ergibt die Behauptung. \square

Die in folgendem Lemma angegebenen Abschätzungen bilden die Grundlage für den Nachweis, dass alle Punkte $(x(t), y(t), z(t))$ auf dem von (x, y, z) ausgehenden Suchrichtungsstrahl für $t \in [0, 1]$ in der Umgebung $\mathcal{N}_2(\theta)$ liegen.

Lemma 3.3 *Ist $(x, y, z) \in \mathcal{N}_2(\theta)$, so gilt folgende Abschätzung:*

$$\begin{aligned} \|X(t)Z(t)e - \mu(x(t), z(t))e\| &\leq |1 - t| \|XZe - \mu(x, z)e\| + t^2 \|\Delta X \Delta Z e\| \\ &\leq |1 - t| \theta \mu(x, z) + t^2 \left[\frac{\theta^2 + (1 - \sigma)^2 n}{2^{3/2}(1 - \theta)} \right] \mu(x, z) \end{aligned}$$

BEWEIS: Zunächst leiten wir eine Beziehung für die Komponenten des Vektors $X(t)Z(t)e$ mit Hilfe der letzten Zeile der Newtongleichung her:

$$\begin{aligned} x_i(t)z_i(t) &= (x_i + t\Delta x_i)(z_i + t\Delta z_i) \\ &= x_i z_i + t \underbrace{(z_i \Delta x_i + x_i \Delta z_i)}_{=\sigma\mu(x,z) - x_i z_i} + t^2 (\Delta x_i)(\Delta z_i) \end{aligned}$$

Für die Dualitätslücke gilt $x(t)^T z(t) = [1 - t(1 - \sigma)]x^T z$. (*) Daraus folgt:

$$x_i(t)z_i(t) - (1/n)x(t)^T z(t) = (1 - t)x_i z_i + t^2 \Delta x_i \Delta z_i - (1 - t)\mu(x, z)$$

Indem wir diese Komponenten zu einem Vektor zusammenfassen, erhalten wir:

$$\begin{aligned} \|X(t)Z(t)e - \mu(x(t), z(t))e\| &= \|(1 - t)(XZe - \mu(x, z)e) + t^2 \Delta X \Delta Z e\| \\ &\leq |1 - t| \|XZe - \mu(x, z)e\| + t^2 \|\Delta X \Delta Z e\| \\ &\leq |1 - t| \theta \mu(x, z) + t^2 \left[\frac{\theta^2 + n(1 - \sigma)^2}{2^{3/2}(1 - \theta)} \right] \mu(x, z) \quad \square \end{aligned}$$

Lemma 3.4 Die Parameter θ und σ seien so gewählt, dass sie die Ungleichung

$$\frac{\theta^2 + n(1 - \sigma)^2}{2^{3/2}(1 - \theta)} \leq \sigma \theta \quad (3.4)$$

erfüllen. Falls dann $(x, y, z) \in \mathcal{N}_2(\theta)$ ist, gilt:

$$(x(t), y(t), z(t)) := (x, y, z) + t(\Delta x, \Delta y, \Delta z) \in \mathcal{N}_2(\theta) \quad \forall t \in [0, 1].$$

BEWEIS: Wir ersetzen in der Abschätzung, die in Lemma 3.3 angegeben ist, den linken Term von (3.4) durch den rechten. Daraus ergibt sich dann der erste Teil der folgenden Ungleichungskette:

$$\begin{aligned} \|X(t)Z(t)e - \mu(x(t), z(t))e\| &\leq (1 - t)\theta\mu(x, z) + t^2\sigma\theta\mu(x, z) \quad (\text{s. Le3.3. + Vss.}) \\ &\leq [1 - t(1 - \sigma)]\theta\mu(x, z) \quad \text{da } t^2 \leq t \\ &= \theta \frac{x(t)^T z(t)}{n} = \theta\mu(x(t), z(t)) \quad (\text{s. (*)}) \end{aligned}$$

Die in der Definition der Pfadumgebung $\mathcal{N}_2(\theta)$ auftretende Ungleichung ist damit erfüllt für alle $t \in [0, 1]$.

Wir müssen noch nachweisen, dass $(x(t), y(t), z(t)) \in \overset{\circ}{\mathcal{F}}$ liegt. Wegen $A\Delta x = 0$ und $A^T \Delta y + \Delta z = 0$ und $w(t) = w + t\Delta w$ sind die folgenden Gleichungen erfüllt:

$$Ax(t) = b, \quad A^T y(t) + z(t) = c \quad \forall t \in [0, 1]$$

Bleibt noch zu zeigen, dass $x(t) > 0$ und $z(t) > 0$ für alle $t \in [0, 1]$ gilt. Zunächst gilt $x(0) = x > 0$ und $z(0) = z > 0$. Nun gilt aber weiter:

$$x_i(t)z_i(t) \geq (1 - \theta)\mu(x(t), z(t)) = (1 - \theta)(1 - t(1 - \sigma))(x^T z)/n$$

Also ist $x_i(t)z_i(t) > 0$ für alle $t \in [0, 1]$ und jedes $i \in \{1, \dots, n\}$. \square

In Algorithmus SPF werden die Parameterwerte $\theta = 0.4$ und $\sigma = 1 - \frac{0.4}{\sqrt{n}}$ verwendet. Man prüft ohne Mühe nach, dass diese Werte die Ungleichung (3.4) erfüllen. Damit ist die Behauptung aus **Satz 3.1** bewiesen.

Für die Folge $\{w^k\}$ der Iterierten, die von Algorithmus SPF erzeugt werden, gilt nach (3.1) die folgende Beziehung:

$$(x^{k+1})^T z^{k+1} = \left(1 - \frac{0.4}{\sqrt{n}}\right) (x^k)^T z^k, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (3.5)$$

Das folgende Lemma zeigt nun, dass auf der Grundlage einer Beziehung der Form (3.5) eine **Komplexitätsaussage** für ein Verfahren hergeleitet werden kann.

Lemma 3.5 *Sei $\varepsilon > 0$ vorgegeben. Die Iterationsfolge erfülle*

$$(x^{k+1})^T z^{k+1} \leq \left(1 - \frac{\delta}{n^\omega}\right) (x^k)^T z^k, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (3.6)$$

für konstante Zahlen $\delta, \omega \in \mathbb{R}_+$ mit $\delta < n^\omega$. Dann gibt es einen Index K mit

$$K = \mathcal{O}\left(n^\omega \log \frac{1}{\varepsilon}\right)$$

so dass $(x^k)^T z^k \leq \varepsilon$ ist für alle $k \geq K$.

BEWEIS: Aus (3.6) folgt sukzessive für $k = 0, 1, 2, \dots$:

$$(x^k)^T z^k \leq \left(1 - \frac{\delta}{n^\omega}\right)^k (x^0)^T z^0 \quad (3.7)$$

Wir wenden die Logarithmusfunktion auf (3.7) an:

$$\begin{aligned} \log\left((x^k)^T z^k\right) &= k \log\left(1 - \frac{\delta}{n^\omega}\right) + \log\left((x^0)^T z^0\right) \\ &\leq k\left(-\frac{\delta}{n^\omega}\right) + \log\left((x^0)^T z^0\right) \end{aligned}$$

Diese letzte Abschätzung gilt wegen $\log(1 + u) \leq u$ für alle $u > -1$. Sei nun $\kappa > 0$ so gewählt, dass (x^0, y^0, z^0) mit $x^0 > 0, z^0 > 0$ die Beziehung erfüllt:

$$(x^0)^T z^0 \leq (1/\varepsilon)^\kappa$$

Mit dieser Ungleichung läßt sich obige Abschätzung wie folgt weiterführen:

$$\log\left((x^k)^T z^k\right) \leq k\left(-\frac{\delta}{n^\omega}\right) + \kappa \log(1/\varepsilon)$$

Wir fordern nun, dass

$$k(-\delta/n^\omega) + \kappa \log(1/\varepsilon) \leq \log \varepsilon \quad (3.8)$$

erfüllt ist. Denn dann ist auch das Abbruchkriterium $(x^k)^T z^k \leq \varepsilon$ erfüllt. Stellt man (3.8) nach k um, so erhält man:

$$(1 + \kappa) \frac{n^\omega}{\delta} \log \frac{1}{\varepsilon} \leq k$$

Damit ist $(x^k)^T z^k \leq \varepsilon$ (spätestens) erfüllt für $k \geq K := (1 + \kappa)(n^\omega/\delta) \log(1/\varepsilon)$. \square

Die zuletzt bestimmte obere Schranke würde für $\delta = 0.4$, $\kappa = 1$, $\omega = 1/2$, $\varepsilon = 1/10^6$ lauten: $K = 30 \log 10 \sqrt{n}$.

Algorithmus SPF erfüllt wegen (3.5) die Voraussetzungen von Lemma 3.5 mit $\omega = 1/2$ und $\delta = 0.4$. Eine Schranke für die Anzahl der benötigten Iterationen ist also gegeben durch

$$K = \mathcal{O}(\sqrt{n} \log(1/\varepsilon))$$

3.2 Ein Prediktor-Korrektor Verfahren

Alle Iterierten w^k , die von Algorithmus SPF generiert werden, liegen in der „relativ engen“ Pfadumgebung $\mathcal{N}_2(0.4)$. Die Suchrichtung Δw^k im Punkt w^k wird aus der Newtongleichung mit dem Pfadparameter $\mu_k = \sigma(x^k)^T z^k$ gebildet mit $\sigma := 1 - 0.4/\sqrt{n}$. Der Zentrierungsparameter σ liegt also nahe bei 1, d.h. es erfolgt eine starke Zentrierung. Die Suchrichtung ist also auf einen Punkt $w(\mu_k)$ des zentralen Pfades ausgerichtet, der sich relativ nahe am Punkt w^k befindet. Da w^{k+1} eine „verbesserte Näherung“ an $w(\mu_k)$ darstellt, ist auch der Abstand $\|\Delta w^k\|$ von w^k zu w^{k+1} gering. Es entsteht ein Verfahren mit kurzen Schritten, das eng dem zentralen Pfad folgt, das aber trotz einer theoretisch günstigen Komplexitätsschranke viele Schritte benötigt.

Das folgende Verfahren ist ein Zweischritt-Verfahren. Die beiden Schritte unterscheiden sich durch die Wahl von $\mu_k = \sigma(x^k)^T z^k$.

- **Prediktor-Schritt:** Es wird $\sigma = 0$ gesetzt. Da dann auch $\mu_k = 0$ ist, wird die Newtongleichung aus den KKT-Bedingungen der Aufgabe (PD) gebildet, d.h. die Newtonrichtung ist auf die optimale Randfläche \mathcal{F}^* von (PD) ausgerichtet. Die Schrittweite t_k für den Iterationsschritt wird dann so bestimmt, dass die nächste Iterierte innerhalb einer „größeren“ Pfadumgebung verbleibt.
- **Korrektor-Schritt:** Er schließt sich dem Prediktor-Schritt an, wobei $\sigma = 1$ gewählt wird, also eine größtmögliche Zentrierung stattfindet. Der anschließende Iterationsschritt führt dann zu einer Iterierten, die in einer engen Pfadumgebung liegt. Das Ziel dieses Schrittes besteht darin, eine Iterierte w^{k+1} in „zentraler Lage“ zu

erhalten, von der aus sich ein möglichst langer Prediktor-Schritt anschließen läßt. Man beachte, dass wegen $\sigma = 1$ gilt:

$$(x^{k+1})^T z^{k+1} = [1 - t_k(1 - \sigma)](x^k)^T z^k = (x^k)^T z^k$$

d.h. bei einem Korrektor-Schritt wird die Dualitätslücke nicht abgesenkt.

Beim folgenden Verfahren beachte man, dass wir mit zwei Pfadumgebungen der Form $\mathcal{N}_2(\theta)$ arbeiten, einer engen Umgebung mit $\theta = 0.25$ und einer weiteren Umgebung mit $\theta = 0.5$. Nach wie vor werden die Suchrichtungen im Punkt w^k aus der Newtongleichung bestimmt, die nochmals angegeben sei:

$$\begin{pmatrix} 0 & A^T & I \\ A & 0 & 0 \\ Z^k & 0 & X^k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta x \\ \Delta y \\ \Delta z \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ X^k z^k - \mu_k e \end{pmatrix} \quad (3.9)$$

ALGORITHMUS PC (*Predictor-Corrector Method*)

(S.0) Bestimmt sei ein $w^0 := (x^0, y^0, z^0) \in \mathcal{N}_2(0.25)$. Wähle $\varepsilon > 0$ und setze $k := 0$.

(S.1) Ist die Dualitätslücke $(x^k)^T z^k \leq \varepsilon$, dann STOP.

(S.2) Prediktor-Schritt: Bestimme eine Lösung $\Delta w^k := (\Delta x^k, \Delta y^k, \Delta z^k)$ der Newtongleichung (3.9) mit $\mu_k = 0$ (d.h. $\sigma = 0$). Bestimme t_k als größten Wert aus $(0, 1]$, so dass für $t = t_k$ gilt:

$$(x(t_k), y(t_k), z(t_k)) \in \mathcal{N}_2(0.5)$$

Setze $(x^{k+1}, y^{k+1}, z^{k+1}) = (x(t_k), y(t_k), z(t_k))$ und $k := k + 1$.

(S.3) Korrektor-Schritt: Bestimme eine Lösung $\Delta w^k := (\Delta x^k, \Delta y^k, \Delta z^k)$ der Newtongleichung (3.9) mit $\mu_k = ((x^k)^T z^k)/n$ (d.h. $\sigma = 1$).

Setze $(x^{k+1}, y^{k+1}, z^{k+1}) := (x^k, y^k, z^k) + (\Delta x^k, \Delta y^k, \Delta z^k)$, $k := k + 1$ und gehe zu Schritt (S.1). \square

Über mehrere Lemmata werden wir die folgenden Eigenschaften des Algorithmus PC beweisen.

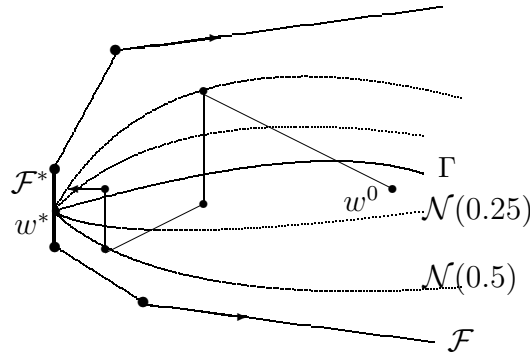
Satz 3.2 a) Die in Schritt (S.3) erzeugte Iterierte $(x^{k+1}, y^{k+1}, z^{k+1})$ liegt in der Umgebung $\mathcal{N}_2(0.25)$.

b) Für alle $k = 0, 2, 4, \dots$ gilt:

$$(x^{k+2})^T z^{k+2} = (x^{k+1})^T z^{k+1} \leq \left(1 - \frac{0.4}{\sqrt{n}}\right) (x^k)^T z^k$$

Die erste Aussage besagt, dass der Korrektor-Schritt von der weiteren in die engere Pfadumgebung zurückführt. Die zweite Aussage zeigt, dass der Prediktor-Schritt dafür sorgt, dass die Folge der Dualitätslücken der Iterierten eine Nullfolge bildet. Insbesondere folgt daraus, dass das Verfahren nach endlich vielen Durchläufen abbricht. Es kann daraus wiederum eine Komplexitätsschranke hergeleitet werden.

Die folgende Skizze versucht, die Abfolge von Prediktor- und Korrektor-Schritt zu illustrieren:



In folgendem Lemma werden Eigenschaften des Prediktorschrittes beschrieben. Es wird gezeigt, dass die Punkte $(x(t), y(t), z(t)) := (x, y, z) + t(\Delta x, \Delta y, \Delta z)$ des aktuellen Suchrichtungsstrahls für „gewisse“ t in der Umgebung $\mathcal{N}_2(0.5)$ verbleiben. Der Iterationsindex k wird dabei für die aktuelle Iterierte, die zugehörige Suchrichtung und den Pfadparameter weggelassen.

Lemma 3.6 Die aktuelle Iterierte (x, y, z) sei aus der Pfadumgebung $\mathcal{N}_2(0.25)$ und $(\Delta x, \Delta y, \Delta z)$ werde aus der Newtongleichung (3.9) mit $\mu = 0$ ($\sigma = 0$) berechnet. Dann ist $(x(t), y(t), z(t)) \in \mathcal{N}_2(0.5)$ für alle $t \in [0, \bar{t}]$ mit

$$\bar{t} := \min \left\{ \frac{1}{2}, \left(\frac{\mu(x, z)}{\|8\Delta X \Delta Z e\|} \right)^{1/2} \right\} \quad (3.10)$$

Ist $\|\Delta X \Delta Z e\| = 0$, so wird $\bar{t} := 1/2$ gesetzt.

BEWEIS: Sei $t \in [0, \bar{t}]$. Mit Lemma 3.3 gilt folgende Abschätzung:

$$\begin{aligned} \|X(t)Z(t)e - \mu(x(t), z(t))e\| &\leq (1-t) \|XZe - \mu(x, z)e\| + t^2 \|\Delta X \Delta Z e\| \\ &\leq (1-t) \|XZe - \mu(x, z)e\| + \frac{1}{8} \mu(x, z) \quad (\text{wegen (3.10)}) \end{aligned}$$

Da $(x, y, z) \in \mathcal{N}_2(1/4)$ ist, folgt: $\|XZe - \mu(x, z)e\| \leq (1/4)\mu(x, z)$. Ferner ist $t \leq 1/2$ und somit ist $1-t \geq 1/2$. Wir können also obige Abschätzung wie folgt weiterführen:

$$\begin{aligned} \|X(t)Z(t)e - \mu(x(t), z(t))e\| &\leq (1/4)(1-t)\mu(x, z) + (1/4)(1-t)\mu(x, z) \\ &= (1/2)(1-t)\mu(x, z) \\ &= (1/2)\mu(x(t), z(t)) \end{aligned}$$

Die letzte Identität resultiert aus $(x(t)^T z(t) = [1 - t(1 - \sigma)]x^T z$ unter Beachtung von $\sigma = 0$ und $\mu(x, z) = (1/n)x^T z$.

Dass $(x(t), y(t), z(t)) \in \overset{\circ}{\mathcal{F}}$ ist für alle $t \in [0, \bar{t}]$, begründet man analog zu den Ausführungen im Beweis von Lemma 3.4. Damit ist die Behauptung des Lemmas bewiesen. \square

In Lemma 3.2 haben wir die folgende Abschätzung angegeben:

$$\|\Delta X \Delta Z e\| \leq \frac{\theta^2 + n(1 - \sigma)^2}{2^{3/2}(1 - \theta)} \mu(x, z)$$

Mit $\theta = 0.25$ und $\sigma = 0$ folgt daraus:

$$\bar{t}^2 \geq \frac{\mu(x, z)}{8 \|\Delta X \Delta Z e\|} \geq \frac{2^{3/2}(1 - 0.25)}{8(0.25^2 + n)} = \frac{3\sqrt{2}}{1 + 16n} \geq \frac{0.16}{n}$$

Damit folgt weiter: $x(\bar{t})^T z(\bar{t}) = (1 - \bar{t})x^T z \leq (1 - \frac{0.4}{\sqrt{n}})x^T z$. Für einen Prediktor-Schritt gilt also:

$$(x^{k+1})^T z^{k+1} \leq \left(1 - \frac{0.4}{\sqrt{n}}\right) (x^k)^T z^k$$

Dass für einen Korrektor-Schritt $(x^{k+1})^T z^{k+1} = (x^k)^T z^k$ gilt, wurde bereits begründet. Die Beziehung in Satz 3.2 b) ist somit nachgewiesen.

Das folgende Resultat besagt, dass ein Korrektor-Schritt bei einer vollen Schrittlänge ($t = 1$) wieder in die „engere“ Pfadumgebung zurückführt.

Lemma 3.7 Sei $(x, y, z) \in \mathcal{N}_2(0.5)$ und sei $(\Delta x, \Delta y, \Delta z)$ Lösung der Newtongleichung (3.9) mit $\mu = x^T z$ ($\sigma = 1$). Dann gilt:

$$(x(1), y(1), z(1)) := (x, y, z) + (\Delta x, \Delta y, \Delta z) \in \mathcal{N}(0.25)$$

BEWEIS: Wir benutzen die folgende Abschätzung aus Lemma 3.3:

$$\|X(t)Z(t)e - \mu(x(t), z(t))e\| \leq |1 - t| \theta \mu(x, z) + t^2 \left[\frac{\theta^2 + (1 - \sigma)^2 n}{2^{3/2}(1 - \theta)} \right] \mu(x, z)$$

In diese setzen wir $\sigma = 1$, $\theta = 0.5$ und $t = 1$ ein. Dann folgt:

$$\begin{aligned} \|X(1)Z(1)e - \mu(x(1), z(1))e\| &\leq \frac{0.5^2}{2^{3/2}(1 - 0.5)} \mu(x, z) \\ &\leq 0.25 \mu(x, z) = 0.25 \mu(x(1), z(1)) \end{aligned}$$

Die letzte Identität gilt deshalb, weil nach einem Korrektorschritt die Dualitätslücke nicht abgesenkt wird, d.h. es gilt $x(t)^T z(t) = x^T z$ für $t \geq 0$.

Dass $(x(1), y(1), z(1)) \in \overset{\circ}{\mathcal{F}}$ liegt, weist man wie im Beweis von Lemma 3.4 nach. Damit ist Lemma 3.7, somit auch Satz 3.2 a) bewiesen. \square

Die Prediktor-Schritte sorgen also für eine wesentliche Absenkung der Dualitätslücke, wogegen die Korrektorschritte die Dualitätslücke unverändert lassen, aber dafür eine deutliche Zentrierung der Iterierten bewirken. Man bekommt die gleiche Komplexitätsschranke wie für Algorithmus SPF.

Satz 3.3 *Gegeben sei $\varepsilon > 0$ und ein Startpunkt (x^0, y^0, z^0) aus der Umgebung $\mathcal{N}_2(0.25)$. Für die von Algorithmus PC generierte Folge $\{(x^k, y^k, z^k)\}$ gibt es dann einen Index K mit $K = \mathcal{O}(\sqrt{n} \log(\frac{1}{\varepsilon}))$, so dass gilt:*

$$(x^k)^T z^k \leq \varepsilon \quad \forall k \geq K$$

BEWEIS: Nach Satz 3.2 gilt:

$$(x^{k+2})^T z^{k+2} = (x^{k+1})^T z^{k+1} \leq \left(1 - \frac{0.4}{\sqrt{n}}\right) (x^k)^T z^k \quad \forall k = 0, 2, 4, \dots$$

Somit ist die Reduktionsbedingung (3.6) mit $\delta = 0.4$ und $\omega = 1/2$ für jede Spanne von zwei Schritten erfüllt. Damit folgt mit Lemma 3.5 die Behauptung. \square

Bemerkung: Die von Algorithmus SPF erzeugte Folge besitzt die Eigenschaft, dass der Abstand zwischen zwei aufeinander folgende Iterierten „relativ“ gering ist. Infolgedessen wird in einem Iterationsschritt nur eine geringe Absenkung der Dualitätslücke vorgenommen. Im Gegensatz dazu kann der Algorithmus PC in einem Iterationsschritt eine große Absenkung der Dualitätslücke bewirken, insbesondere dann, wenn die vorliegende Iterierte fast zentral liegt und die Suchrichtung nahezu tangential zum zentralen Pfad gerichtet ist. Am Ende des PC-Verfahrens werden fast immer Prediktor-Schritte mit Schrittlänge $t = 1$ ausgeführt. Für das Verfahren läßt sich superlineare Konvergenz nachweisen.

3.3 Ein Verfahren mit langen Schritten

Die bisher für die Begrenzung der Schrittweite t_k verwendete Pfadumgebung

$$\mathcal{N}_2(\theta) := \left\{ (x, y, z) \in \overset{\circ}{\mathcal{F}} \mid \|Xz - \mu(x, z)e\|_2 \leq \theta \mu(x, z) \right\}$$

(mit $\mu(x, z) := (x^T z)/n$) erweist sich in der Praxis als verhältnismässig restriktiv. Es ist daher naheliegend, die Pfadumgebung $\mathcal{N}_2(\theta)$ durch eine erweiterte Umgebung zu ersetzen. Dies geschieht durch Abschwächung der Bedingung, die die Umgebung festlegt. Es gelten folgende Implikationen:

$$\begin{aligned} \|Xz - \mu(x, z)e\|_2 \leq \theta \mu(x, z) &\implies |x_i z_i - \mu(x, z)| \leq \theta \mu(x, z) \quad \forall i = 1, \dots, n \\ &\implies x_i z_i \geq (1 - \theta) (x^T z)/n \quad \forall i = 1, \dots, n \end{aligned}$$

Ersetzt man darin $1 - \theta$ durch γ , so erhält man eine neue Bedingung für die Definition einer Pfadumgebung:

$$\mathcal{N}_{-\infty}(\gamma) := \left\{ (x, y, z) \in \overset{\circ}{\mathcal{F}} \mid x_i z_i \geq \gamma (x^T z)/n \quad \forall i = 1, \dots, n \right\}$$

Dabei kann der Parameter γ beliebig positiv gewählt werden; je kleiner $\gamma > 0$ gewählt wird, um so größer ist die Pfadumgebung. Es ist nicht erforderlich, den Zentrierungsparameter σ_k während des Verfahrensverlaufs konstant zu halten; es genügt, ihn innerhalb eines Intervalls $[\sigma_{\min}, \sigma_{\max}]$ mit $0 < \sigma_{\min} < \sigma_{\max} < 1$ zu wählen, d.h. man kann von stärkerer auf schwächere Zentrierung oder umgekehrt umschalten. Konkrete Vorschläge, wie man diese flexiblere Regel nutzen soll, werden hier aber nicht gemacht.

ALGORITHMUS LPF (*Long-Step Path-Following Method*)

(S.0) Wähle $\varepsilon > 0$, $\gamma \in (0, 1)$, $\sigma_{\min}, \sigma_{\max}$ mit $0 < \sigma_{\min} < \sigma_{\max} < 1$. Gegeben sei ein $w^0 := (x^0, y^0, z^0) \in \mathcal{N}_{-\infty}(\gamma)$. Setze $k := 0$.

(S.1) Ist die Dualitätslücke $(x^k)^T z^k \leq \varepsilon$, dann STOP.

(S.2) Wähle $\sigma_k \in [\sigma_{\min}, \sigma_{\max}]$. Setze $\mu_k := \sigma_k ((x^k)^T z^k)/n$ und bestimme eine Lösung $\Delta w^k := (\Delta x^k, \Delta y^k, \Delta z^k)$ der Newtongleichung

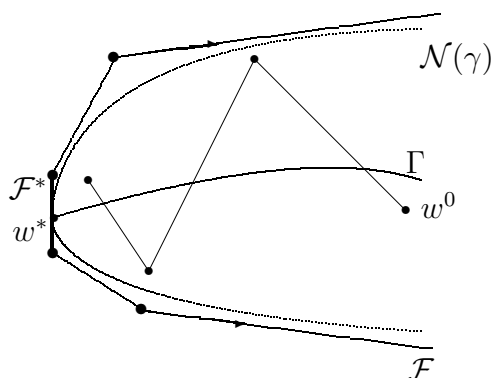
$$\begin{pmatrix} 0 & A^T & I \\ A & 0 & 0 \\ Z^k & 0 & X^k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta x \\ \Delta y \\ \Delta z \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ X^k z^k - \mu_k e \end{pmatrix}$$

(S.3) Bestimme ein größtmögliches $t_k \in (0, 1]$, so dass für $t = t_k$ gilt:

$$w^k + t \Delta w^k \in \mathcal{N}_{-\infty}(\gamma)$$

(S.4) Setze $w^{k+1} := w^k + t_k \Delta w^k$, $k := k + 1$ und gehe zu Schritt (S.1). \square

Der Verlauf des Verfahrens wird durch die folgende Skizze illustriert:



Wie wir bereits gezeigt haben, ändert sich die Dualitätslücke bei pfadfolgenden Innere-Punkte-Verfahren in einem Iterationsschritt nach der folgenden Formel:

$$(x^{k+1})^T z^{k+1} = [1 - t_k(1 - \sigma_k)] (x^k)^T z^k$$

Der Konvergenzbeweis für das Verfahren LPF beruht darauf, eine Schranke $\bar{t} \in (0, 1]$ zu ermitteln, so dass gilt:

$$t_k(1 - \sigma_k) \geq \bar{t} \quad \forall k = 0, 1, 2, \dots$$

Dann nämlich gilt für alle k die Ungleichung

$$(x^{k+1})^T z^{k+1} \leq (1 - \bar{t}) (x^k)^T z^k \quad \text{und somit: } (x^k)^T z^k \leq (1 - \bar{t})^k (x^0)^T z^0$$

die zeigt, dass die Folge $\{(x^k)^T z^k\}$ der Dualitätslücken eine Nullfolge ist. Die Gestalt von \bar{t} erlaubt es dann sogar, eine Komplexitätsschranke für die Anzahl der erforderlichen Iterationsschritte anzugeben. Der **Beweis** wird über mehrere sehr technische Lemmata geführt.

Lemma 3.8 *Für jeden Vektor $(x, y, z) \in \mathcal{N}_{-\infty}(\gamma)$ gilt:*

$$\|\Delta X \Delta Z e\| \leq 2^{-3/2}(1 + 1/\gamma) x^T z \quad (3.11)$$

BEWEIS: Im Beweis von Lemma 3.2 wurde folgende Abschätzung gezeigt:

$$\begin{aligned} \|\Delta X \Delta Z e\| &\leq 2^{-3/2} \|(XZ)^{-1/2}(-XZe + \sigma\mu(x, z)e)\|^2 \\ &= 2^{-3/2} \|- (XZ)^{1/2}e + \sigma\mu(x, z)(XZ)^{-1/2}e\|^2 \end{aligned}$$

Multipliziert man den letzten Term aus und benutzt Beziehungen wie $(x^T z)/n =: \mu(x, z)$, $e^T e = n$, ferner $x_i z_i \geq \gamma\mu(x, z)$ ($\forall i$), so erhält man:

$$\begin{aligned} \|\Delta X \Delta Z e\| &\leq 2^{-3/2} \left[x^T z - 2\sigma\mu(x, z)n + \sigma^2\mu(x, z)^2 \sum_{i=1}^n \frac{1}{x_i z_i} \right] \\ &\leq 2^{-3/2} \left[n\mu(x, z) - 2\sigma\mu(x, z)n + \sigma^2\mu(x, z)^2 n \frac{1}{\gamma\mu(x, z)} \right] \\ &= 2^{-3/2} [1 - 2\sigma + \sigma^2/\gamma] n\mu(x, z) \\ &\leq 2^{-3/2} [1 + 1/\gamma] n\mu(x, z) \quad \square \end{aligned}$$

Lemma 3.9 *Für die von Algorithmus LPF erzeugte Folge $\{t_k\}$ der Schrittlängen gilt:*

$$t_k \geq 2^{3/2} \gamma \frac{1 - \gamma}{1 + \gamma} \cdot \frac{\sigma_k}{n} =: \alpha_k \quad (3.12)$$

BEWEIS: Wir verwenden im Folgenden die aus der Newtongleichung bekannte Beziehung

$$Z^k \Delta x^k + X^k \Delta x^k = \sigma_k \mu(x^k, z^k) e - X^k z^k \quad (3.13)$$

sowie die folgende Abschätzung, die sich direkt aus Lemma 3.8 ergibt:

$$|\Delta x_i \Delta z_i| \leq 2^{-3/2}(1 + 1/\gamma) n\mu(x^k, z^k) \quad (3.14)$$

Wir wollen Zahlen $t \in (0, 1]$ finden, die der Umgebungsbedingung $x_i(t)z_i(t) \geq \gamma\mu(x^k, z^k)$ genügen. Für $(x^k, y^k, z^k) \in \mathcal{N}_{-\infty}(\gamma)$ gilt folgende Abschätzung:

$$\begin{aligned} (x_i^k + t\Delta x_i^k)(z_i^k + t\Delta z_i^k) &= x_i^k z_i^k + t(x_i^k \Delta z_i^k + z_i^k \Delta x_i^k) + t^2 \Delta x_i^k \Delta z_i^k \\ &\geq x_i^k z_i^k (1 - t) + t\sigma_k \mu(x^k, z^k) - t^2 |\Delta x_i^k \Delta z_i^k| \quad (s.(3.13)) \\ &\geq \gamma\mu(x^k, z^k)(1 - t) + t\sigma_k \mu(x^k, z^k) \end{aligned}$$

$$-t^2 2^{-3/2}(1 + 1/\gamma) n\mu(x^k, z^k) \quad (s.(3.14))$$

Dieser letzte Term soll größer $\gamma\mu(x(t), z(t)) = \gamma[1 - t(1 - \sigma_k)]\mu(x^k, z^k)$ sein. Wir bestimmen also alle $t \geq 0$, für die gilt:

$$\gamma\mu(x^k, z^k)(1 - t) + t\sigma_k\mu(x^k, z^k) - t^2 2^{-3/2}(1 + 1/\gamma)n\mu(x^k, z^k) \geq \gamma[1 - t(1 - \sigma_k)]\mu(x^k, z^k)$$

Durch Umstellen nach t findet man heraus, dass für alle $t \geq 0$ mit

$$t \leq 2^{3/2}\gamma \frac{1 - \gamma}{1 + \gamma} \cdot \frac{\sigma_k}{n} =: \alpha_k$$

die obige Ungleichung erfüllt ist. Also gilt für $0 \leq t \leq \alpha_k$:

$$(x_i^k + t\Delta x_i^k)(z_i^k + t\Delta z_i^k) \geq \gamma\mu(x(t), z(t))$$

Ähnlich wie in Lemma 3.4 begründet man, dass $x_i^k + t\Delta x_i^k > 0$ und $z_i^k + t\Delta z_i^k > 0$ für $t \in (0, \alpha_k]$ ist. Also sind für diese t die Punkte $(x(t), y(t), z(t)) \in \mathcal{N}_{-\infty}(\gamma)$. t_k ist die größtmögliche Schrittlänge mit dieser Eigenschaft, also folgt: $t_k \geq \alpha_k$. \square

Das folgende zentrale Konvergenzresultat kann als Korollar aus Lemma 3.9 gewonnen werden.

Satz 3.4 Sei $\{(x^k, y^k, z^k)\}$ die von Algorithmus LPF generierte Folge. Dann gibt es eine von n unabhängige Konstante $\delta \in (0, 1]$, so dass gilt

$$(x^{k+1})^T z^{k+1} \leq (1 - \delta/n) (x^k)^T z^k \quad \text{für } k = 0, 1, 2, \dots \quad (3.15)$$

BEWEIS: Nach Lemma 3.9 folgt:

$$t_k(1 - \sigma_k) \geq \alpha_k(1 - \sigma_k) = 2^{3/2}\gamma \frac{1 - \gamma}{1 + \gamma} \cdot \frac{\sigma_k}{n}(1 - \sigma_k)$$

Sei M das Minimum der Funktion $\sigma \mapsto \sigma(1 - \sigma)$ auf dem Intervall $[\sigma_{\min}, \sigma_{\max}]$, so folgt aus obiger Abschätzung:

$$t_k(1 - \sigma_k) \geq 2^{3/2}\gamma \frac{1 - \gamma}{1 + \gamma} M \cdot \frac{1}{n} =: \delta \cdot \frac{1}{n}$$

Somit erhält man:

$$(x^{k+1})^T z^{k+1} = [1 - t_k(1 - \sigma_k)] (x^k)^T z^k \leq (1 - \delta/n) (x^k)^T z^k \quad \square$$

Mit Lemma 3.5 erhalten wir aus Satz 3.4 das folgende Resultat über die Komplexität des Verfahrens.

Korollar 3.2 Für die von Algorithmus LPF generierte Folge $\{(x^k, y^k, z^k)\}$ gibt es einen Index K mit $K = \mathcal{O}(n \log(\frac{1}{\varepsilon}))$, so dass gilt:

$$(x^k)^T z^k \leq \varepsilon \quad \forall k \geq K$$

3.4 Ergänzende Bemerkungen

Jedes der bisher betrachteten Innere-Punkte-Verfahren bricht mit einer Iterierten $w^k := (x^k, y^k, z^k)$ ab, die zulässig und deren Dualitätslücke kleiner/gleich einem vorgegebenem ε ist. In diesem Sinne ist der Punkt w^k als Näherungslösung der primal-dualen Optimierungsaufgabe (PD) zu verstehen. Tatsächlich sagt die Dualitätslücke nichts darüber aus, ob w^k „nahe“ an der optimalen Randfläche \mathcal{F}^* der Aufgabe (PD) liegt. Deshalb ergänzen wir die bisherigen Konvergenzaussagen durch ein weiteres Konvergenzresultat. Dabei wird davon ausgegangen, dass das Abbruchkriterium $(x^k)^T z^k \leq \varepsilon$ „abgeschaltet“ ist und das Verfahren eine unendliche Folge von Iterierten generiert.

Satz 3.5 *Jede von einem der Algorithmen SPF, PC oder LPF erzeugte Folge $\{w^k\}$ besitzt mindestens einen Häufungspunkt w^* und jeder dieser Häufungspunkte ist eine Optimallösung der primal-dualen Aufgabe (PD).*

BEWEIS: Da für die genannten Verfahren die Innere-Punkte-Annahme erfüllt sein muss, ist nach Satz 2.4 das folgende Polyeder kompakt:

$$\mathcal{F}_{w^0} := \{(x, y, z) \in \mathcal{F} \mid x^T z \leq (x^0)^T z^0\}$$

Da die Folge $\{(x^k)^T z^k\}$ der Dualitätslücken monoton fällt, gilt $(x^k)^T z^k \leq (x^0)^T z^0$ für alle $k = 0, 1, 2, \dots$. Damit liegt die Folge $\{w^k\}$ in \mathcal{F}_{w^0} , besitzt somit wenigstens einen Häufungspunkt w^* in \mathcal{F}_{w^0} . Es gibt eine Teilfolge $\{w^k\}_{k \in J}$, die gegen w^* konvergiert. Damit folgt:

$$(x^*)^T z^* = \lim_{k \in J} (x^k)^T z^k = 0$$

Somit ist w^* eine Optimallösung der Aufgabe (PD). \square

Es kann mehr gezeigt werden, nämlich dass jeder dieser Häufungspunkte w^* eine **strikt komplementäre** Lösung ist. Für einen Beweis sei auf [3], Kapitel 5 verwiesen.

Von den drei vorgestellten Verfahren ist Algorithmus LPF das effizienteste. Allerdings startet auch dieses Verfahren von einem Punkt $(x^0, y^0, z^0) \in \overset{\circ}{\mathcal{F}}$. Ist ein solcher Punkt bekannt, kann man $\gamma > 0$ so wählen, dass die für den Startpunkt geforderte Umgebungsbedingung $x_i z_i \geq \gamma(x^T z)/n$ ($i = 1, \dots, n$) erfüllt ist. Im Allgemeinen aber ist ein innerer Punkt nicht bekannt, mehr noch, man weiß von vornherein nicht, ob es einen solchen überhaupt gibt. Nachstehend ist ein Beispiel angegeben, dass offenbar eine Optimallösung besitzt, für das aber keine strikt zulässige Lösung vorhanden ist.

Eine naheliegende Möglichkeit, zu einem inneren Punkt zu kommen, besteht darin, für ein konstantes $\bar{\mu} > 0$ das Gleichungssystem (2.5) innerhalb der Pfadbedingungen mit dem Newtonverfahren zu lösen, wobei man z.B. mit einem Punkt der Form $w^0 := (\lambda e, 0, \lambda e)$ mit $\lambda > 0$ startet. Diese Vorgehensweise ist sicherlich nicht befriedigend, weil das Newtonverfahren nur lokal konvergent ist und nicht die Frage klärt, ob überhaupt ein innerer Punkt existiert.

Eine andere Möglichkeit, über die genannte Schwierigkeit hinwegzukommen, besteht darin, das gegebene Problem (mit Hilfe eines sog. Big-M-Prinzips) in ein größeres einzubetten, das strikt zulässige Lösungen besitzt. Von der Optimallösung dieses umfassenderen Problems kann man entweder auf eine solche des ursprünglichen Problems schließen, oder feststellen, dass es eine solche nicht gibt (vgl.[1], Abschnitt 2.7). Obwohl dieser Ansatz theoretisch zufriedenstellend erscheint, werden wir ihn hier nicht weiter verfolgen, weil praktische Erfahrungen zeigen, dass Verfahren, die auf diesem Prinzip beruhen, zu numerischer Instabilität neigen.

Beispiel 3.1 *Die folgende Aufgabe (P) besitzt eine Optimallösung, weil der zulässige Bereich nicht leer und kompakt ist:*

$$\left\{ \begin{array}{ll} \min & 2x_1 + x_2 \\ \text{s.d.} & x_1 + x_2 + x_3 = 5 \\ & x_1 + x_3 = 5 \\ & x \geq 0 \end{array} \right.$$

Man sieht direkt, dass für jede zulässige Lösung $x_2 = 0$ gilt, d.h. es gibt keinen inneren Punkt. \square

Kapitel 4

Pfadfolgende Äußere-Punkte-Verfahren

Die bisher vorgestellten Innere-Punkte-Verfahren zeichnen sich durch theoretisch interessante Eigenschaften aus und ermöglichen gute Einblicke in die Methodik der Verfahren, besitzen aber das Manko, dass für ihren Start eine strikt zulässige Lösung aus einer „bestimmten Pfadumgebung“ vorhanden sein muss. Diese Startbedingung kann man im Allgemeinen nur erreichen, indem man entweder einen geeigneten Algorithmus vorgeschaltet oder das vorliegende Problem in geeigneter Weise umformuliert. Die Nachteile beider Vorgehensweisen wurden bereits im letzten Abschnitt dargelegt.

Die sog. Äußere-Punkte-Verfahren starten von einem beliebigen Punkt $w^0 := (x^0, y^0, z^0) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^n$ mit $x^0 > 0$ und $z^0 > 0$. Die Iterierten $w^k := (x^k, y^k, z^k)$ werden so generiert, dass sie die Eigenschaft $x^k > 0$ und $z^k > 0$ beibehalten, im Allgemeinen sind sie aber unzulässig (d.h. es entsteht ein unzulässiges Verfahren). Das Ziel besteht darin, bei Abbruch des Verfahrens näherungsweise Zulässigkeit und Optimalität der Iterierten herzustellen.

4.1 Das grundlegende Verfahren EPF

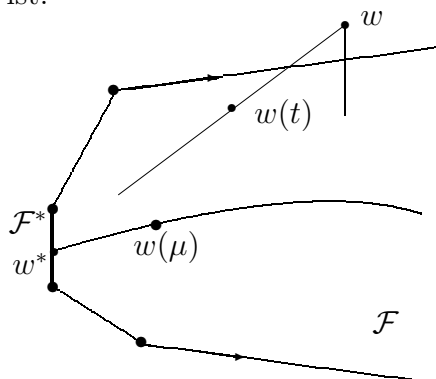
Bereits in Abschnitt 2.5 haben wir die grundlegenden Elemente für Äußere-Punkte-Verfahren dargelegt, sie werden im Folgenden noch einmal kurz wiederholt. Die Newtongleichung für die zentrale Pfadbedingung (2.5) in einem Iterationpunkt $(x, y, z) = (x^k, y^k, z^k)$ lautet wie folgt:

$$\begin{pmatrix} 0 & A^T & I \\ A & 0 & 0 \\ Z & 0 & X \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta x \\ \Delta y \\ \Delta z \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} r_c(y, z) \\ r_b(x) \\ Xz - \mu e \end{pmatrix} \quad (4.1)$$

Dabei wird $\mu = \mu^k = \sigma(x^k)^T z^k / n$ mit $\sigma \in (0, 1)$ gesetzt. Mit der Lösung $(\Delta x, \Delta y, \Delta z)$ der Newtongleichung wird der Suchrichtungsstrahl

$$(x(t), y(t), z(t)) := (x, y, z) + t(\Delta x, \Delta y, \Delta z)$$

gebildet, wobei $t \in (0, 1]$ ist.



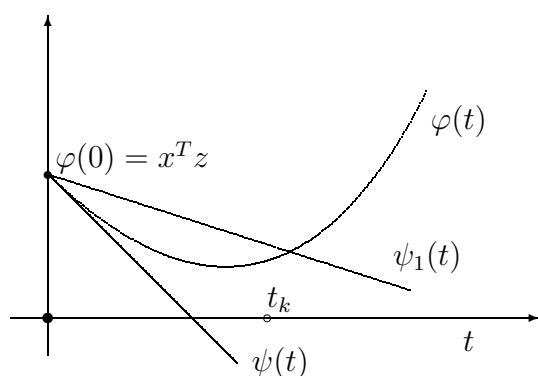
Nach Satz 2.8 ändern sich duales und primales Residuum sowie die Dualitätslücke entlang des Suchrichtungsstrahls gemäß folgender Vorschriften:

$$\begin{aligned} r_c(y(t), z(t)) &= (1 - t) r_c(y, z) \\ r_b(x(t)) &= (1 - t) r_b(x) \\ x(t)^T z(t) &= [1 - t(1 - \sigma)] x^T z + t^2 \Delta x^T \Delta z \end{aligned}$$

Man beachte, dass im Fall unzulässiger Verfahren $\varphi(t) := x(t)^T z(t)$ eine quadratische, für hinreichend kleine $t \geq 0$ streng monoton fallende Funktion ist. Die Tangente ψ im Punkt $(0, \varphi(0))$ und eine Sekante sind durch

$$\psi(t) = [1 - t(1 - \sigma)] x^T z \quad \text{bzw.} \quad \psi_1(t) = [1 - t(1 - \sigma_1)] x^T z$$

gegeben, wobei $\sigma_1 \in (\sigma, 1)$ gegeben ist. Wir illustrieren diese Funktionen in nachstehender Skizze:



Wenn die Schrittweite $t_k \in (0, 1]$, die im k -ten Iterationsschritt bestimmt wird, die Bedingung $\varphi(t_k) \leq \psi_1(t_k)$ erfüllt, so genügt die neue Iterierte $(x^{k+1}, y^{k+1}, z^{k+1}) := (x(t_k), y(t_k), z(t_k))$ den folgenden Bedingungen:

$$r_c(y^{k+1}, z^{k+1}) = (1 - t_k) r_c(y^k, z^k) \tag{4.2}$$

$$r_b(x^{k+1}) = (1 - t_k) r_b(x^k) \tag{4.3}$$

$$(x^{k+1})^T z^{k+1} \leq [1 - t_k(1 - \sigma_1)] (x^k)^T z^k \tag{4.4}$$

Wird nun erreicht, dass die Folge $\{t_k\}$ der Schrittlängen von null wegbeschränkt bleibt, d.h. es gibt eine Konstante $\bar{t} > 0$, so dass $t_k \geq \bar{t}$ (für alle $k = 0, 1, 2, \dots$) gilt, so sind die Folgen

$$\{r_c(y^k, z^k)\}, \quad \{r_b(x^k)\}, \quad \{(x^k)^T z^k\}$$

Nullfolgen, so dass die eingangs genannte Zielsetzung grundsätzlich erfüllt werden kann.

Um zu gewährleisten, dass diese Folgen „möglichst gleichmäßig“ gegen null streben, wird die Folge der Iterierten in folgender Pfadumgebung erzeugt:

$$\mathcal{N}_{-\infty}(\gamma, \beta) := \left\{ (x, y, z) \left| \begin{array}{l} x > 0, z > 0 \\ x_i z_i \geq \gamma \mu(x, z), i = 1, \dots, n \\ \|(r_c(y, z), r_b(x))\| \leq \beta \frac{\|(r_c(y^0, z^0), r_b(x^0))\|}{\mu(x^0, z^0)} \mu(x, z) \end{array} \right. \right\}$$

Dabei wird $\beta \geq 1$ und $\gamma \in (0, 1)$ gewählt und es gilt $\mu(x, z) = (x^T z)/n$. Der Abbau der Residuen wird also sozusagen durch die Absenkung der Dualitätslücke kontrolliert. Man beachte: wählt man $\gamma > 0$ hinreichend klein und $\beta \geq 1$, so liegt der Startpunkt (x^0, y^0, z^0) in $\mathcal{N}_{-\infty}(\gamma, \beta)$.

ALGORITHMUS EPF (*Exterior Path-Following Method*)

(S.0) Wähle $\gamma, \beta, \sigma_{\min}, \sigma_{\max}$ mit $\gamma \in (0, 1), \beta \geq 1, 0 < \sigma_{\min} < \sigma_{\max} \leq 0.5$. Wähle $w^0 := (x^0, y^0, z^0)$ mit $x^0 > 0, z^0 > 0$ sowie $\varepsilon > 0$. Setze $k := 0$.

(S.1) Ist die Dualitätslücke $(x^k)^T z^k \leq \varepsilon$, dann STOP.

(S.2) Wähle $\sigma_k \in [\sigma_{\min}, \sigma_{\max}]$. Setze $\mu_k := \sigma_k ((x^k)^T z^k)/n$ und bestimme eine Lösung $\Delta w^k := (\Delta x^k, \Delta y^k, \Delta z^k)$ der Newtongleichung (4.1) im Punkt $(x, y, z) := (x^k, y^k, z^k)$.

(S.3) Bestimme t_k als größten Wert $t \in (0, 1]$, der die folgenden Bedingungen erfüllt:

$$(x^k(t), y^k(t), z^k(t)) \in \mathcal{N}_{-\infty}(\gamma, \beta) \quad (4.5)$$

$$x^k(t)^T z^k(t) \leq (1 - 0.01 t) (x^k)^T z^k \quad (4.6)$$

(S.4) Setze $(x^{k+1}, y^{k+1}, z^{k+1}) := (x^k(t_k), y^k(t_k), z^k(t_k))$, $k := k + 1$ und gehe zu Schritt (S.1). \square

Bemerkung: Nach Konstruktion liegen alle Iterierten w^k in der Pfadumgebung $\mathcal{N}_{-\infty}(\gamma, \beta)$; deshalb gilt:

$$\|(r_c(y^k, z^k), r_b(x^k))\| \leq \beta \frac{\|(r_c(y^0, z^0), r_b(x^0))\|}{(x^0)^T z^0} (x^k)^T z^k \quad (4.7)$$

Da bei Abbruch des Verfahrens $(x^k)^T z^k \leq \varepsilon$ ist, also die Dualitätslücke hinreichend klein ist, trifft dies auch auf das primale und duale Residuum zu.

Die Ähnlichkeiten von Algorithmus EPF mit dem Verfahren LPF sind unverkennbar: Startet EPF mit einer strikt zulässigen Lösung, so liegt im Wesentlichen das Verfahren LPF vor.

4.2 Der Konvergenzbeweis

Wir kommen nun zu den Konvergenzuntersuchungen von Algorithmus EPF. Das Ziel wird es sein, die lineare Konvergenz der Dualitätslücken $(x^k)^T z^k$ gegen null zu beweisen. Dabei wird im gesamten Abschnitt **vorausgesetzt**, dass $\mathcal{F} \neq \emptyset$ ist (was nach dem Dualitätssatz äquivalent dazu ist, dass (PD) eine Optimallösung besitzt). Die Innere-Punkte-Annahme wird aber nicht benötigt.

Aus den Formeln (4.2) und (4.3), die die Absenkung der Residuen in einem Iterationsschritt beschreiben, folgt sukzessive:

$$(r_c(y^k, z^k), r_b(x^k)) = \left[\prod_{i=1}^{k-1} (1 - t_i) \right] (r_c(y^0, z^0), r_b(x^0)) \quad (4.8)$$

Das Produkt, das hier auftritt, wird im Folgenden häufig verwendet; es erhält eine besondere Bezeichnung, wir setzen:

$$\nu_k := \prod_{i=1}^{k-1} (1 - t_i) \quad \text{mit } \nu_0 := 1 \quad (4.9)$$

Setzt man (4.8) in (4.7) ein und beachtet $\mathcal{N}_{-\infty}(\gamma, \beta)$, so erhält man für ν_k die Abschätzung:

$$\nu_k \leq \beta \frac{(x^k)^T z^k}{(x^0)^T z^0} = \beta \frac{\mu(x^k, z^k)}{\mu(x^0, z^0)} \quad (4.10)$$

Der Beweis der globalen Konvergenz wird mit Hilfe mehrerer sehr technischer Lemmata geführt. Die Beweise der ersten beiden Lemmata verschieben wir in den **Anhang** zu diesem Kapitel. (Sie sind aber auch in [2], Abschnitt 4.2.2 zu finden.)

Lemma 4.1 *Sei (x^k, y^k, z^k) eine durch Algorithmus EPF erzeugte Folge, dann gibt es eine positive Konstante C_1 , so dass gilt:*

$$\nu_k \|(x^k, z^k)\|_1 \leq C_1 \mu(x^k, z^k) \quad \text{für alle } k = 0, 1, 2, \dots$$

Das folgende Resultat macht Gebrauch von der bereits im Beweis von Lemma 3.2 verwendeten Matrix $D^k := (X^k)^{1/2} (Z^k)^{-1/2}$ und besagt, dass die mit $(D^k)^{-1}$ bzw. (D^k) skalierten Richtungsvektoren von der Größenordnung $\mathcal{O}(\sqrt{\mu(x^k, z^k)})$ sind.

Lemma 4.2 *Sei (x^k, y^k, z^k) eine durch Algorithmus EPF erzeugte Folge, dann gibt es eine positive Konstante C_2 , so dass gilt:*

$$\|(D^k)^{-1} \Delta x^k\| \leq C_2 \mu(x_k, z_k)^{1/2}, \quad \|D^k \Delta z^k\| \leq C_2 \mu(x_k, z_k)^{1/2}$$

Mit Hilfe dieser beiden Lemmata ist es möglich, eine untere Schranke $\bar{t} > 0$ für die Schrittweiten t_k (für $k = 0, 1, 2, \dots$) herzuleiten. Es wurde schon erwähnt, dass dies das zentrale Ergebnis ist, um die globale Konvergenz des Verfahrens zu begründen.

Lemma 4.3 *Es gibt eine Konstante $\bar{t} \in (0, 1]$, so dass für jede von Algorithmus EPF erzeugte Iterierte (x^k, y^k, z^k) und alle $t \in (0, \bar{t}]$ die folgenden Bedingungen erfüllt sind:*

$$\begin{aligned} (x^k(t), y^k(t), z^k(t)) &\in \mathcal{N}_{-\infty}(\gamma, \beta) \\ (x^k + t\Delta x^k)^T (z^k + t\Delta z^k) &\leq (1 - 0.01t)(x^k)^T z^k \end{aligned}$$

BEWEIS: Die aktuelle Iterierte wird wieder ohne Index k mit (x, y, z) bezeichnet. Als erstes werden zwei Abschätzungen angegeben, die unmittelbar aus Lemma 4.2 folgen:

$$\begin{aligned} (\Delta x)^T (\Delta z) &= (D^{-1} \Delta x)^T (D \Delta z) \leq \|D^{-1} \Delta x\| \|D \Delta z\| \leq C_2^2 \mu(x, z) \\ |\Delta x_i \Delta z_i| &= |D_{ii}^{-1} \Delta x_i| |D_{ii} \Delta z_i| \leq \|D^{-1} \Delta x\| \|D \Delta z\| \leq C_2^2 \mu(x, z) \end{aligned}$$

Ferner folgt aus der letzten Zeile der Newtongleichung (4.1):

$$Z \Delta x + X \Delta z = -X Z e + \sigma_k \mu(x, z) e$$

Liest man diese Gleichung komponentenweise bzw. multipliziert man sie von links mit e^T , so erhält man die folgenden Beziehungen:

$$z_i \Delta x_i + x_i \Delta z_i = -x_i z_i + \sigma_k \mu(x, z) \quad (4.11)$$

$$z^T \Delta x + x^T \Delta z = e^T (-X Z e + \sigma_k \mu(x, z) e) = (\sigma_k - 1) x^T z \quad (4.12)$$

1) Wir zeigen nun, dass es eine Konstante $\bar{t}_1 \in (0, 1]$ gibt, so dass $(x(t), y(t), z(t))$ für alle $t \geq \bar{t}_1$ die letzte Ungleichung aus der Pfadumgebung $\mathcal{N}_{-\infty}(\gamma, \beta)$ erfüllt. Es gilt:

$$\begin{aligned} (x + t\Delta x)^T (z + t\Delta z) &= x^T z + t(\sigma_k - 1)x^T z + t^2(\Delta x)^T \Delta z \\ &\geq (1 - t)x^T z + t(\sigma_k x^T z - tC_2^2 \mu(x, z)) \\ &\geq (1 - t)x^T z + t(\sigma_{\min} x^T z - tC_2^2 \mu(x, z)) \\ &= (1 - t)x^T z + t(\sigma_{\min} - tC_2^2/n)x^T z \end{aligned} \quad (4.13)$$

Der letzte Summand ist größer/gleich null, wenn $t \leq n\sigma_{\min}/C_2^2$ ist. Wir setzen $\bar{t}_1 := \min\{1, n\sigma_{\min}/C_2^2\}$ und erhalten so für alle $t \in (0, \bar{t}_1]$:

$$\mu(x(t), z(t)) \geq (1 - t)\mu(x, z)$$

Für diese t erhalten wir nun die folgende Abschätzung:

$$\begin{aligned} \frac{\|(r_c(y(t), z(t)), r_b(x(t)))\|}{\mu(x(t), z(t))} &\leq \frac{(1 - t)\|(r_c(y, z), r_b(x))\|}{(1 - t)\mu(x, z)} \\ &\leq \beta \frac{\|(r_c(y^0, z^0), r_b(x^0))\|}{\mu(x^0, z^0)} \end{aligned} \quad (4.14)$$

2) Es wird nun ein $\bar{t}_2 > 0$ ermittelt, so dass die 2. Bedingung in der Pfadumgebung $\mathcal{N}_{-\infty}(\gamma, \beta)$ für $(x(t), y(t), z(t))$ mit $t \leq \bar{t}_2$ erfüllt ist. Mit Hilfe von (4.11) und Lemma 4.2 begründet man folgende Abschätzung

$$\begin{aligned} (x_i + t\Delta x_i)(z_i + t\Delta z_i) &\geq (1 - t)x_i z_i + t\sigma_k \mu(x, z) - tC_2^2 \mu(x, z) \\ &\geq (1 - t)\gamma \mu(x, z) + t\sigma_k \mu(x, z) - tC_2^2 \mu(x, z) \end{aligned} \quad (4.15)$$

Andererseits zeigt man genau so wie in (4.13) folgende Abschätzung:

$$\frac{1}{n}(x + t\Delta x)^T(z + t\Delta z) \leq (1 - t)\mu(x, z) + t\sigma_k\mu(x, z) + t^2C_2^2\mu(x, z)$$

Multipliziert man diese Ungleichung mit $-\gamma$ und addiert sie zur Ungleichung (4.15), so folgt:

$$\begin{aligned} & (x_i + t\Delta x_i)(z_i + t\Delta z_i) - \frac{\gamma}{n}(x + t\Delta x)^T(z + t\Delta z) \\ & \geq \left(t\sigma_k(1 - \gamma) - (1 + \gamma/n)t^2C_2^2\right)\mu(x, z) \\ & \geq \left(\sigma_{\min}(1 - \gamma) - 2tC_2^2\right)t\mu(x, z) \end{aligned}$$

Dieser letzte Term ist größer/gleich null für $t \leq \frac{\sigma(1-\gamma)}{2C_2^2} =: \bar{t}_2$.

3) Es wird nun ein $\bar{t}_3 > 0$ bestimmt, so dass die Bedingung (4.6) erfüllt ist für alle $t \in (0, \bar{t}_3]$.

$$\begin{aligned} & \frac{1}{n}(x + t\Delta x)^T(z + t\Delta z) - (1 - 0.01t)\mu(x, z) \\ & \leq (1 - t)\mu(x, z) + t\sigma_k\mu(x, z) + t^2C_2^2\mu(x, z) - (1 - 0.01t)\mu(x, z) \\ & \leq -0.99t\mu(x, z) + 0.5t\mu(x, z) + t^2C_2^2\mu(x, z) \\ & \leq (-0.49 + tC_2^2)t\mu(x, z) \end{aligned}$$

Dieser letzte Term ist kleiner/gleich null für $t \leq 0.49/C_2^2 =: \bar{t}_3$.

Die im Lemma 4.3 angegebenen Bedingungen sind also erfüllt für alle $t \in (0, \bar{t}]$ mit $\bar{t} := \min\{\bar{t}_1, \bar{t}_2, \bar{t}_3\}$ \square

Das grundlegende Resultat über Algorithmus EPF folgt nun relativ einfach aus Lemma 4.3. Bevor es formuliert wird, soll an zwei Begriffe aus der Konvergenztheorie von Folgen erinnert werden:

Eine Folge $\{\alpha_k\} \subset \mathbb{R}$ mit $\alpha_k > 0$ (für alle k) heißt linear konvergent gegen null, wenn es ein $q \in (0, 1)$ gibt, so dass $\alpha_{k+1} \leq q\alpha_k$ für alle $k = 0, 1, 2, \dots$ gilt.

Eine Folge $\{\beta_k\} \subset \mathbb{R}$ mit $\beta_k > 0$ (für alle k) heißt R-linear konvergent gegen null, wenn es eine Nullfolge $\{\varepsilon_k\}$ und ein $c > 0$ gibt, so dass gilt: $\beta_k \leq c\varepsilon_k$ für alle $k = 0, 1, 2, \dots$

Satz 4.1 Sei $\{(x^k, y^k, z^k)\}$ eine von Algorithmus EPF erzeugte Iterationsfolge. Dann strebt die Folge $\{(x^k)^T z^k\}$ der Dualitätslücken linear und die Folge $\{\|(r_c(y^k, z^k), r_b(x^k))\|\}$ der normierten Residuen R-linear gegen null.

BEWEIS: Nach Lemma 4.3 gibt es ein $\bar{t} \in (0, 1]$, so dass für beliebiges k und alle $t \in (0, \bar{t}]$ gilt:

$$(x^k(t), y^k(t), z^k(t)) \in \mathcal{N}_{-\infty}(\gamma, \beta) \text{ und } x^k(t)^T z^k(t) \leq (1 - 0.01t)(x^k)^T z^k$$

Da t_k in der Iteration k jeweils der größte Wert aus $(0, 1]$ ist, der diese Bedingungen erfüllt, gilt $t_k \geq \bar{t}$. Somit folgt:

$$(x^{k+1})^T z^{k+1} \leq (1 - 0.01 t_k) (x^k)^T z^k \leq (1 - 0.01 \bar{t}) (x^k)^T z^k$$

Dies zeigt, dass die Folge $\{(x^k)^T z^k\}$ linear gegen null konvergiert.

Da nach (4.7) die folgende Abschätzung

$$\|(r_c(y^k, z^k), r_b(x^k))\| \leq \beta \frac{\|(r_c(y^0, z^0), r_b(x^0))\|}{(x^0)^T z^0} (x^k)^T z^k$$

gilt, folgt weiter, dass $\{\|(r_c(y^k, z^k), r_b(x^k))\|\}$ R-linear gegen null strebt. \square

BEACHTEN: Von der Voraussetzung, dass \mathcal{F}^* nicht leer sein soll, wird in den Beweisen der Lemmata 4.1 und 4.2 Gebrauch gemacht. Diese Beweise werden dem Skript in handschriftlicher Form angehängt.

4.3 Weitere Konvergenzresultate

An dieser Stelle werden zwei weitere Konvergenzresultate vorgestellt, allerdings **ohne Beweise**. Als erstes geben wir für die von Algorithmus EPF erzeugte Iteriertenfolge einen ähnlichen Satz an, wie wir ihn für die Innere-Punkte-Verfahren formuliert (und bewiesen) haben. Vorausgesetzt wird dabei die Innere-Punkte-Annahme.

Satz 4.2 *Es gelte $\overset{\circ}{\mathcal{F}} \neq \emptyset$. Jede von Algorithmus EPF erzeugte Folge $\{(x^k, y^k, z^k)\}$ besitzt mindestens einen Häufungspunkt (x^*, y^*, z^*) und jeder dieser Häufungspunkte ist eine (strikt komplementäre) Optimallösung der primal-dualen Aufgabe (PD).*

Unter einer speziellen Voraussetzung, die an den Startpunkt gestellt wird, ist es möglich, über die globale Konvergenz hinaus ein Resultat über **polynomiale Komplexität** herzuleiten. Es ist von einem Startpunkt auszugehen, der eine spezielle Form besitzt, nämlich

$$(x^0, y^0, z^0) := (\lambda e, 0, \lambda e)$$

mit $\lambda \geq \|(x^*, z^*)\|_\infty$, wobei (x^*, y^*, z^*) eine Optimallösung der Aufgabe (PD) bezeichnet. Man kann dann zeigen, dass es einen Index K gibt mit

$$K = \mathcal{O}\left(n^2 \log \frac{1}{\varepsilon}\right)$$

so dass für alle $k \geq K$ gilt: $(x^k)^T z^k \leq \varepsilon$.

Beweise für diese Resultate werden hier nicht geführt, es wird auf [3], Kapitel 6, verwiesen.

Kapitel 5

Eine Variante zu EPF und praktische Aspekte

Unter der Voraussetzung $\mathcal{F} \neq \emptyset$ besitzt die von Algorithmus *EPF* generierte Folge $\{(x^k, y^k, z^k)\}$ die Eigenschaft, dass die Folgen

$$\{(x^k)^T z^k\}, \quad \{r_c(y^k, z^k)\}, \quad \{r_b(x^k)\}$$

Nullfolgen sind. Falls $\overset{\circ}{\mathcal{F}} \neq \emptyset$ ist, so ist jeder Häufungspunkt (x^*, y^*, z^*) der Folge $\{(x^k, y^k, z^k)\}$ eine strikt komplementäre Optimallösung der primal-dualen Aufgabe (*PD*). Unter dieser Voraussetzung kann man davon ausgehen, dass sich die Iterierfolgenfolge in der Endphase des Verfahrens in der „Nähe der optimalen Randfläche“ von (*PD*) bewegt. In einem fortgeschrittenen Stadium des Verfahrens empfiehlt es sich also, bei der Berechnung der Suchrichtung die KKT-Bedingungen der Aufgabe (*PD*) zugrunde zu legen, d.h. in die Newton-Gleichung $\mu = 0$ (d.h. $\sigma = 0$) einzusetzen. Am Ende des Verfahrens ist dann sogar quadratische Konvergenz mit maximaler Schrittweite $t_k = 1$ zu erwarten (vgl. Satz 2.7).

5.1 Das global konvergente Verfahren EPF+

Die Suchrichtung in einem Iterationspunkt (x, y, z) mit $x > 0$ und $z > 0$ wird jeweils aus der Newtongleichung gewonnen:

$$\begin{pmatrix} 0 & A^T & I \\ A & 0 & 0 \\ Z & 0 & X \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta x \\ \Delta y \\ \Delta z \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} r_c(y, z) \\ r_b(x) \\ Xz - \mu e \end{pmatrix} \quad (5.1)$$

Wie üblich wird die neue Iterierte jeweils auf dem Suchrichtungsstrahl $(x(t), y(t), z(t)) := (x, y, z) + t(\Delta x, \Delta y, \Delta z)$ bestimmt. Im Verfahren werden aber *zwei verschiedene Typen* von Suchrichtungen eingesetzt:

- Setzt man $\mu = 0$ in die Gleichung (5.1) ein, so ist die Newtongleichung aus den KKT-Bedingungen der Aufgabe (*PD*) abgeleitet, d.h. sie ist auf die optimale

Randfläche von (PD) ausgerichtet. In der Literatur wird eine solche Richtung „Affine-Scaling-Richtung“ genannt und eine Iteration mit dieser Richtung als „Affine-Scaling-Schritt“ bezeichnet.

- Setzt man $\mu = \sigma(x^T z)/n$ in die Gleichung (5.1) ein mit $\sigma \in [\sigma_{\min}, \sigma_{\max}]$, so erhält man die in Algorithmus *EPF* verwendete Suchrichtung (*EPF*-Richtung). Eine Iteration mit dieser Richtung gemäß *EPF* wird „*EPF*-Schritt“ genannt.

Werden neben *EPF*-Schritten auch Affine-Scaling-Schritte durchgeführt, so ist Satz 4.1 (Konvergenzsatz) in der vorliegenden Form nicht mehr gültig. Deshalb führen wir eine Iteration mit einer Affine-Scaling-Richtung nur dann aus, wenn die ermittelte Schrittlänge t_k eine vorgegebene („hinreichend kleine“) Schranke $t_c \in (0, 1)$ nicht unterschreitet. Tritt jedoch der Fall $t_k < t_c$ ein, so wird der Affine-Scaling-Schritt verworfen und an dessen Stelle ein *EPF*-Schritt ausgeführt. Von letzterem ist bekannt, dass die ermittelte Schrittweite t_k durch ein $\bar{t} > 0$ von null wegbeschränkt bleibt (s. Lemma 4.3 bzw. Beweis von Satz 4.1). Insgesamt ist damit die Schrittweite t_k bei Durchführung eines jeden Schrittes von null wegbeschränkt durch die Konstante $\min\{\bar{t}, t_c\} =: \tilde{t}$, wodurch die globale Konvergenz des Verfahrens gesichert wird.

Eine weitere Besonderheit des folgenden Verfahrens besteht darin, nach der Berechnung einer Affine-Scaling-Richtung einen Test auszuführen, ob mittels eines Schrittes vom Punkt (x, y, z) bis zum Rand des Bereichs $\mathbb{R}_+^n \times \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}_+^n$ nicht direkt eine Optimallösung (x^*, y^*, z^*) gewonnen werden kann. Eine solche Schrittlänge t^* ist durch folgende Bedingung charakterisiert:

$$t^* = \sup\{t \in \mathbb{R}_{++} \mid x_i + t\Delta x_i \geq 0, z_i + t\Delta z_i \geq 0 \forall i = 1, \dots, n\}$$

Stellt man darin die Ungleichungen nach t um (wobei nur Terme mit $\Delta x_i < 0$ bzw. $\Delta z_i < 0$ berücksichtigt werden müssen), so erhält man:

$$t^* = \min\left\{-\frac{x_i}{\Delta x_i}, -\frac{z_i}{\Delta z_i} \mid \Delta x_i < 0, \Delta z_i < 0, i = 1, \dots, n\right\} \quad (5.2)$$

Die Indexmenge in (5.2) ist nur dann leer, wenn die Aufgabe (PD) unlösbar ist. t^* nennen wir maximal zulässige Schrittweite.

Der Test auf eine („approximative“) Optimallösung der Aufgabe (PD) besteht in der Überprüfung des folgenden Kriteriums (im Folgenden „Optimalitätskriterium“ genannt):

$$x^{kT} z^k \leq \varepsilon, \quad \|r_b(x^k)\| \leq \varepsilon_P, \quad \|r_c(y^k, z^k)\| \leq \varepsilon_D \quad (5.3)$$

Wir fassen nun unsere Überlegungen zu einem Verfahren zusammen.

ALGORITHMUS EPF+ (*Exterior Path-Following Method with Affine-Scaling-Steps*)

(S.0) Wähle $\varepsilon, \varepsilon_P, \varepsilon_D > 0$, $\beta, \sigma_{\min}, \sigma_{\max}, t_c$ mit $\beta \geq 1$, $0 < \sigma_{\min} < \sigma_{\max} \leq 1$, $t_c > 0$, wähle $w^0 := (x^0, y^0, z^0)$ mit $x^0 > 0$, $z^0 > 0$ und $\gamma \in (0, 1)$ mit $w^0 \in \mathcal{N}_{-\infty}(\gamma, \beta)$. Setze $k := 0$.

(S.1) Erfüllt (x^k, y^k, z^k) das Optimalitätskriterium (5.3), dann stop.

(S.2) Affine-Scaling-Schritt:

- a) Berechne im Punkt $(x, y, z) := (x^k, y^k, z^k)$ mit $\mu = 0$ aus der Newtongleichung (5.1) die Suchrichtung $(\Delta x^k, \Delta y^k, \Delta z^k)$.
- b) Berechne nach (5.2) die maximal zulässige Schrittweite t^* und teste, ob der Punkt $(x^k(t^*), y^k(t^*), z^k(t^*))$ das Optimalitätskriterium (5.3) erfüllt. Wenn ja, stop.
- c) Sonst berechne die Schrittweite t_k als größte Zahl $t \in (0, 1]$, die die Bedingungen

$$(x^k(t), y^k(t), z^k(t)) \in \mathcal{N}_{-\infty}(\gamma, \beta) \quad \wedge \quad x^k(t)^T z^k(t) \leq (1 - 0.01 t) (x^k)^T z^k$$

erfüllt. Falls $t_k < t_c$ ist, so verwerfe den Affine-Scaling-Schritt und gehe zu (S.3). Sonst setze

$$(x^{k+1}, y^{k+1}, z^{k+1}) := (x^k(t_k), y^k(t_k), z^k(t_k)), \quad k := k + 1$$

und gehe zu (S.1).

(S.3) EPF-Schritt:

- a) Wähle $\sigma_k \in [\sigma_{\min}, \sigma_{\max}]$. Setze $\mu_k := \sigma_k ((x^k)^T z^k) / n$ und bestimme eine Lösung $(\Delta x^k, \Delta y^k, \Delta z^k)$ der Newtongleichung (5.1) im Punkt $(x, y, z) := (x^k, y^k, z^k)$.
- b) Bestimme t_k als größte Zahl $t \in (0, 1]$, die die folgenden Bedingungen

$$(x^k(t), y^k(t), z^k(t)) \in \mathcal{N}_{-\infty}(\gamma, \beta) \quad \wedge \quad x^k(t)^T z^k(t) \leq (1 - 0.01 t) (x^k)^T z^k$$

erfüllt.

- c) Setze $(x^{k+1}, y^{k+1}, z^{k+1}) := (x^k(t_k), y^k(t_k), z^k(t_k))$, $k := k + 1$ und gehe zu Schritt (S.1). \square

Satz 5.1 Ist $\mathcal{F} \neq \emptyset$, so bricht Algorithmus EPF+ nach endlich vielen Schritten mit einer (approximativen) Optimallösung ab.

BEWEIS: Die von Algorithmus EPF+ erzeugte Folge $\{(x^k, y^k, z^k)\}$ liegt nach Konstruktion in der Umgebung $\mathcal{N}_{-\infty}(\gamma, \beta)$. Für EPF-Schritte gelten die Lemmata 4.1, 4.2 und 4.3 entsprechend. Es gibt also ein $\bar{t} > 0$, so dass für jede in einem solchen Schritt berechnete Schrittlänge $t_k \geq \bar{t}$ gilt. Wird ein Affine-Scaling-Schritt ausgeführt, so gilt für

die Schrittlänge $t_k \geq t_c$. Insgesamt folgt für alle Schrittlängen $t_k \geq \min\{\bar{t}, t_c\} =: \tilde{t} > 0$ mit $\tilde{t} \in (0, 1]$. Somit folgt:

$$\begin{aligned} (x^{k+1})^T z^{k+1} &\leq (1 - \tilde{t}) (x^k)^T z^k \\ \|r_b(x^{k+1})\| &\leq (1 - \tilde{t}) \|r_b(x^k)\| \\ \|r_c(y^{k+1}, z^{k+1})\| &\leq (1 - \tilde{t}) \|r_c(y^k, z^k)\| \end{aligned}$$

Daraus geht hervor, dass $\{(x^k)^T z^k\}$, $\{\|r_b(x^k)\|\}$, $\{\|r_c(y^k, z^k)\|\}$ Nullfolgen sind. \square

In der Literatur sind zu Algorithmus *EPF+* einige Varianten zu finden (vgl. hierzu [3]).

5.2 Ermittlung der Schrittweite

Im Folgenden sei der aktuelle Iterationspunkt wieder mit (x, y, z) , die in diesem Punkt berechnete Suchrichtung mit $(\Delta x, \Delta y, \Delta z)$, der Zentrierungsparameter σ_k mit σ und die Punkte auf dem zugehörigen Suchrichtungsstrahl mit $(x(t), y(t), z(t))$ mit $t \geq 0$ bezeichnet. Die Schrittweite t_k wird in Algorithmus *EPF+* durch folgende Bedingungen definiert: Bestimme ein größtmögliches $t_k \in (0, 1]$, so dass für alle $t \in (0, t_k]$ gilt:

$$x(t)^T z(t) \leq (1 - 0.01 t) x^T z \quad (5.4)$$

$$(x(t), y(t), z(t)) \in \mathcal{N}_{-\infty}(\gamma, \beta) \quad (5.5)$$

Wir stellen nun die Ungleichungsdifferenz in (5.4) als Funktionsterm dar:

$$\begin{aligned} d(t) &:= (1 - 0.01 t) x^T z - x(t)^T z(t) \\ &= (1 - 0.01 t) x^T z - [(1 - t(1 - \sigma)) x^T z + t^2 (\Delta x)^T \Delta z] \\ d(t) &= t(0.99 - \sigma) - t^2 (\Delta x)^T \Delta z \end{aligned} \quad (5.6)$$

Ebenso verfahren wir mit den Ungleichungsdifferenzen der Beziehungen, die in der Umgebung $\mathcal{N}_{-\infty}(\gamma, \beta)$ auftreten:

$$\begin{aligned} \Phi_i(t) &:= x_i(t) z_i(t) - \frac{\gamma}{n} x(t)^T z(t) \\ &= (x_i + t \Delta x_i)(z_i + t \Delta z_i) - \frac{\gamma}{n} [(1 - t(1 - \sigma)) x^T z + t^2 (\Delta x)^T \Delta z] \\ &= (1 - t) x_i z_i + t \sigma \mu(x, z) + t^2 \Delta x_i \Delta z_i - \frac{\gamma}{n} [(1 - t(1 - \sigma)) x^T z + t^2 (\Delta x)^T \Delta z] \\ \Phi_i(t) &= (1 - t) (x_i z_i - \frac{\gamma}{n} x^T z) + t(1 - \gamma) \sigma \mu(x, z) + t^2 (\Delta x_i \Delta z_i - \frac{\gamma}{n} (\Delta x)^T \Delta z) \end{aligned} \quad (5.7)$$

Die Funktion für die Ungleichungsdifferenz der letzten Beziehung aus $\mathcal{N}_{-\infty}(\gamma, \beta)$ lautet:

$$g(t) := \beta \frac{\|(r_c(y^0, z^0), r_b(x^0))\|}{\mu(x^0, z^0)} \mu(x(t), z(t)) - \|(r_c(y(t), z(t)), r_b(x(t)))\|$$

$$\begin{aligned}
 &= \beta \frac{\|(r_c(y^0, z^0), r_b(x^0))\|}{\mu(x^0, z^0)} [(1-t(1-\sigma))(x^T z)/n + t^2((\Delta x)^T \Delta z)/n] \\
 &\quad - (1-t)\|(r_c(y, z), r_b(x))\| \\
 g(t) &= (1-t)[q_0 - \|(r_c(y, z), r_b(x))\|] + t\sigma \frac{x^T z}{n} q_0 + t^2 \frac{(\Delta x)^T \Delta z}{n} q_0 \quad (5.8)
 \end{aligned}$$

Dabei ist zur Abkürzung $q_0 := \beta \frac{\|(r_c(y^0, z^0), r_b(x^0))\|}{\mu(x^0, z^0)}$ gesetzt worden. Die Funktionen d , Φ_i ($i = 1, \dots, n$) und g sind Polynome 2. Grades in t , deren Koeffizienten vom aktuellen Iterationspunkt (x, y, z) , der aktuellen Suchrichtung $(\Delta x, \Delta y, \Delta z)$ und den Parametern σ und γ gebildet werden. Es sind **zwei Fälle** zu unterscheiden:

- Es wird ein *EPF*-Schritt ausgeführt (σ ist dann positiv). Sei f eine beliebige Funktion aus $\{d, \Phi_i (i = 1, \dots, n), g\}$. Wir definieren nun:

$$\bar{t}_f := \sup\{t \in \mathbb{R}_{++} \mid f(t) \geq 0\} \quad (5.9)$$

Da es nach Lemma 4.3 ein $\bar{t} > 0$ gibt mit $f(t) \geq 0$ für alle $t \in (0, \bar{t}]$, ist \bar{t}_f wohldefiniert. Wenn \bar{t}_f nicht ∞ ist, so ist \bar{t}_f die erste Nullstelle des Polynoms in \mathbb{R}_{++} . Die Schrittweite t_k ergibt sich dann aus

$$t_k = \min\{1, \bar{t}_d, \bar{t}_g, \bar{t}_{\Phi_i} (i = 1, \dots, n)\}$$

- Bei der Durchführung eines Affine-Scaling-Schritts ist $\sigma = 0$. Ein solcher Schritt wird nur ausgeführt, wenn für die berechnete Schrittlänge t_k gilt: $t_k \geq t_c$. Er wird nicht ausgeführt, wenn für eine der Funktionen $f \in \{d, \Phi_i (i = 1, \dots, n), g\}$ einer der folgenden Fälle eintritt:

1. $f(t) \leq 0$ für alle $t \geq 0$
2. \bar{t}_f , berechnet nach (5.9), ist kleiner als t_c

Ansonsten berechnet man t_k wie oben und führt den Schritt aus.

5.3 Systeme zur Berechnung der Suchrichtung

Für die Berechnung des Suchrichtungsvektors $(\Delta x, \Delta y, \Delta z)$ aus der Newtongleichung (5.1) kann man verschiedene äquivalente Gleichungssysteme angeben. Als erstes wird (5.1) so umgeschrieben, dass die Koeffizientenmatrix symmetrisch ist. Dazu wird die erste Blockzeile mit der zweiten vertauscht, anschließend wird die erste mit der zweiten Blockspalte getauscht (Vertauschen der „Variablen“ Δx mit Δy). Nach diesen Schritten wird die letzte Blockzeile schließlich noch mit Z^{-1} multipliziert. Auf diese Weise erhält man:

$$\begin{pmatrix} 0 & A & 0 \\ A^T & 0 & I \\ 0 & I & D^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta y \\ \Delta x \\ \Delta z \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} r_b(x) \\ r_c(y, z) \\ Z^{-1} r_{xz} \end{pmatrix} \quad (5.10)$$

Dabei wurde $D^2 := Z^{-1}X$ und $r_{xz} := Xz - \mu e$ gesetzt. Auflösen der letzten Zeile nach Δz ergibt:

$$\Delta z = - \left(X^{-1}r_{xz} + D^{-2}\Delta x \right) \tag{5.11}$$

Man setzt nun diese Größe in die zweite Zeile von (5.10) ein und erhält:

$$\begin{pmatrix} 0 & A \\ A^T & -D^{-2} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \Delta y \\ \Delta x \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} r_b(x) \\ r_c(y, z) - X^{-1}r_{xz} \end{pmatrix} \tag{5.12}$$

An Stelle der Newtongleichung (5.10) kann man also auch das System (5.12) nach $(\Delta x, \Delta y)$ auflösen, um anschließend Δz aus (5.11) zu berechnen. Die symmetrische Koeffizientenmatrix in (5.12) ist wesentlich kleiner als die von (5.10).

Schließlich läst sich eine weitere Alternative mit noch kleinerer Koeffizientenmatrix angeben. Wir multiplizieren die zweite Zeile in (5.12) mit AD^2 , ferner berücksichtigt man $A\Delta x = -r_b(x)$. Man erhält auf diese Weise:

$$AD^2A^T\Delta y = -r_b(x) - AD^2r_c(y, z) + AD^2X^{-1}r_{xz}$$

Somit kann man die Anteile Δy , Δz , Δx der Suchrichtung sukzessive aus folgendem System berechnen:

$$\begin{aligned} AD^2A^T\Delta y &= -r_b(x) - A(Z^{-1}Xr_c(y, z) + Z^{-1}r_{xz}) \\ \Delta z &= -r_c(y, z) + A^T\Delta y \\ \Delta x &= -D^2\Delta z - Z^{-1}r_{xz} \end{aligned}$$

Die Koeffizientenmatrix $AD^2A^T \in \mathbb{R}^{m \times m}$ ist symmetrisch und positiv definit. Man kann somit auch Cholesky-Zerlegung verwenden.

Kapitel 6

Glättungsverfahren

Dieses Kapitel beschäftigt sich mit so genannten Glättungsverfahren zur Lösung linearer Optimierungsaufgaben. Diese weisen einen engen Zusammenhang zu Inneren-Punkte-Methoden auf, obwohl ihnen ein anderes Prinzip zugrunde liegt. Auch für diese Verfahrensklasse stellt das Newtonverfahren die Grundlage dar.

Ausgangspunkt der Überlegungen ist wieder das Gleichungs-/Ungleichungssystem der *KKT*-Bedingungen des primal-dualen Aufgabenpaares (*PD*):

$$\begin{aligned} z + A^T y &= c \\ Ax &= b \\ x_i &\geq 0, z_i \geq 0, x_i z_i = 0 \quad (\forall i = 1, \dots, n) \end{aligned} \tag{6.1}$$

Dabei ist $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ mit $Rg(A) = m$, $b \in \mathbb{R}^m$, $c \in \mathbb{R}^n$. Die Idee der Glättungsverfahren besteht nun darin, das System (6.1) umzuformulieren in ein äquivalentes System, welches nur aus Gleichungen besteht. Ziel ist es, auf dieses Gleichungssystem dann das Newtonverfahren anzuwenden. Leider ist dies auf direkte Weise nicht möglich, das System ist nicht mehr überall differenzierbar. Deshalb approximiert man das nichtglatte Gleichungssystem durch ein stetig differenzierbares System, das von einem Parameter τ abhängt. Auf dieses glatte System kann man dann das Newtonverfahren anwenden.

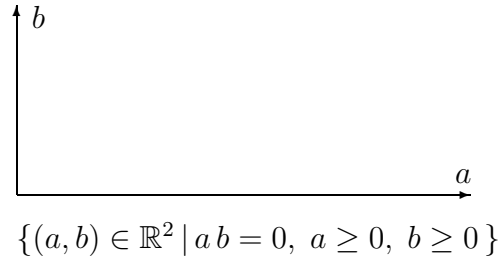
6.1 Glättungsfunktionen

Nach dieser groben Beschreibung eines Glättungsverfahrens wird im Folgenden dargestellt, wie sich die einzelnen Schritte realisieren lassen. Dazu müssen die *KKT*-Bedingungen (6.1) in ein System von Gleichungen umformuliert werden. Dies gelingt mit Hilfe so genannter *NCP*-Funktionen.

Definition 6.1 Eine Funktion $\varphi : \mathbb{R}^2 \mapsto \mathbb{R}$ heißt *NCP-Funktion*, falls gilt:

$$\varphi(a, b) = 0 \iff a \geq 0, b \geq 0, ab = 0$$

Die Nullstellenmenge von φ ist also die Menge der Punkte, die auf den nicht-negativen Koordinatenachsen von \mathbb{R}^2 liegen. Die folgende Skizze stellt diese Menge anschaulich dar:



Für eine beliebige *NCP*-Funktion φ definieren wir nun die Funktion

$$\hat{\varphi} : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}^n, \quad \hat{\varphi}(x, z) := (\varphi(x_1, z_1), \dots, \varphi(x_n, z_n))$$

und damit die Funktion $\Phi : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^n$ wie folgt:

$$\Phi(w) := \Phi(x, y, z) := \begin{pmatrix} z + A^T y - c \\ Ax - b \\ \hat{\varphi}(x, z) \end{pmatrix} \quad (6.2)$$

Satz 6.1 Für die gemäß (6.2) mittels einer beliebigen *NCP*-Funktion φ definierten Abbildung Φ gilt: Ein Vektor $w^* := (x^*, y^*, z^*) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^n$ ist genau dann eine Lösung der *KKT*-Bedingungen (6.1), wenn w^* das nichtlineare Gleichungssystem $\Phi(w) = 0$ löst.

BEWEIS: Dies ist eine direkte Konsequenz aus folgender Äquivalenz:

$$\begin{aligned} \hat{\varphi}(x, z) = 0 &\iff \varphi(x_i, z_i) = 0 \quad \forall i = 1, \dots, n \\ &\iff x_i z_i = 0, \quad x_i \geq 0, \quad z_i \geq 0 \quad \forall i = 1, \dots, n \quad \square \end{aligned}$$

Der Satz 6.1 liefert also die gewünschte Umformulierung der *KKT*-Bedingungen (6.1) in ein System von Gleichungen. Wir geben zwei konkrete *NCP*-Funktionen an (weitere Beispiele s.[2], Abschnitt 4.4).

Beispiel 6.1 Man weist leicht nach, dass die folgenden beiden Funktionen $\varphi : \mathbb{R}^2 \mapsto \mathbb{R}$ *NCP*-Funktionen sind:

a) *Minimum-Funktion*: $\varphi(a, b) := 2 \min\{a, b\}$.

b) *Fischer-Burmeister-Funktion*: $\varphi(a, b) := a + b - \sqrt{a^2 + b^2}$.

Die beiden *NCP*-Funktionen φ sind nicht differenzierbar. Also ist auch die Funktion Φ , definiert nach (6.2), nicht differenzierbar. Auf Grund dieser Nicht-Differenzierbarkeit kann das Newtonverfahren nicht direkt zur Lösung des Gleichungssystems $\Phi(w) = 0$ eingesetzt werden. Aus diesem Grunde wollen wir nun die Abbildung Φ approximieren

durch eine Abbildung Φ_τ , wobei $\tau > 0$ den so genannten Glättungsparameter bezeichnet.

Die Abbildung Φ_τ wird nun nach demselben Muster definiert wie Φ . Zunächst wird eine stetig differenzierbare Funktion $\varphi_\tau : \mathbb{R}^2 \mapsto \mathbb{R}$ eingeführt, anschließend wird $\hat{\varphi}_\tau$ definiert gemäß

$$\hat{\varphi}_\tau(x, z) := (\varphi_\tau(x_1, z_1), \dots, \varphi_\tau(x_n, z_n))$$

Schließlich definieren wir die Funktion $\Phi_\tau : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^n$ wie folgt:

$$\Phi_\tau(w) := \Phi_\tau(x, y, z) := \begin{pmatrix} z + A^T y - c \\ Ax - b \\ \hat{\varphi}_\tau(x, z) \end{pmatrix} \quad (6.3)$$

Die Approximation φ_τ an die *NCP*-Funktion φ bezeichnen wir als *geglättete NCP-Funktion*.

Beispiel 6.2 *Geglättete NCP-Funktionen zu den Funktionen aus obigem Beispiel:*

a) *Geglättete Minimum-Funktion:* $\varphi_\tau(a, b) := a + b - \sqrt{(a - b)^2 + 4\tau^2}$.

Dabei beachte man: $2 \min\{a, b\} = a + b - |a - b| = a + b - \sqrt{(a - b)^2}$.

b) *Geglättete Fischer-Burmeister-Funktion:* $\varphi_\tau(a, b) := a + b - \sqrt{a^2 + b^2 + 2\tau^2}$.

Der Glättungsparameter τ ist dabei stets positiv.

Im Folgenden bezeichne φ stets eine der beiden *NCP*-Funktionen aus Beispiel 6.1, φ_τ die zugehörige Glättungsfunktion aus Beispiel 6.2 und Φ_τ die zugehörige Abbildung aus (6.3). Das folgende Lemma gibt Auskunft über die Güte der Approximation von φ_τ an φ bzw. von Φ_τ an Φ .

Lemma 6.1 *Es gelten die folgenden Aussagen:*

a) *Es gibt eine Konstante $c > 0$ (unabhängig von (a, b) und τ), so dass für alle $(a, b) \in \mathbb{R}^2$ und alle $\tau > 0$ gilt:*

$$|\varphi(a, b) - \varphi_\tau(a, b)| \leq c\tau$$

b) *Es existiert eine Konstante $\kappa > 0$ (unabhängig von $w := (x, y, z)$ und τ), so dass für alle $w \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^n$ und $\tau > 0$ gilt:*

$$\|\Phi(w) - \Phi_\tau(w)\| \leq \kappa\tau$$

BEWEIS: a) Der Beweis wird nur für die Minimumfunktion ausgeführt, jener für die Fischer-Burmeister-Funktion bleibt dem Leser als Übungsaufgabe überlassen. Die Minimumfunktion wird in der Form $\varphi(a, b) = a + b - \sqrt{(a - b)^2}$ verwendet. Dann gilt:

$$\begin{aligned} |\varphi(a, b) - \varphi_\tau(a, b)| &= \left| \sqrt{(a - b)^2 + 4\tau^2} - \sqrt{(a - b)^2} \right| \\ &= \frac{4\tau^2}{\left| \sqrt{(a - b)^2 + 4\tau^2} + \sqrt{(a - b)^2} \right|} \\ &\leq \frac{4\tau^2}{2\tau} = 2\tau \end{aligned}$$

Damit ist die behauptete Abschätzung mit $c = 2$ erfüllt. Im Fall der Fischer-Burmeister-Funktion ist $c = \sqrt{2}$.

b) Aus Teil a) und der Definition von Φ folgt:

$$\begin{aligned} \|\Phi(w) - \Phi_\tau(w)\| &= \|\widehat{\varphi}(w) - \widehat{\varphi}_\tau(w)\| \\ &= \left(\sum_{i=1}^n (\varphi(x_i, z_i) - \varphi_\tau(x_i, z_i))^2 \right)^{1/2} \\ &\leq \sqrt{nc^2\tau^2} = \sqrt{n} c\tau \end{aligned}$$

Damit folgt die Behauptung mit $\kappa := \sqrt{nc}$. \square

Es soll nun das Newton-Verfahren auf des geglättete Gleichungssystem $\Phi_\tau(w) = 0$ angewendet werden, wobei der Glättungsparameter $\tau > 0$ noch geeignet aufzudatieren ist. In jedem Iterationsschritt hat man daher ein lineares Gleichungssystem der Form

$$\Phi'_\tau(w) \Delta w = -\Phi_\tau(w)$$

zu lösen. Unter Beachtung der Definition von $\Phi_\tau(w)$ gemäß (6.2) ist die Jacobi-Matrix gegeben durch

$$\Phi'_\tau(x, y, z) = \begin{pmatrix} 0 & A^T & I \\ A & 0 & 0 \\ D_a & 0 & D_b \end{pmatrix}$$

mit den Diagonalmatrizen

$$\begin{aligned} D_a &:= \text{diag} \left(\frac{\partial \varphi_\tau}{\partial a}(x_1, z_1), \dots, \frac{\partial \varphi_\tau}{\partial a}(x_n, z_n) \right) \in \mathbb{R}^{n \times n} \\ D_b &:= \text{diag} \left(\frac{\partial \varphi_\tau}{\partial b}(x_1, z_1), \dots, \frac{\partial \varphi_\tau}{\partial b}(x_n, z_n) \right) \in \mathbb{R}^{n \times n} \end{aligned}$$

Man weist leicht nach, dass die Diagonaleinträge der Matrizen positiv sind, so dass D_a und D_b positiv definite Matrizen sind. Damit gilt das folgende Resultat.

Lemma 6.2 Seien $(x, y, z) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^n$ und $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ mit $\text{Rg}(A) = m$ sowie $\tau > 0$. Dann ist die Jacobi-Matrix $\Phi'_\tau(x, y, z)$ regulär.

BEWEIS: Der Beweis von Lemma 2.2 läßt sich wörtlich übertragen, wenn Z durch D_a und X durch D_b ersetzt wird. \square

Anschließend gehen wir noch auf einen interessanten Zusammenhang zwischen Inneren-Punkte-Methoden und dem hier entwickelten Ansatz für Glättungsverfahren ein.

Satz 6.2 *Sei Φ_τ mittels der geglätteten Minimumfunktion oder der geglätteten Fischer-Burmeister-Funktion definiert. Dann ist der Vektor $w(\tau) := (x(\tau), y(\tau), z(\tau))$ genau dann eine Lösung des Gleichungssystems $\Phi_\tau(w) = 0$, wenn er das System*

$$\begin{aligned} z + A^T y &= c \\ Ax &= b \\ x_i z_i &= \tau^2, \quad x_i > 0, \quad z_i > 0 \quad (\forall i = 1, \dots, n) \end{aligned} \tag{6.4}$$

erfüllt, d.h. die zentrale Pfad-Bedingungen (2.5) zum Parameter $\mu = \tau^2$.

BEWEIS: $\Phi_\tau(w) = 0$ ist äquivalent dazu, dass $w = (x, y, z)$ die Gleichungen $Ax = b, z + A^T y = c, \widehat{\varphi}_\tau(x, z) = 0$ erfüllt. Wird $\widehat{\varphi}_\tau(x, z)$ über die geglättete Minimumfunktion definiert, so gilt:

$$\begin{aligned} \widehat{\varphi}_\tau(x, z) = 0 &\iff \varphi_\tau(x_i, z_i) = 0 \quad (i = 1, \dots, n) \\ &\iff x_i + z_i = \sqrt{(x_i - z_i)^2 + 4\tau^2} \quad (i = 1, \dots, n) \\ &\iff (x_i + z_i)^2 = (x_i - z_i)^2 + 4\tau^2 \quad (i = 1, \dots, n) \\ &\iff x_i z_i = \tau^2 \quad (i = 1, \dots, n) \end{aligned}$$

Aus der zweiten Zeile ist abzulesen, dass $x_i + z_i > 0$ ist. Mit $x_i z_i = \tau^2$ gilt somit auch $x_i > 0, z_i > 0$.

Der Beweis ist analog zu führen, wenn $\widehat{\varphi}_\tau(x, z)$ über die geglättete Fischer-Burmeister-Funktion definiert wird. \square

Die Bedingungen (6.4) stellen also die Bedingungen für den zentralen Pfad dar, der nun mit $\mu = \tau^2$ parametrisiert ist.

Dies bedeutet: Erfüllt die primal-duale Aufgabe (PD) die Innere-Punkte-Annahme, so besitzt das Gleichungssystem $\Phi_\tau(w) = 0$, definiert gemäß (6.3) mit der geglätteten Minimum- oder Fischer-Burmeister-Funktion φ_τ für jedes $\tau > 0$ genau eine Lösung $w(\tau) := (x(\tau), y(\tau), z(\tau))$. Diese Lösung liegt auf dem zentralen Pfad (mit $\mu = \tau^2$).

6.2 Ein Glättungsverfahren

Im gesamten Abschnitt sei φ eine der *NCP*-Funktionen aus Beispiel 6.1, φ_τ sei die zugehörige geglättete *NCP*-Funktion, mit der dann Φ_τ definiert sei. Unter der Inneren-Punkte-Annahme besitzt $\Phi_\tau(w) = 0$ (mit $w := (x, y, z)$) für jedes $\tau > 0$ genau eine Lösung $w(\tau)$. Die Abbildung

$$\mathbb{R}_{++} \mapsto \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^n, \quad \tau \mapsto w(\tau)$$

bezeichnen wir als Glättungspfad. (Die Bildmenge der Abbildung stimmt mit dem zentralen Pfad überein.) Glättungsverfahren versuchen nun, diesen Pfad numerisch zu verfolgen. Als Pfadumgebung verwendet man hier die Menge

$$\mathcal{N}(\beta) := \{w = (x, y, z) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^n \mid \|\Phi_\tau(w)\| \leq \beta\tau, \tau \in \mathbb{R}_{++}\}$$

mit einem zu wählenden Parameter β . Setzen wir noch

$$\psi_\tau(w) := \frac{1}{2} \Phi_\tau(w)^T \Phi_\tau(w) = \frac{1}{2} \|\Phi_\tau(w)\|^2$$

so kann das **Ziel** des Verfahrens wie folgt beschrieben werden: Konstruiere zu einer Nullfolge $\{\tau_k\}$ eine Folge $\{w^k\}$ von Iterationspunkten, so dass $\{\psi_{\tau_k}(w^k)\}$ eine Nullfolge wird. Auf diese Weise wird approximativ eine Lösung von $\Phi(w) = 0$ erreicht, d.h. eine Lösung des *KKT*-Systems der primal-dualen Aufgabe (*PD*).

Wir stellen zunächst das Verfahren vor, welches im Allgemeinen eine unzulässige Folge von Iterierten $\{w^k\}$ erzeugt, und erläutern dann die einzelnen Verfahrensschritte.

ALGORITHMUS GV (*Glättungsverfahren*)

(S.0) Wähle $w^0 := (x^0, y^0, z^0) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^n$, $\tau_0 > 0$, $\beta \geq \|\Phi_{\tau_0}(w^0)\|/\tau_0$, $\varrho, \sigma \in (0, 1)$, $\varepsilon > 0$, und setze $k := 0$.

(S.1) Ist $\|\Phi(w^k)\| \leq \varepsilon$, stop!

(S.2) Bestimme die Lösung $\Delta w := (\Delta x, \Delta y, \Delta z)$ des folgenden linearen Gleichungssystems (*Newtongleichung*):

$$\Phi'_{\tau_k}(w^k) \Delta w = -\Phi_{\tau_k}(w^k) \tag{6.5}$$

(S.3) Berechne eine Schrittweite $t_k := \max\{\sigma^l \mid l = 0, 1, 2, \dots\}$, so dass gilt:

$$\psi_{\tau_k}(w^k + t_k \Delta w) \leq \psi_{\tau_k}(w^k) + t_k \sigma \nabla \psi_{\tau_k}(w^k)^T \Delta w \tag{6.6}$$

und setze $w^{k+1} := w^k + t_k \Delta w$.

(S.4) Bestimme $\gamma_k := \max\{\varrho^l \mid l = 0, 1, 2, \dots\}$, so dass

$$\|\Phi_{(1-\gamma_k)\tau_k}(w^{k+1})\| \leq \beta(1-\gamma_k)\tau_k \tag{6.7}$$

gilt und setze $\tau_{k+1} := (1-\gamma_k)\tau_k$.

(S.5) Setze $k := k + 1$ und gehe zu (S.1). \square

ERLÄUTERUNGEN:

- Die Festlegung von β in Schritt (S.0) besagt, dass $\|\Phi_{\tau_0}(w^0)\| \leq \beta\tau_0$ gilt, also w^0 in $\mathcal{N}(\beta)$ liegt. Für eine günstige Wahl des Startpunktes siehe auch die Bemerkung am Ende des Kapitels.
- In (S.2) wird im aktuellen Iterationspunkt die Suchrichtung $(\Delta x, \Delta y, \Delta z)$ bestimmt. Ausführlich lautet lautet die Newtongleichung:

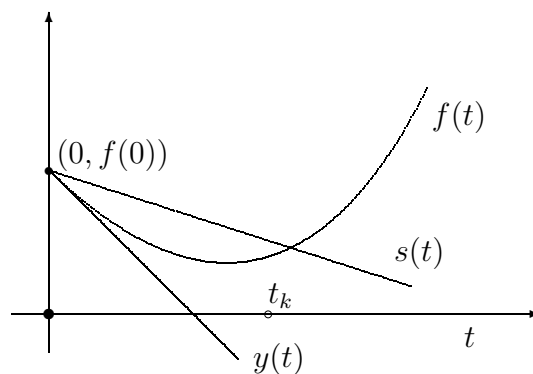
$$\begin{pmatrix} 0 & A^T & I \\ A & 0 & 0 \\ D_a & 0 & D_b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta x \\ \Delta y \\ \Delta z \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} z + A^T y - c \\ Ax - b \\ \hat{\varphi}_\tau(x, z) \end{pmatrix}$$

Dabei ist für (x, y, z) die Iterierte (x^k, y^k, z^k) und für τ der Wert τ_k einzusetzen.

- In (S.3) wird mit Hilfe der „Armijo-Regel“ die Schrittweite bestimmt. Dabei soll der Wert der Funktion $f(t) := \psi_{\tau_k}(w^k + t\Delta w)$ hinreichend abgesenkt werden. Betrachtet wird die Tangente an den Graphen von f im Punkt $(0, f(0))$:

$$y(t) := f(0) + f'(0)t = \psi_{\tau_k}(w^k) + t\nabla\psi_{\tau_k}(w^k)^T \Delta w$$

Es wird gezeigt (s. Beweis zu Lemma 6.3), dass $f'(0) = \nabla\psi_{\tau_k}(w^k)^T \Delta w$ negativ ist. Die affin-lineare Funktion $s(t) := \psi_{\tau_k}(w^k) + t\sigma\nabla\psi_{\tau_k}(w^k)^T \Delta w$ besitzt eine größere (negative) Steigung als $y(t)$ (Skizze). In der Ungleichung (6.6) setzt man an der Stelle t_k nacheinander σ^l für $l = 0, 1, \dots$ ein, und setzt $t_k = \sigma^l$, wenn für σ^l erstmalig die Ungleichung (6.6) erfüllt ist.



Anschließend wird die Iteration $w^{k+1} := w^k + t_k\Delta w$ ausgeführt.

- In (S.4) setzt man an der Stelle γ_k nacheinander die Werte ϱ^l ($l = 0, 1, \dots$) ein, und setzt $\gamma_k = \varrho^l$, wenn ϱ^l erstmalig die Ungleichung (6.7) erfüllt. Anschließend setzt man als neuen Glättungsparameter $\tau_{k+1} := (1 - \gamma_k)\tau_k$. Dieser erfüllt die Umgebungsbedingung $\|\Phi_{\tau_{k+1}}(w^{k+1})\| \leq \beta\tau_{k+1}$, so dass gilt: $w^{k+1} \in \mathcal{N}(\beta)$.

Da die Jacobi-Matrix $\Phi'_{\tau_k}(w^k)$ regulär ist, ist Schritt (S.2) ausführbar. Es wird nun gezeigt, dass das Verfahren insgesamt wohldefiniert ist.

Lemma 6.3 *Ist $Rg(A) = m$, so ist Algorithmus GV wohldefiniert und erzeugt Folgen $\{w^k\}$ und $\{\tau^k\}$ mit*

$$\|\Phi_{\tau_k}(w^k)\| \leq \beta\tau_k \quad \forall k \in \mathbb{N}_0$$

BEWEIS: Zunächst setzen wir voraus, dass gilt:

$$\|\Phi_{\tau_k}(w^k)\| > 0 \quad (6.8)$$

Als erstes wird begründet, dass Schritt (S.3) wohldefiniert ist. Dazu genügt es zu zeigen, dass $f'(t) = \nabla\psi_{\tau_k}(w^k + t\Delta w)^T \Delta w$ für $t = 0$ negativ ist. Auflösen der Newtongleichung (6.5) nach Δw ergibt:

$$\Delta w = -\Phi'_{\tau_k}(w^k)^{-1} \Phi_{\tau_k}(w^k)$$

Wegen $\nabla\psi_{\tau_k}(w^k) = \frac{1}{2} \left(\Phi_{\tau_k}(w^k)^T \Phi_{\tau_k}(w^k) \right)' = \Phi'_{\tau_k}(w^k)^T \Phi_{\tau_k}(w^k)$ folgt nun:

$$\nabla\psi_{\tau_k}(w^k)^T \Delta w = -\Phi_{\tau_k}(w^k)^T \Phi_{\tau_k}(w^k) = -\|\Phi_{\tau_k}(w^k)\|^2 < 0 \quad (6.9)$$

Also gilt für hinreichend kleine $t > 0$, dass die folgende Ungleichung gilt:

$$f(t) := \psi_{\tau_k}(w^k + t\Delta w) \leq \psi_{\tau_k}(w^k) + t\sigma \nabla\psi_{\tau_k}(w^k)^T \Delta w =: s(t)$$

Man kann also mit der in (S.3) angegebenen Methode ein t_k finden, so dass (6.6) erfüllt ist.

Es soll nun gezeigt werden, dass (S.4) wohldefiniert ist. Aus (6.9) und der Definition von ψ erhält man $\nabla\psi_{\tau_k}(w^k)^T \Delta w = -2\psi_{\tau_k}(w^k)$ und daraus durch Einsetzen in (6.6):

$$\psi_{\tau_k}(w^k + t_k\Delta w) \leq (1 - 2t_k\sigma)\psi_{\tau_k}(w^k) \quad (6.10)$$

Dies impliziert mit $w^{k+1} := w^k + t_k\Delta w$ und $\psi_{\tau_k}(w^k) > 0$:

$$\|\Phi_{\tau_k}(w^{k+1})\| = \|\Phi_{\tau_k}(w^k + t_k\Delta w)\| < \|\Phi_{\tau_k}(w^k)\| \quad (6.11)$$

Wir zeigen durch vollständige Induktion, dass für alle $k \in \mathbb{N}_0$ gilt: $\|\Phi_{\tau_k}(w^k)\| \leq \beta\tau_k$.

Für $k = 0$ gilt nach Schritt (S.0): $\|\Phi_{\tau_0}(w^0)\| \leq \beta\tau_0$.

Sei die Behauptung für ein $k \in \mathbb{N}_0$ richtig. Aus der Ungleichung (6.11) folgt dann: $\|\Phi_{\tau_k}(w^{k+1})\| < \|\Phi_{\tau_k}(w^k)\| \leq \beta\tau_k$. Die Funktion $h(\tau) := \beta\tau - \|\Phi_{\tau}(w^{k+1})\|$ ist stetig, für sie gilt: $h(\tau_k) > 0$. Somit gibt es ein $\bar{\tau} \in [0, \tau_k)$, so dass für alle $\tau \in [\bar{\tau}, \tau_k)$ gilt: $h(\tau) \geq 0$. Es gilt: $(1 - \varrho^l)\tau_k \mapsto \tau_k$ für $l \mapsto \infty$. Also gibt es einen minimalen Index l^k mit $(1 - \varrho^{l^k})\tau_k \geq \bar{\tau}$. Mit $\gamma_k := \varrho^{l^k}$ und $\tau_{k+1} := (1 - \gamma_k)\tau_k$ folgt: $h(\tau_{k+1}) \geq 0$, d.h. $\|\Phi_{\tau_{k+1}}(w^{k+1})\| \leq \beta\tau_{k+1}$.

Abschließend wird geklärt, was im Fall $\|\Phi_{\tau_k}(w^k)\| = 0$ (für ein $k \in \mathbb{N}_0$) passiert. Da $\Phi'_{\tau_k}(w^k)$ regulär ist, folgt nun aus der Newtongleichung $\Delta w = 0$. Die Armijo-Regel in Schritt (S.3) liefert dann $t_k = 1$ und es gilt: $w^{k+1} := w^k + \Delta w = w^k$. Daraus folgt dann: $\|\Phi_{\tau_k}(w^{k+1})\| = \|\Phi_{\tau_k}(w^k)\| = 0 < \beta\tau_k$. Also gibt es auch in diesem Fall ein $\gamma_k \in (0, 1)$, so dass mit $\tau_{k+1} := (1 - \gamma_k)\tau_k$ gilt: $\|\Phi_{\tau_{k+1}}(w^{k+1})\| \leq \beta\tau_{k+1}$. \square

6.3 Zur Konvergenz des Verfahrens

Das folgende Resultat besagt, dass die Folge $\{\tau_k\}$ unter relativ schwachen Voraussetzungen gegen null konvergiert, so dass auch $\|\Phi_{\tau_k}(w^k)\| \mapsto 0$ strebt. Dies bedeutet, dass das Abbruchkriterium in Schritt (S.1) erreicht wird.

Satz 6.3 *Die von Algorithmus GV erzeugte Folge $\{w^k\}$ besitze mindestens einen Häufungspunkt. Dann konvergiert die Folge $\{\tau_k\}$ gegen null.*

Der BEWEIS zu diesem Satz ist in handschriftlicher Form im Anhang enthalten.

Unter Verwendung von Satz 6.3 sind wir nun in der Lage, einen globalen Konvergenzsatz für Algorithmus GV zu beweisen.

Satz 6.4 *Jeder Häufungspunkt w^* einer von Algorithmus GV erzeugten Folge $\{w^k := (x^k, y^k, z^k)\}$ ist Minimierer der Aufgabe (PD).*

BEWEIS: Es gibt dann eine Teilfolge $\{w^k\}_{k \in K}$ von $\{w^k\}$, die gegen den Häufungspunkt w^* konvergiert. Nach Satz 6.3 konvergiert dann die Folge $\{\tau_k\}$ gegen null. Wegen

$$\|\Phi_{\tau_k}(w^k)\| \leq \beta \tau_k \quad \forall k \in \mathbb{N}_0$$

folgt dann für $k \in K$, $k \mapsto \infty$: $\|\Phi_0(w^*)\| = 0$.

Dies bedeutet: $\|\Phi(w^*)\| = 0$. Da also w^* die Gleichung $\Phi(w) = 0$ löst, genügt w^* auch den KKT-Bedingungen der Aufgabe (PD). \square

Als **günstige Wahl** für einen Startvektor erweist es sich, wenn man $w^0 := (x^0, y^0, z^0)$ wie folgt festlegt:

1. Bestimme u^0 als Lösung des linearen Gleichungssystems $AA^T u = b$.
2. Setze $x^0 := A^T u^0$.
3. Setze $y^0 = 0$ und $z := c$.

Dann sind im Laufe des Verfahrens für alle $k \in \mathbb{N}_0$ die folgenden Bedingungen erfüllt:

$$Ax^k = b, \quad z^k + A^T y^k = c \iff r_b(x^k) = 0, \quad r_c(y^k, z^k) = 0 \quad (*)$$

BEWEIS: Für $k = 0$ gilt:

$$Ax^0 = AA^T u^0 = b, \quad A^T y^0 + z^0 = c$$

Gelte nun obige Bedingung (*) für ein $k \in \mathbb{N}_0$. Dann wird $\Delta w := (\Delta x, \Delta y, \Delta z)$ berechnet aus der Newtongleichung

$$\begin{pmatrix} 0 & A^T & I \\ A & 0 & 0 \\ D_a & 0 & D_b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta x \\ \Delta y \\ \Delta z \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \hat{\varphi}_\tau(x, z) \end{pmatrix}$$

wobei $(x, y, z) := (x^k, y^k, z^k)$ ist. Daraus ist ersichtlich, dass $A\Delta x = 0$ und $A^T \Delta y + \Delta z = 0$ sind. Man kann nun leicht einsehen, dass für $x^{k+1} := x^k + t_k \Delta x$ und $(y^{k+1}, z^{k+1}) := (y^k, z^k) + t_k (\Delta y, \Delta z)$ wieder die Bedingungen $Ax^{k+1} = b$ und $z^{k+1} + A^T y^{k+1} = c$ erfüllt sind. \square

Kapitel 7

Lineare Komplementaritätsprobleme

Bei einem linearen Komplementaritätsproblem (linear complementary problem, kurz: LCP) handelt es sich - grob gesprochen - um ein spezielles Gleichungs-/Ungleichungssystem, das vielfältige Anwendungen in der Mathematik und anderen Gebieten (wie Wirtschaftswissenschaft und Technik) aufweist. Das LCP ist uns bereits im Rahmen der Spieltheorie begegnet, wo wir das Problem, ein Nash-Gleichgewicht in einer gemischten Erweiterung eines endlichen Zweipersonen-Spiels zu finden, auf die Lösung eines LCP zurückgeführt haben. Weitere Anwendungen bestehen darin, dass freie Randwertprobleme der numerischen Mathematik, Gleichgewichtsprobleme aus der Ökonomie und die *KKT*-Bedingungen spezieller Optimierungsprobleme auf die Form eines LCP gebracht werden können. Wir werden zunächst auf die Definition von LCP eingehen und ein bekanntes Problem der Optimierung als LCP darstellen. Anschließend werden wir das wohl bekannteste Verfahren zur Lösung eines LCP, das Lemke-Verfahren, behandeln. Wir werden uns dabei kurz fassen, weil dieses Verfahren auch in anderen Vorlesungen angesprochen wird. Schließlich soll ein Inneres-Punkte-Verfahren zur Lösung von LCP vorgestellt werden.

7.1 Einführung in LCP

Gegeben seien eine Matrix $M \in \mathbb{R}^{p \times p}$ und ein Vektor $q \in \mathbb{R}^p$. Das lineare Komplementaritätsproblem $LCP(M, q)$ besteht darin, Vektoren $x, z \in \mathbb{R}^p$ zu finden, so dass die folgenden Bedingungen erfüllt sind:

$$\begin{aligned} z &= Mx + q \\ x &\geq 0, z \geq 0 \\ z^T x &= 0 \end{aligned} \tag{7.1}$$

Die Bedingungen $x \geq 0$, $z \geq 0$ und $z^T x = 0$ zusammen implizieren

$$x_i z_i = 0 \quad \forall i \in \{1, \dots, p\}$$

Ist $q \geq 0$, so läßt sich das Problem (7.1) trivial durch $x := 0$ und $z := q$ lösen.

Die folgende Menge \mathcal{F} , die definiert ist durch

$$\mathcal{F} := \{(x, z) \in \mathbb{R}^p \times \mathbb{R}^p \mid z = Mx + q, (x, z) \geq 0\}$$

wird *zulässiger Bereich* des Problems $LCP(M, q)$ genannt.

$(x, z) \in \mathbb{R}^p \times \mathbb{R}^p$ heißt

- *zulässiger Vektor (Punkt)*, wenn $(x, z) \in \mathcal{F}$ ist,
- *strikt zulässiger Vektor*, wenn $(x, z) \in \mathcal{F}$ ist mit $(x, z) > 0$,
- *komplementär*, wenn $x_i z_i = 0$ ist für $i = 1, \dots, p$.

Ein komplementärer, zulässiger Vektor (x, z) ist also eine Lösung von $LCP(M, q)$.

Für eine Lösung (x, z) des Problems (7.1) gilt also stets $x_i = 0$ oder $z_i = 0$ für alle $i \in \{1, \dots, p\}$. Diese Bedingung wird auch Komplementariätsbedingung des Problems genannt. Wir wollen erwähnen, dass das Problem (7.1) auch ohne den Variablenvektor z dargestellt werden kann; eine äquivalente Formulierung lautet: Bestimme einen Vektor $x \in \mathbb{R}^p$ mit

$$x \geq 0, \quad Mx + q \geq 0, \quad x^T(Mx + q) = 0 \quad (7.2)$$

Ob das Problem $LCP(M, q)$ überhaupt lösbar ist, hängt von den Eingangsdaten (M, q) ab. Die Gestalt der Lösungsmenge (diskret, konvex, o.ä.) wird von Eigenschaften der Matrix M beeinflusst (vergl. hierzu C.Kanzow [4]). Das folgende Beispiel macht deutlich, dass bekannte Probleme aus der Optimierung äquivalent als lineare Komplementaritätsprobleme dargestellt werden können.

Beispiel 7.1 Mit den Matrizen $Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ und den Vektoren $c \in \mathbb{R}^n$, $b \in \mathbb{R}^m$ formulieren wir die folgende quadratische Optimierungsaufgabe:

$$\begin{cases} \min & \frac{1}{2}x^T Qx + c^T x \\ \text{s.d.} & Ax \leq b, \quad x \geq 0 \end{cases}$$

Mit den Lagrange-Multiplikatoren $u \in \mathbb{R}^m$, $v \in \mathbb{R}^n$ mit $u \geq 0, v \geq 0$ und dem Schlupfvektor $y \in \mathbb{R}^m$ mit $y \geq 0$ sind die KKT-Bedingungen dieses Optimierungsproblems gegeben durch:

$$\begin{aligned} -(Qx + c) &= A^T u - v \\ y + Ax &= b \\ u^T y = 0 &, \quad v^T x = 0 \\ x, y, u, v &\geq 0 \end{aligned}$$

Aus der folgenden Umformulierung der KKT-Bedingungen wird ersichtlich, dass ein lineares Komplementaritätsproblem vorliegt:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} v \\ y \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} Q & A^T \\ -A & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ u \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} c \\ b \end{pmatrix} \\ (x^T, u^T) \begin{pmatrix} v \\ y \end{pmatrix} &= 0 \\ (x, u) &\geq 0, \quad (v, y) \geq 0 \end{aligned}$$

Dabei entsprechen sich die folgenden Größen:

$$z \hat{=} \begin{pmatrix} v \\ y \end{pmatrix}, \quad x \hat{=} \begin{pmatrix} x \\ u \end{pmatrix}, \quad M \hat{=} \begin{pmatrix} Q & A^T \\ -A & 0 \end{pmatrix}, \quad q \hat{=} \begin{pmatrix} c \\ b \end{pmatrix}$$

Mit $c \in \mathbb{R}^n$, $b \in \mathbb{R}^m$ und $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ wird die folgende lineare Optimierungsaufgabe betrachtet (Spezialfall obiger Aufgabe mit $Q = 0$):

$$\begin{cases} \min & c^T x \\ \text{s.d.} & Ax \leq b, \quad x \geq 0 \end{cases}$$

Ihre KKT-Bedingungen sind gegeben durch

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} v \\ y \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 0 & A^T \\ -A & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ u \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} c \\ b \end{pmatrix} \\ (x^T, u^T) \begin{pmatrix} v \\ y \end{pmatrix} &= 0 \\ (x, u) &\geq 0, \quad (v, y) \geq 0 \end{aligned}$$

Sie besitzen offensichtlich ebenfalls die Form eines linearen Komplementaritätsproblems. \square

7.2 Ein Pivotisierungsverfahren von Lemke

Beim Verfahren von Lemke werden Begriffe und Methoden der Linearen Optimierung (Simplexverfahren) verwendet. Zu diesem Zweck formulieren wir das Lineare Komplementaritätsproblem (7.1) neu in der Form

$$\begin{aligned} (I, -M) \begin{pmatrix} z \\ x \end{pmatrix} &= q \\ x &\geq 0, \quad z \geq 0 \\ z^T x &= 0 \end{aligned} \tag{7.3}$$

Setzt man $A := (I, -M) \in \mathbb{R}^{p \times 2p}$ und $w := (z, x)$ mit $w_i := z_i$ und $w_{p+i} := x_i$ ($i = 1, \dots, p$), so wird deutlich, dass die ersten beiden Zeilen des Systems die Form

$$Aw = q, \quad w \geq 0 \tag{7.4}$$

besitzen. Dies ist der zulässige Bereich einer Linearen Optimierungsaufgabe im Standardformat. Im Folgenden werden deshalb Begriffe und in abgewandelter Form Methoden der Linearen Optimierung übernommen. (Die Notationen und Begriffsbildungen schließen sich eng an das Vorlesungsskript „Mendel“: „Lineare Optimierung“ an.)

Eine Indexmenge $B \subset \{1, \dots, 2p\}$ mit $|B| = p$ heißt Basisindexmenge (kurz: *BasisIM* oder „Basis“) von A , wenn die Spaltenvektoren A_j für $j \in B$ linear unabhängig sind. Eine Variable w_l mit $l \in B$ wird dann Basisvariable, eine Variable w_j mit $j \in N := \{1, \dots, 2p\} \setminus B$ Nichtbasisvariable (zur *BasisIM* B) genannt.

Definition 7.1 Ein zulässiger Vektor w des Problems (7.3) heißt zulässiger Basisvektor zur *BasisIM* B , wenn $w_j = 0$ ist für alle $j \in N$.

Beispiel 7.2 Gegeben sei das $LCP(M, q)$ gemäß (7.3) mit $q \geq 0$. $B := \{1, \dots, p\}$ ist dann eine *BasisIM* von $A := (I, -M)$. Mit $z := q$ und $x := 0$ liegt ein zulässiger Basisvektor des Problems (7.3) zur *BasisIM* B vor, der wegen $x^T z = 0$ sogar Lösung des LCP (7.3) ist. \square

Das Lemke-Verfahren, das nun entwickelt wird, bearbeitet ein gegenüber der Aufgabe (7.3) „gestörtes“ Problem. Dieses besteht darin, dass die Matrix $(I, -M)$ um eine Spalte $-e$ mit $e := (1, \dots, 1)^T \in \mathbb{R}^p$ und eine Variable x_0 erweitert wird:

$$\begin{aligned} (I, -M, -e) \begin{pmatrix} z \\ x \\ x_0 \end{pmatrix} &= q \\ x \geq 0, z \geq 0, x_0 &\geq 0 \\ x_i z_i &= 0 \quad \forall i = 1, \dots, p \end{aligned} \tag{7.5}$$

Definition 7.2 Gegeben sei ein zulässiger Basisvektor (z, x, x_0) von (7.5) zur *BasisIM* B . Dieser wird fast komplementär genannt, wenn folgende Bedingungen erfüllt sind:

- x_0 ist Basisvariable.
- Es gibt einen Index $s \in \{1, \dots, p\}$, so dass z_s und x_s Nichtbasisvariable sind.
- Für jedes $j \in \{1, \dots, p\} \setminus \{s\}$ ist genau eine der beiden Variablen z_j oder x_j Nichtbasisvariable.

KOMMENTAR: Ein fast komplementärer zulässiger Basisvektor (z, x, x_0) von (7.5) ist zulässig bzgl. (7.5) und erfüllt ferner die Komplementaritätsbedingung $x_i z_i = 0$ ($i = 1, \dots, p$). Zulässigkeit bzgl. der Aufgabe (7.4) liegt aber nur dann vor, wenn $x_0 = 0$ ist. Im Allgemeinen trifft das nicht zu, weil x_0 Basisvariable ist.

Die Verfahrensschritte des Lemke-Verfahrens werden an einem **verkürzten Simplex-tableau** ohne Zielfunktionszeile erläutert. Die Gleichung $z - Mx - ex_0 = q$ wird in folgendem Tableau dargestellt:

$$\begin{array}{c|cc|c}
 & x & x_0 & \text{r.S.} \\
 \hline
 z & -M & -e & q \\
 \hline
 \end{array} \tag{7.6}$$

Wir können davon ausgehen, dass $q \geq 0$ **nicht** gilt, weil andernfalls eine Lösung von $LCP(M, q)$ mit $z = q, x = 0$ vorläge.

Im Gleichungssystem (7.6) sind z_1, \dots, z_p Basisvariable (**BV**), x_1, \dots, x_p, x_0 Nichtbasisvariable (**NBV**). Wir führen nun einen Austauschschritt (**ATS**) so durch, dass x_0 gegen ein z_i in die „Basis“ getauscht wird, und zwar so, dass der Vektor q in einen Vektor \bar{q} umgerechnet wird mit $\bar{q} \geq 0$. Die Vorschriften für die Wahl des Pivotelements (Element in PS und PZ) lauten:

- Wähle als Pivotspalte (PS) die zu x_0 gehörige Spalte.
- Wähle als Pivotzeile (PZ) eine Zeile i gemäß der Bedingung

$$-q_i = \max\{-q_j \mid j \in \{1, \dots, p\}\} \tag{7.7}$$

Man kann „leicht“ begründen, dass ein ATS mit diesem Pivotelement zu einem Tableau führt, in dem der Rechte-Seite-Vektor \bar{q} größer/gleich null ist. Man prüft ohne Mühe nach, dass die Basislösung des neuen Tableaus ein komplementärer, zulässiger Basisvektor von (7.5) ist. Dieser ist auch Lösung von $LCP(M, q)$, wenn $x_0 = 0$ ist.

Zur Erläuterung des allgemeinen Verfahrensschrittes setzen wir $w := (z, x, x_0)$. Wir legen ein zu (7.6) äquivalentes Tableau $w_B + \bar{A}w_N = \bar{q}$ zur BasisIM B zugrunde, das einen fast komplementären, zulässigen Basisvektor von (7.6) repräsentiert, wobei z_s und x_s NBV seien:

$$\begin{array}{c|c|c}
 & w_N & \text{r.S.} \\
 \hline
 w_B & \bar{A} & \bar{q} \\
 \hline
 \end{array} \tag{7.8}$$

Wir tauschen nun eine dieser beiden Variablen gegen eine Variable $w_{\beta(i)}$ mit $\beta(i) \in B$ in die „Basis“, d.h. PS wird eine Spalte $\bar{A}_{\cdot s}$, die zu der gewählten NBV z_s bzw. x_s gehört. Um den Rechte-Seite-Vektor wieder größer/gleich null zu bekommen, bestimmen wir die PZ i nach dem Kriterium der Quotientenminimierung, das aus dem Simplexverfahren bekannt ist:

$$\frac{\bar{q}_i}{\bar{a}_{is}} = \min \left\{ \frac{\bar{q}_j}{\bar{a}_{js}} \mid j \in \{1, \dots, p\}, \bar{a}_{js} > 0 \right\} \tag{7.9}$$

Nimmt nach dem ATS die Variable x_0 in der (neuen) Basislösung den Wert null an (dies ist z.B. der Fall, wenn $x_0 = w_{\beta(i)}$ ist, d.h. x_0 wurde in die „Nichtbasis“ getauscht), dann

ist die Basislösung eine Lösung von $LCP(M, q)$. Die PS-Wahl ist noch zu präzisieren: Als PS wählt man die zu $w_s \in \{z_s, x_s\}$ gehörige Spalte, und zwar zu der Variablen, die nicht im vorausgehenden ATS in die „Nichtbasis“ getauscht worden ist.

Es folgt eine zusammenfassende Beschreibung der Methode von Lemke:

VERFAHREN VON LEMKE

- (1) Start: Geführt wird ein Tableau der Form (7.8).
 Zu Beginn setze $w_B := z$, $w_N := (x, x_0)$, $\bar{A} := (-M, -e)$, $\bar{q} := q$.
 Ist $\bar{q} \geq 0$, stop! ($z := \bar{q}$, $x := 0$ ist eine Lösung von $LCP(M, q)$).
 Sonst wähle die Spalte, die zu x_0 gehört, als PS,
 wähle die PZ nach (7.7) und führe einen ATS durch.
- (2) Allgemeiner Schritt: Wähle als PS die Spalte zu der Variablen $w_s \in \{z_s, x_s\}$, die nicht im vorangegangenen ATS in die „Nichtbasis“ gelangt ist.
 Bestimme die PZ i nach (7.9). Geht das nicht, stop 1 ($\bar{A}_{.s} \leq 0$).
 Sonst führe zum Pivotelement \bar{a}_{is} einen ATS durch.
 Nimmt x_0 nach dem ATS in der Basislösung den Wert null an, stop 2.
 ($w_B := \bar{q}$, $w_N := 0$ ist eine Lösung von $LCP(M, q)$).
 Andernfalls wiederhole Schritt [2] mit dem neuen Tableau.

Beispiel 7.3 Bevor die Endlichkeit des Lemke-Verfahrens begründet wird, soll es an einem Zahlenbeispiel erläutert werden. Das $LCP(M, q)$ wird gebildet mit

$$M := \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & -2 \\ 1 & -1 & 2 & -2 \\ 1 & 2 & -2 & 4 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad q := \begin{pmatrix} 2 \\ 2 \\ -2 \\ -6 \end{pmatrix}$$

Man stellt dann das Starttableau nach (7.6) auf (Tableau I) und führt nach Schritt (1) einen ATS durch und gelangt zu Tableau II:

I	x_1	x_2	x_3	x_4	x_0		
z_1	0	0	1	1	-1	2	
z_2	0	0	-1	2	-1	2	
z_3	-1	1	-2	2	-1	-2	
z_4	-1	-2	2	-4	(-1)	-6	

II	x_1	x_2	x_3	x_4	z_4		
z_1	1	2	-1	5	-1	8	
z_2	1	2	-3	6	-1	8	
z_3	0	3	-4	6	-1	4	
x_0	1	2	-2	4	-1	6	

Die Basislösung zum Tableau II ist eine fast komplementärer, zulässiger Basisvektor von (7.5). Es ist $s = 4$. PS wird Spalte zu x_4 . PZ wird mit Quotientenminimierung

bestimmt. Das Pivotelement steht in Klammern.

II	x_1	x_2	x_3	x_4	z_4	
z_1	1	2	-1	5	-1	8
z_2	1	2	-3	6	-1	8
z_3	0	3	-4	(6)	-1	4
x_0	1	2	-2	4	-1	6

III	x_1	x_2	x_3	z_3	z_4	
z_1	1	$-\frac{1}{2}$	$\left(\frac{7}{3}\right)$	$-\frac{5}{6}$	$-\frac{1}{6}$	$\frac{14}{3}$
z_2	1	-1	1	-1	0	4
x_4	0	$\frac{1}{2}$	$-\frac{2}{3}$	$\frac{1}{6}$	$-\frac{1}{6}$	$\frac{2}{3}$
x_0	1	0	$\frac{2}{3}$	$-\frac{2}{3}$	$-\frac{1}{3}$	$\frac{10}{3}$

IV	x_1	x_2	z_1	z_3	z_4	
x_3	$\frac{3}{7}$	$-\frac{3}{14}$	$\frac{3}{7}$	$-\frac{5}{14}$	$-\frac{1}{14}$	2
z_2	$\frac{4}{7}$	$-\frac{11}{14}$	$-\frac{3}{7}$	$-\frac{9}{14}$	$\frac{1}{14}$	2
x_4	$\frac{2}{7}$	$\frac{5}{14}$	$\frac{2}{7}$	$-\frac{1}{14}$	$-\frac{3}{14}$	2
x_0	$\left(\frac{5}{7}\right)$	$\frac{1}{7}$	$-\frac{2}{7}$	$-\frac{3}{7}$	$-\frac{2}{7}$	2

V	x_0	x_2	z_1	z_3	z_4	
x_3	$-\frac{3}{5}$	$-\frac{3}{10}$	$\frac{3}{5}$	$-\frac{1}{10}$	$\frac{1}{10}$	$\frac{4}{5}$
z_2	$-\frac{4}{5}$	$-\frac{9}{10}$	$-\frac{1}{5}$	$-\frac{3}{10}$	$\frac{3}{5}$	$\frac{2}{5}$
x_4	$-\frac{2}{5}$	$\frac{3}{10}$	$\frac{2}{5}$	$\frac{1}{10}$	$-\frac{1}{10}$	$\frac{6}{5}$
x_1	$\frac{7}{5}$	$\frac{1}{5}$	$-\frac{2}{5}$	$-\frac{3}{5}$	$-\frac{2}{5}$	$\frac{14}{5}$

In der Basislösung des Tableaus V ist $x_0 = 0$, also bricht das Verfahren mit einer Lösung von $LCP(M, q)$ ab. Diese lautet:

$$z = \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ z_3 \\ z_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{2}{5} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{14}{5} \\ 0 \\ \frac{4}{5} \\ \frac{6}{5} \end{pmatrix} \quad \square$$

Beispiel 7.4 Im Folgenden wird ein Beispiel angegeben, das mit einer unbegrenzt zulässigen Extremalrichtung des zulässigen Bereichs von (7.5) abbricht.

$$M := \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 2 \\ -1 & 1 & 2 & -2 \\ 1 & -2 & -2 & 2 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad q := \begin{pmatrix} 1 \\ 4 \\ -2 \\ -4 \end{pmatrix}$$

I	x_1	x_2	x_3	x_4	x_0	
z_1	0	0	-1	1	-1	1
z_2	0	0	1	-2	-1	4
z_3	1	-1	-2	2	-1	-2
z_4	-1	2	2	-2	(-1)	-4

II	x_1	x_2	x_3	x_4	z_4	
z_1	1	-2	-3	3	-1	5
z_2	1	-2	-1	0	-1	8
z_3	2	-3	-4	(4)	-1	2
x_0	1	-2	-2	2	-1	4

III	x_1	x_2	x_3	z_3	z_4	
z_1	$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{4}$	0	$-\frac{3}{4}$	$-\frac{1}{4}$	$\frac{7}{2}$
z_2	1	-2	-1	0	-1	8
x_4	$\frac{1}{2}$	$-\frac{3}{4}$	-1	$\frac{1}{4}$	$-\frac{1}{4}$	$\frac{1}{2}$
x_0	0	$-\frac{1}{2}$	0	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	3

Als PS wäre nun die Spalte zu x_3 zu wählen. Dann kann aber keine PZ gewählt werden. Zulässige Vektoren der Aufgabe (7.5) sind gegeben durch

$$z = \begin{pmatrix} \frac{7}{2} \\ 8 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + t \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} ; \quad x = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix} + t \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad t \geq 0$$

Beachte aber, dass dies wegen $x_0 = 3$ keine zulässigen Vektoren von (7.3) sind, somit auch keine Lösung von $LCP(M, q)$. \square

Wir beweisen die Endlichkeit des Lemke-Verfahrens unter einer Nicht-Entartungsvoraussetzung. Ohne diese Voraussetzung benötigt man - ähnlich wie beim Simplexverfahren - eine spezifische Pivotwahl (Antizyklentechnik), um die Endlichkeit nachzuweisen.

Satz 7.1 Sind im Laufe des Lemke-Verfahrens alle auftretenden Basislösungen (bis auf jenes des Abbruchtableaus) nicht entartet, so terminiert das Verfahren nach endlich vielen Schritten.

BEWEIS: Wir nehmen an, das Verfahren verlaufe nicht endlich. Dann würde es eine unendliche Anzahl von Tableaus T_1, T_2, \dots erzeugen. Da es nur endlich viele verschiedene Tableaus gibt, wird eine endliche Anzahl von ihnen zyklisch durchlaufen. Wenn wir annehmen, dass die Variablen in der „Nichtbasis“ bzw. „Basis“ (durch Zeilen- bzw. Spaltentausch) stets in einer festen Reihenfolge stehen, tritt nach einem Zyklus jeweils wieder ein identisches Tableau auf. Sei nun \bar{k} der erste Index, so dass sich ein Tableau $T_{\bar{k}}$ mit dem Tableau $T_{\bar{k}+\alpha}$ wiederholt. Außer in T_1 kann x_0 in keinem der Tableaus in der „Nichtbasis“ sein. Also gilt $\bar{k} \geq 2$. Die PS-Wahl ist in jedem Tableau eindeutig bestimmt, wegen der Nicht-Entartungsvoraussetzung trifft dies auch auf die PZ-Wahl zu (sonst wäre nach einem ATS das Folgetableau entartet). Also ist jedes T_{k+1} aus T_k für $k \in \mathbb{N}$ eindeutig bestimmt. Für jedes Tableau T_k mit $k \geq 2$ gilt aber auch, dass umgekehrt T_{k-1} durch T_k eindeutig festgelegt ist. Damit gilt: $T_{\bar{k}-1} = T_{\bar{k}+\alpha-1}$, was der Minimaleigenschaft von \bar{k} widerspricht. Also muss $\bar{k} = 2$ sein. Das Tableau T_2 kann also sowohl aus T_1 wie auch aus $T_{\bar{k}+\alpha-1}$ durch einen ATS berechnet werden. Beim ATS von T_1 nach T_2 wird die Variable z_s gegen x_0 in die „Nichtbasis“ getauscht (PZ-Wahl nach (7.7)). Die Pivotspalte ist dabei $-e$, die zu z_s gehörige Spalte nach dem ATS ist ebenfalls $-e$. Erfolgt der ATS von $T_{\bar{k}+\alpha-1}$ nach $T_2 = T_{\bar{k}+\alpha}$ mit PZ-Wahl nach (7.9),

so wird auch hier z_s in die „Nichtbasis“ gegen ein x_i getauscht (weil im ATS von T_2 nach T_3 die Spalte zu x_s PS ist), wobei die zu z_s gehörige Spalte in T_2 der Vektor $-e$ sein muss. Dies kann aber nicht sein, weil dann beim ATS $-e$ PS gewesen wäre. Dieser Widerspruch zeigt, dass das Verfahren nicht unendlich verlaufen kann. \square

Bemerkung 1:

Treten im Laufe des Verfahrens entartete Tableaus auf, so ist die Wahl der Pivotzeile i nach den Regeln (7.7) bzw. (7.9) nicht mehr eindeutig festgelegt. Es kann zu unerwünschten Zyklen kommen. Auch hier kann eine Antizyklentechnik ähnlich der, wie sie beim Simplexverfahren zum Einsatz kommt, angewandt werden. Sie besteht darin, dass die Wahl der Pivotzeile nach einer „verschärften Regel“ durchgeführt wird; diese wird beschrieben am sog. „Normaltableau“ (s. Vorlesungsskript „Mendel“: Lineare Optimierung). Das Gleichungssystem $z - Mx - ex_0 = q$ wird nun in einem Tableau der Form

$$\begin{array}{ccc|c}
 z & x & x_0 & \text{r.S.} \\
 \hline
 Q & \bar{M} & d & \bar{q}
 \end{array} \tag{7.10}$$

dargestellt. Zu Beginn wird $Q := I$, $\bar{M} := -M$, $d := -e$ und $\bar{q} := q$ eingesetzt. Die Wahl der Pivotspalte $\bar{A}_s = (\bar{a}_{js})_{j=1,\dots,p}$ erfolgt genau so wie im Verfahren oben angegeben. Bei der Wahl der Pivotzeile sind die Vorschriften (7.7) bzw. (7.9) durch folgende Regeln zu ersetzen:

$$\begin{aligned}
 (1) \quad & -(q_i, e_i^T) = \text{lexmax}\{-(q_j, e_j^T) \mid j \in \{1, \dots, p\}\} \\
 (2) \quad & \frac{(\bar{q}_i, Q_i)}{\bar{a}_{is}} = \text{lexmin} \left\{ \frac{(\bar{q}_j, Q_j)}{\bar{a}_{js}} \mid j \in \{1, \dots, p\}, \bar{a}_{js} > 0 \right\}
 \end{aligned}$$

Es ist dann ein ATS im Normaltableau zum Pivotelement \bar{a}_{is} durchzuführen, wobei die Reihenfolge der Variablen im Tableau beibehalten wird. Man kann beweisen, dass mit diesen Regeln das Lemke-Verfahren nach endlich vielen Schritten abbricht, ohne dass eine Nicht-Entartung der Tableaus vorausgesetzt werden muss. \square

Bemerkung 2:

Bricht das Lemke-Verfahren mit „stop 2“ ab ($x_0 = 0$), so hat es eine Lösung von $LCP(M, q)$ ermittelt. Terminiert es mit „stop 1“ ($\bar{A}_s \leq 0$), so besitzt der zulässige Bereich des gestörten Problems (7.5) eine unbeschränkte Kante. Welche Schlußfolgerungen kann man daraus für die Lösbarkeit von $LCP(M, q)$ ziehen?

Allgemein gültige Aussagen für $M \in \mathbb{R}^{p \times p}$ sind nicht bekannt, wohl aber für spezielle Klassen von Matrizen. Wir geben (ohne Beweis) einen Spezialfall an:

- Die Matrix M sei positiv semidefinit. Bricht das Verfahren mit „stop 1“ ab, so besitzt $LCP(M, q)$ keine Lösung.
- Ist M positiv definit, so erfolgt der Abbruch stets mit „stop 2“, also einer Lösung des $LCP(M, q)$.

Weitere Aussagen über die Lösbarkeit von $LCP(M, q)$ in Abhängigkeit der Eingangsdaten (M, q) sind in der einschlägigen Literatur zu finden (vergl.z.B. C.Kanzow [4]).

7.3 Ein unzulässiges Inneres-Punkte-Verfahren

Innere-Punkte-Verfahren zur Lösung eines Problems $LCP(M, q)$ beruhen auf einem Prinzip, das uns schon aus den entsprechenden Verfahren zur Lösung des primal-dualen Problems (PD) bekannt ist. Ebenso wie dort versuchen diese Verfahren, über eine Folge von gestörten Problemen $pLCP(M, q, \mu)$ eine Lösung der ursprünglichen Aufgabe zu erreichen (p steht für „perturbed“ (gestört)). Das gestörte Problem $pLCP(M, q, \mu)$ besitzt die folgende Form:

$$z = Mx + q, \quad x > 0, \quad z > 0, \quad x_i z_i = \mu \quad \forall i = 1, \dots, p \quad (7.11)$$

Der Parameter $\mu \in \mathbb{R}_{++}$ wird dabei sukzessive auf null abgesenkt, so dass man davon ausgehen kann, dass eine Lösung von $pLCP(M, q, \mu)$ für hinreichend kleine μ eine Näherungslösung des ursprünglichen Problems $LCP(M, q)$ darstellt.

Mit der Diagonalmatrix $X := \text{diag}(x_1, \dots, x_p)$ und dem Vektor $e := (1, \dots, 1)^T$ kann man die letzte Bedingung aus (7.11) äquivalent wie folgt formulieren: $Xz = \mu e$. Wir definieren nun folgende Funktion:

$$F_\mu : \mathbb{R}^p \times \mathbb{R}^p \mapsto \mathbb{R}^p \times \mathbb{R}^p, \quad F_\mu(x, z) := \begin{pmatrix} Mx + q - z \\ Xz - \mu e \end{pmatrix} \quad (7.12)$$

Damit ist das Gleichungs-/Ungleichungssystem (7.11) äquivalent zu

$$F_\mu(x, z) = 0, \quad x > 0, \quad z > 0$$

Wir fassen die allgemeine Verfahrensweise eines IPM-Verfahrens in einem Modellalgorithmus zusammen. Man beachte, dass die Folge der Iterierten, die das Verfahren erzeugt, im Allgemeinen nicht zulässig für $LCP(M, q)$ ist.

ALGORITHMUS IPM (*IPM-Modellalgorithmus für LCP*)

(S.0) Gebe eine Folge $\{\mu_k\} \subset \mathbb{R}_{++}$ mit $\mu_k \downarrow 0$ vor. Setze $k := 0$.

(S.1) Bestimme eine Lösung $(x^k, z^k) := (x(\mu_k), z(\mu_k))$ des gestörten Problems

$$F_{\mu_k}(x, z) = 0, \quad x > 0, \quad z > 0$$

(S.2) Löse (x^k, z^k) das Problem $LCP(M, q)$, dann stop.

(S.3) Setze $k := k + 1$, und gehe zu (S.1).

Bevor wir diesen Algorithmus zu einem praktisch einsetzbaren Verfahren ausformulieren, sind theoretische Grundlagen für Innere-Punkte-Methoden in Bezug auf LCP bereit zu stellen. Das folgende Lemma gewährleistet, dass in Schritt (S.2) unter bestimmten Voraussetzungen das Newton-Verfahren eingesetzt werden kann.

Lemma 7.1 *Ist $M \in \mathbb{R}^{p \times p}$ eine positiv semidefinite Matrix und $(x, z) \in \mathbb{R}_{++}^p \times \mathbb{R}_{++}^p$, so ist die Jacobi-Matrix $F'_\mu(x, z)$ regulär.*

BEWEIS: Die Jacobi-Matrix $F'_\mu(x, z)$ ist gegeben durch

$$F'_\mu(x, z) = \begin{pmatrix} M & -I \\ Z & X \end{pmatrix}$$

mit $X := \text{diag}(x_1, \dots, x_p)$ und $Z := \text{diag}(z_1, \dots, z_p)$. Aus $F'_\mu(x, z)u = 0$ mit $u := (u^1, u^2)$ folgt:

$$\begin{aligned} Mu^1 &= u^2 \\ Zu^1 + Xu^2 &= 0 \end{aligned}$$

Daraus folgt: $(X^{-1}Z + M)u^1 = 0$, und weiter: $(u^1)^T(X^{-1}Z + M)u^1 = 0$. Die Diagonalmatrix $X^{-1}Z$ ist positiv definit und M ist positiv semidefinit. Da somit $X^{-1}Z + M$ positiv definit ist, folgt: $u^1 = 0$. Also ist auch $u^2 = 0$. Das LGS $F'_\mu(x, z)u = 0$ besitzt nur die Lösung $u = 0$, also ist $F'_\mu(x, z)$ regulär. \square

Wir kommen nun zu einem wichtigen Resultat, das Auskunft gibt über die Lösbarkeit des in Schritt (S.1) angegebenen Problems. Dafür ist eine sog. „**Innere-Punkte-Annahme**“ erforderlich, zu deren Formulierung wir die Menge

$$\overset{\circ}{\mathcal{F}} := \{(x, z) \in \mathbb{R}^p \times \mathbb{R}^p \mid z = Mx + q, x > 0, z > 0\}$$

eingeführen. Zum Beweis des Satzes wird ferner das folgende Lemma benötigt.

Lemma 7.2 *Seien $\alpha^1, \alpha^2, \beta^1, \beta^2 > 0$ mit $(\alpha^1, \beta^1) \neq (\alpha^2, \beta^2)$. Dann gilt:*

$$(\alpha^1 - \alpha^2)(\beta^1 - \beta^2) < |\alpha^1\beta^1 - \alpha^2\beta^2|$$

BEWEIS: Es werden drei Fälle unterschieden:

- 1) Es sei $(\alpha^1 - \alpha^2)(\beta^1 - \beta^2) < 0$. Dann ist die Behauptung offensichtlich richtig.
- 2) Sei $(\alpha^1 - \alpha^2)(\beta^1 - \beta^2) = 0$. O.B.d.A. sei $\alpha^1 = \alpha^2$. Nach Voraussetzung ist dann $\beta^1 \neq \beta^2$ und somit ist $|\alpha^1\beta^1 - \alpha^2\beta^2| > 0$.
- 3) Sei nun $(\alpha^1 - \alpha^2)(\beta^1 - \beta^2) > 0$. Sei zunächst angenommen, dass $\alpha^1 > \alpha^2$ und $\beta^1 > \beta^2$ ist. Dann gilt:

$$\begin{aligned} (\alpha^1 - \alpha^2)(\beta^1 - \beta^2) - |\alpha^1\beta^1 - \alpha^2\beta^2| &= \alpha^1\beta^1 - \alpha^1\beta^2 - \alpha^2\beta^1 + \alpha^2\beta^2 - \alpha^1\beta^1 + \alpha^2\beta^2 \\ &= \alpha_2(\beta^2 - \beta^1) + \beta_2(\alpha^2 - \alpha^1) < 0 \end{aligned}$$

Die Begründung verläuft analog, wenn man $\alpha^1 < \alpha^2$ und $\beta^1 < \beta^2$ annimmt. \square

Satz 7.2 Seien $M \in \mathbb{R}^{p \times p}$ positiv semidefinit, $q \in \mathbb{R}^p$ und $\mathring{\mathcal{F}} \neq \emptyset$. Dann besitzt das gestörte Problem $pLCP(M, q, \mu)$ für jedes $\mu > 0$ genau eine Lösung $(x(\mu), z(\mu))$.

BEWEIS:

a) Zunächst wird gezeigt, dass das Problem $pLCP(M, q, \mu)$ höchstens eine Lösung besitzt. Dazu gehen wir von der Annahme aus, dass es für ein $\mu > 0$ zwei Lösungen $x^1 \neq x^2$ besitze mit $z^1 := Mx^1 + q$ und $z^2 := Mx^2 + q$. Betrachte die nichtleere Teilmenge $J := \{i \in \{1, \dots, p\} \mid x_i^1 \neq x_i^2\}$. Da M positiv semidefinit ist, gibt es einen Index $i_0 \in J$, so dass

$$(x_{i_0}^1 - x_{i_0}^2) [M(x^1 - x^2)]_{i_0} \geq 0$$

gilt. Da x^1, x^2 Lösungen von $pLCP(M, q, \mu)$ sind, folgt mit Lemma 7.2:

$$0 = |\mu - \mu| = |x_{i_0}^1 z_{i_0}^1 - x_{i_0}^2 z_{i_0}^2| > (x_{i_0}^1 - x_{i_0}^2)(z_{i_0}^1 - z_{i_0}^2) = (x_{i_0}^1 - x_{i_0}^2) [M(x^1 - x^2)]_{i_0} \geq 0$$

Dies ist ein Widerspruch. Also gilt $J = \emptyset$.

b) Es soll nun die Existenz einer Lösung von $pLCP(M, q, \mu)$ für beliebiges $\mu > 0$ nachgewiesen werden. Zu diesem Zweck wird die Funktion F_μ verallgemeinert, aber nur für diesen Beweis. An Stelle von μe mit $\mu \in (0, \infty)$ setzen wir $\mu := (\mu_1, \dots, \mu_p)^T$ und definieren F_μ neu durch

$$F_\mu(x, z) := \begin{pmatrix} Mx + q - z \\ Xz - \mu \end{pmatrix}$$

Wir werden zeigen, dass für jedes $\mu \in \mathbb{R}_{++}^p$ das System

$$F_\mu(x, z) = 0, \quad x > 0, \quad z > 0$$

lösbar ist. Für $\mu_1 = \dots = \mu_p$ folgt daraus die Lösbarkeit des Systems mit der in (7.12) angegebenen Funktion.

Sei also $\mu \in \mathbb{R}_{++}^p$ vorgegeben, und sei ferner (\hat{x}, \hat{z}) ein fester Punkt in $\mathring{\mathcal{F}}$. Wir setzen

$$\hat{\mu} := \hat{X}\hat{z} := (\hat{x}_1\hat{z}_1, \dots, \hat{x}_p\hat{z}_p)^T \in \mathbb{R}_{++}^p$$

Betrachte nun das folgende von einem Parameter $t \in [0, 1]$ abhängige System:

$$Mx + q - z = 0, \quad Xz = t\mu + (1-t)\hat{\mu}, \quad x > 0, \quad z > 0 \quad (7.13)$$

Für $t = 0$ ist (\hat{x}, \hat{z}) eine Lösung dieses Systems. Sei nun

$$\bar{t} := \sup\{\hat{t} \in [0, 1] \mid (7.13) \text{ ist lösbar für alle } t \in [0, \hat{t}]\}$$

Dann existiert eine Folge $\{(x^k, z^k, t_k)\}$ mit $\lim t_k = \bar{t}$, so dass (x^k, z^k) das System (7.13) für $t = t_k$ löst. Angenommen es ist $\bar{t} < 1$. Aus der positiven Semidefinitheit von M folgt:

$$0 \leq (x^k - \hat{x})^T M(x^k - \hat{x}) = (x^k - \hat{x})^T (z^k - \hat{z}) = (x^k)^T z^k + \hat{x}^T \hat{z} - (x^k)^T \hat{z} - \hat{x}^T (z^k)$$

Da nach (7.13) $x_i^k z_i^k = t \mu_i + (1-t) \hat{\mu}_i$ gilt, folgt:

$$(x^k)^T \hat{z} + \hat{x}^T (z^k) \leq (x^k)^T z^k + \hat{x}^T \hat{z} \leq \sum_{i=1}^p (\mu_i + \hat{\mu}_i) + \hat{x}^T \hat{z} =: c$$

Da $x^k, z^k > 0$ und $\hat{x}, \hat{z} > 0$ sind, erhält man für alle $i = 1, \dots, p$:

$$\hat{z}_i x_i^k \leq c \quad \text{und} \quad \hat{x}_i z_i^k \leq c$$

Somit ist die Folge (x^k, z^k) beschränkt, sie besitzt also einen Häufungspunkt. Sei (\bar{x}, \bar{z}) ein solcher. Aus Stetigkeitsgründen gilt dann:

$$M \bar{x} + q - \bar{z} = 0, \quad \bar{X} \bar{z} = \bar{t} \mu + (1 - \bar{t}) \hat{\mu}, \quad \bar{x} \geq 0, \quad \bar{z} \geq 0$$

Da $\bar{t} \mu + (1 - \bar{t}) \hat{\mu} > 0$ ist, gilt in diesem System sogar $\bar{x} > 0, \bar{z} > 0$. Also ist (\bar{x}, \bar{z}) eine Lösung des Systems (7.13) für $t = \bar{t}$.

Die Jacobi-Matrix $F'_{t\mu+(1-t)\hat{\mu}}(x, z)$ ist im Punkt $(x, z) = (\bar{x}, \bar{z})$ nach Lemma 8.1 regulär. Daher ist der Satz über implizite Funktionen anwendbar, aus dem folgt, dass das System

$$M x + q - z = 0, \quad X z = t \mu + (1 - t) \hat{\mu} \tag{7.14}$$

für alle t in einer Umgebung von \bar{t} lösbar ist und die Lösungen stetig differenzierbar von t abhängen. Für Parameter t hinreichend nahe an \bar{t} erfüllen die Lösungen somit auch die Bedingungen $x > 0, z > 0$. Damit besitzt das System (7.13) auch eine Lösung für $t > \bar{t}$, wenn t hinreichend nach bei \bar{t} liegt. Dies ist aber ein Widerspruch zur Wahl von \bar{t} .

Also ist $\bar{t} = 1$. Also besitzt (7.13) auch eine Lösung für $t = 1$. Dies bedeutet, dass

$$M x + q - z = 0, \quad X z = \mu, \quad x > 0, \quad z > 0$$

lösbar ist. Ersetzt man darin den Vektor $(\mu_1, \dots, \mu_p)^T$ speziell durch μe (mit $\mu \in \mathbb{R}_{++}$), so ergibt sich, dass $pLCP(M, q, \mu)$ lösbar ist für beliebiges $\mu \in \mathbb{R}_{++}$. \square

Unmittelbar aus dem Beweis folgt, dass die Funktion

$$w : \mathbb{R}_{++} \mapsto \mathring{\mathbb{R}}_{++}^p \times \mathring{\mathbb{R}}_{++}^p, \quad w(\mu) := (x(\mu), z(\mu))$$

eine stetig differenzierbare Kurve in $\mathring{\mathcal{F}}$ definiert, die wir wieder als „zentralen Pfad“ bezeichnen. Es wird nun eine Folge $\{w(\mu_k)\}$ auf diesem Pfad für $\mu_k \downarrow 0$ betrachtet.

Korollar 7.1 *Die Matrix M sei positiv semidefinit und es gelte $\mathring{\mathcal{F}} \neq \emptyset$. Sei $\{\mu_k\}$ eine Nullfolge in \mathbb{R}_{++} . Dann besitzt die Folge $\{(x(\mu_k), z(\mu_k))\}$ einen Häufungspunkt in \mathcal{F} und jeder Häufungspunkt (\bar{x}, \bar{z}) ist eine Lösung des Problems $LCP(M, q)$.*

BEWEIS: Ähnlich wie im Beweis oben zeigt man, dass die Folge $\{(x(\mu_k), z(\mu_k))\}$ beschränkt ist. Die Existenz eines Häufungspunktes ist damit sichergestellt. Sei also (\bar{x}, \bar{z})

ein Häufungspunkt der Folge $\{w(\mu_k)\}$ und $\{w(\mu_k)\}_K$ eine gegen diesen Häufungspunkt konvergente Teilfolge. Dann gilt für alle $k \in K$:

$$z(\mu_k) = Mx(\mu_k) + q, \quad X(\mu_k)z(\mu_k) = \mu_k e, \quad x(\mu_k) > 0, \quad z(\mu_k) > 0$$

Für $k \in K$ mit $k \mapsto \infty$ erhält man daraus:

$$\bar{z} = M\bar{x} + q, \quad \bar{X}\bar{z} = 0, \quad \bar{x} \geq 0, \quad \bar{z} \geq 0$$

Also ist (\bar{x}, \bar{z}) eine Lösung von $LCP(M, q)$. \square

Insgesamt ist damit gezeigt, dass der angegebene *Algorithmus IPM* zur Lösung des Problems $LCP(M, q)$ wohldefiniert ist, wenn M positiv semidefinit und $\mathcal{F} \neq \emptyset$ ist.

Bemerkung: Da unter den angegebenen Voraussetzungen ein zentraler Pfad existiert, können für $LCP(M, q)$ pfadfolgende Verfahren formuliert werden, die völlig analog zu denjenigen sind, die wir für das primal-duale Problem (*PD*) entwickelt haben. Insbesondere ist es möglich, das Innere-Punkte-Verfahren *LPF* oder das Äußere-Punkte-Verfahren *EPF* auf lineare Komplementaritätsprobleme zu übertragen (vgl. hierzu [3], Kapitel 8). Zu beachten ist lediglich, dass die Newtongleichung im Punkt $(x, z) := (x^k, z^k)$ eine etwas andere Form besitzt, nämlich

$$\begin{pmatrix} M & -I \\ Z & X \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta x \\ \Delta z \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} Mx + q - z \\ Xz - \mu_k e \end{pmatrix}$$

wobei im Fall eines Inneren-Punkte-Verfahrens $Mx + q - z = 0$ gilt. Die Konvergenzanalyse verläuft dann analog zu den entsprechenden Verfahren, die zur Lösung der Aufgabe (*PD*) vorgestellt worden sind.

Wir verzichten darauf, die in den Kapiteln 4 und 5 vorgestellten Verfahren auf Lineare Komplementaritätsprobleme zu übertragen. Stattdessen stellen wir eine auf den Prinzipien des Modellalgorithmus *IPM* beruhende Heuristik vor, die das Problem $LCP(M, q)$ unter der Voraussetzung, dass M positiv semidefinit ist, löst. Es handelt sich um ein unzulässiges Verfahren, das seinerseits auch auf (*LP*)-Probleme übertragen werden kann.

ALGORITHMUS EPF-LCP (*Praktisches Verfahren*)

(S.0) Wähle $(x^0, z^0) \in \mathbb{R}_{++}^p \times \mathbb{R}_{++}^p$, $\sigma \in (0, 1)$, $\varepsilon > 0$ und setze $k := 0$.

(S.1) Falls $(x^k)^T z^k + \|Mx^k + q - z^k\| \leq \varepsilon$, stop.

(S.2) Setze $\mu_k := \sigma \frac{(x^k)^T z^k}{p}$ und bestimme eine Lösung $(\Delta x^k, \Delta z^k)$ der Newtongleichung

$$\begin{pmatrix} M & -I \\ Z^k & X^k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta x \\ \Delta z \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} Mx^k + q - z^k \\ X^k z^k - \mu_k e \end{pmatrix}$$

(S.3) Bestimme eine Schrittweite t_k gemäß

$$t_k := \min\left\{1, \alpha \min\left\{-\frac{x_i^k}{\Delta x_i^k}, -\frac{z_i^k}{\Delta z_i^k} \mid \Delta x_i^k < 0, \Delta z_i^k < 0, i = 1, \dots, p\right\}\right\}$$

(S.4) Setze $x^{k+1} := x^k + t_k \Delta x^k$, $z^{k+1} := z^k + t_k \Delta z^k$ und $k := k + 1$, gehe zu (S.1).

KOMMENTAR:

- In Schritt (S.1) wird geprüft, ob die Komplementaritäts- wie auch die Zulässigkeitsbedingung „näherungsweise“ erfüllt sind.
- Die Zahl

$$t_1 := \min\left\{-\frac{x_i^k}{\Delta x_i^k}, -\frac{z_i^k}{\Delta z_i^k} \mid \Delta x_i^k < 0, \Delta z_i^k < 0, i = 1, \dots, p\right\}$$

die in Schritt (S.3) auftritt, gibt eine Schrittlänge an, die bis zum Rand des zulässigen Bereichs führen würde. αt_1 mit $\alpha \in (0, 1)$ gewährleistet, dass die folgende Iterierte noch im Innern des zulässigen Bereichs liegt. Durch die Festsetzung $t_k := \min\{1, \alpha t_1\}$ wird garantiert, dass die Schrittweite höchstens 1 ist.

- Eine typische Wahl der im Algorithmus auftretenden Parameter lautet:

$$\varepsilon = 10^{-6}, \alpha = 0.99995, \sigma = 1/p$$

7.4 Ein Glättungsverfahren

In diesem Abschnitt werden Glättungsmethoden zur Lösung der Aufgabe $LCP(M, q)$ eingesetzt. Im Wesentlichen folgen wir dabei jenen Prinzipien, die wir im Kapitel 6 entwickelt haben. Die Aufgabe $LCP(M, q)$ liege in der Form (7.2) vor:

$$x \geq 0, \quad Mx + q \geq 0, \quad x^T(Mx + q) = 0$$

Eine äquivalente Formulierung dieser Aufgabe ist gegeben durch

$$x_i \geq 0, \quad [Mx + q]_i \geq 0, \quad x_i [Mx + q]_i = 0 \quad (\forall i = 1, \dots, p) \quad (7.15)$$

Wenn man nun berücksichtigt, dass eine NCP -Funktion $\varphi : \mathbb{R}^2 \mapsto \mathbb{R}$ durch die Bedingung

$$\varphi(a, b) = 0 \iff a \geq 0, b \geq 0, ab = 0$$

charakterisiert wird, so können wir die in (7.15) gegebene Aufgabe auf folgende Weise neu formulieren:

$$\varphi(x_i, [Mx + q]_i) = 0 \quad (\forall i = 1, \dots, p)$$

Schließlich definieren wir noch die Funktion

$$\Phi : \mathbb{R}^p \mapsto \mathbb{R}^p, \quad \Phi(x) := \begin{pmatrix} \varphi(x_1, [Mx + q]_1) \\ \vdots \\ \varphi(x_p, [Mx + q]_p) \end{pmatrix} \quad (7.16)$$

womit sich die Bedingungen (7.15) in der folgenden Gestalt schreiben lassen:

$$\Phi(x) = 0$$

Damit ist die Lösung des Problems $LCP(M, q)$ auf ein Nullstellen-Problem zurückgeführt, allerdings mit dem numerischen Nachteil, dass Φ keine stetig differenzierbare Funktion ist. Diese Schwierigkeit soll nun in einer uns bereits vertrauten Weise überwunden werden, nämlich dadurch, dass wir Φ durch stetig differenzierbare Funktionen approximieren.

Im Folgenden sei $\varphi : \mathbb{R}^2 \mapsto \mathbb{R}$ stets eine der beiden im Beispiel 6.1 eingeführten NCP -Funktionen (Minimum-Funktion oder Fischer-Burmeister-Funktion) und φ_τ die zugehörige geglättete NCP -Funktion gemäß Beispiel 6.2. Die Φ approximierende Funktion Φ_τ mit $\tau \in (0, \infty)$ sei dann wie folgt definiert:

$$\Phi_\tau : \mathbb{R}^p \mapsto \mathbb{R}^p, \quad \Phi_\tau(x) := \begin{pmatrix} \varphi_\tau(x_1, [Mx + q]_1) \\ \vdots \\ \varphi_\tau(x_p, [Mx + q]_p) \end{pmatrix} \quad (7.17)$$

Neben der stetigen Differenzierbarkeit auf \mathbb{R}^p besitzt Φ_τ zwei weitere wichtige Eigenschaften, die in folgendem Lemma angegeben werden.

Lemma 7.3 a) *Es ist $\Phi_\tau(x) = 0$ genau dann, wenn x folgende Bedingungen erfüllt:*

$$x_i > 0, \quad [Mx + q]_i > 0, \quad x_i[Mx + q]_i = \tau^2 \quad (\forall i = 1, \dots, p)$$

b) *Für alle $x \in \mathbb{R}^p$ und alle $\tau \in (0, \infty)$ gibt es eine Konstante $\kappa > 0$, so dass gilt:*

$$\|\Phi(x) - \Phi_\tau(x)\| \leq \kappa\tau$$

BEWEIS: a) Es wird die geglättete Minimumfunktion zugrunde gelegt (der Beweis mit der geglättete Fischer-Burmeister-Funktion ist ähnlich). Es gelten die folgenden Äquivalenzen:

$$\begin{aligned} \Phi_\tau(x) = 0 &\iff \varphi_\tau(x_i, [Mx + q]_i) = 0 \quad (i = 1, \dots, p) \\ &\iff x_i + [Mx + q]_i = \sqrt{(x_i - [Mx + q]_i)^2 + 4\tau^2} \quad (i = 1, \dots, p) \\ &\iff (x_i + [Mx + q]_i)^2 = (x_i - [Mx + q]_i)^2 + 4\tau^2 \quad (i = 1, \dots, p) \\ &\iff x_i[Mx + q]_i = \tau^2 \quad (i = 1, \dots, p) \end{aligned}$$

Offenbar ist $x_i + [Mx + q]_i > 0$. Mit $x_i[Mx + q]_i = \tau^2$ gilt somit auch $x_i > 0$, $[Mx + q]_i > 0$.

b) Der Beweis von Lemma 6.1 kann wörtlich übertragen werden. \square

Das folgende Resultat ist eine unmittelbare Folgerung aus Lemma 7.3.

Satz 7.3 Für $\tau \in (0, \infty)$ ist $x := x(\tau)$ genau dann eine Lösung des gestörten Problems $pLCP(M, q, \mu)$ mit $\mu := \tau^2$, wenn x Lösung des Gleichungssystems $\Phi_\tau(x) = 0$ ist.

Unter den Voraussetzungen, dass die Matrix M positiv semidefinit und $\overset{\circ}{\mathcal{F}} \neq \emptyset$ ist, besitzt das gestörte Problem $pLCP(M, q, \mu)$ für jedes $\mu \in (0, \infty)$ genau eine Lösung $x(\mu)$ (vgl. Satz 7.2). Durch die Funktion $\mathbb{R}_{++} \mapsto \mathbb{R}^p$, $\mu \mapsto x(\mu)$ wird eine stetig differenzierbare Kurve definiert („zentraler Pfad“). Dabei ist jeder Häufungspunkt x^* einer Folge $\{x(\mu_k)\}$ mit $\mu_k \downarrow 0$ eine Lösung der Aufgabe $LCP(M, q)$ (vgl. Korollar 7.1). Nach Satz 7.3 ist jede Lösung $x(\tau)$ der Gleichung

$$\Phi_\tau(x) = 0$$

für $\tau \in (0, \infty)$ ein Punkt auf dem zentralen Pfad, wobei die Parameter der Beziehung $\mu = \tau^2$ genügen.

Diese Ausführungen eröffnen eine weitere Möglichkeit, ein Lösungsverfahren für das Problem $LCP(M, q)$ zu konstruieren.

ALGORITHMUS GV (GV-Modellalgorithmus für LCP)

(S.0) Gebe eine Folge $\{\mu_k\} \subset \mathbb{R}_{++}$ mit $\mu_k \downarrow 0$ vor. Setze $k := 0$.

(S.1) Bestimme eine Lösung $x^k := x(\tau_k)$ der Gleichung $\Phi_{\tau_k}(x) = 0$

(S.2) Löst x^k das Problem $LCP(M, q)$, setze $z^k := Mx^k + q$, stop.

(S.3) Setze $k := k + 1$, und gehe zu (S.1).

Der folgende Satz besagt nun, dass man zur Lösung der in (S.1) auftretenden Teilprobleme das Newton-Verfahren einsetzen kann.

Satz 7.4 Seien $M \in \mathbb{R}^{p \times p}$ positiv semidefinit und $q \in \mathbb{R}^p$. Dann ist die Jacobi-Matrix $\Phi'_\tau(x)$ für jedes $\tau > 0$ und jedes $x \in \mathbb{R}^p$ regulär.

BEWEIS: Sei $x \in \mathbb{R}^p$. Dann ist

$$\Phi'_\tau(x) = D_{a,\tau}(x) + D_{b,\tau}(x) M$$

Dabei sind $D_{a,\tau}(x)$ und $D_{b,\tau}(x)$ die folgenden Diagonalmatrizen:

$$D_{a,\tau}(x) := \text{diag} \left(\frac{\partial \varphi_\tau}{\partial a}(x_1, [Mx + q]_1), \dots, \frac{\partial \varphi_\tau}{\partial a}(x_p, [Mx + q]_p) \right) \in \mathbb{R}^{p \times p}$$

$$D_{b,\tau}(x) := \text{diag} \left(\frac{\partial \varphi_\tau}{\partial b}(x_1, [Mx + q]_1), \dots, \frac{\partial \varphi_\tau}{\partial b}(x_p, [Mx + q]_p) \right) \in \mathbb{R}^{p \times p}$$

Man rechnet nach (z.B. wenn φ_τ die geglättete Minimumfunktion ist), dass die Diagonalelemente dieser Matrizen positive Zahlen sind. Also sind die Matrizen $D_{a,\tau}(x)$

und $D_{b,\tau}(x)$ positiv definit. Damit ist auch die Matrix $D_{b,\tau}(x)^{-1}D_{a,\tau}(x) + M$ positiv definit, also auch regulär. Daraus folgt, dass auch $D_{a,\tau}(x) + D_{b,\tau}(x)M$ regulär ist. \square

In einer praktischen Implementierung wird man die in Schritt (S.2) des Verfahrens auftretenden Teilprobleme nicht exakt lösen. Vielmehr wird man sich mit einer Näherungslösung für das Teilproblem begnügen. Im folgenden Algorithmus wendet man lediglich einen Newton-Schritt auf das Gleichungssystem $\Phi_\tau(x) = 0$ an, um dann mit einer Senkung des Glättungsparameters fortzufahren. Wie beim Glättungsverfahren zur Lösung der Aufgabe (PD) (vgl. Kapitel 6), wird der Abstieg an der folgenden Funktion gemessen:

$$\psi_\tau(x) := \frac{1}{2}\Phi_\tau(x)^T\Phi_\tau(x) = \frac{1}{2}\|\Phi_\tau(x)\|^2$$

ALGORITHMUS GV-LCP (Praktisches Glättungsverfahren)

(S.0) Wähle $x^0 \in \mathbb{R}^p$, $\tau_0 > 0$, $\beta \in (0, 1)$, $\sigma \in (0, 1/2)$, $\varepsilon > 0$, $\gamma, \eta \in (0, 1)$, $\varrho > 0$, $p > 2$ und setze $k := 0$.

(S.1) Ist $\|\Phi(x^k)\| \leq \varepsilon$, stop!

(S.2) Bestimme d^k als Lösung des folgenden Gleichungssystems (Newtongleichung):

$$\Phi'_{\tau_k}(x^k) d = -\Phi_{\tau_k}(x^k)$$

Ist dieses Gleichungssystem nicht lösbar oder ist die Abstiegsbedingung

$$\nabla\psi_{\tau_k}(x^k)^T d^k \leq -\varrho \|d^k\|^p$$

nicht erfüllt, so setze man $d^k := -\nabla\psi_{\tau_k}(x^k)$.

(S.3) Berechne eine Schrittweite $t_k := \max\{\beta^l \mid l = 0, 1, 2, \dots\}$, so dass gilt:

$$\psi_{\tau_k}(x^k + t_k d^k) \leq \psi_{\tau_k}(x^k) + t_k \sigma \nabla\psi_{\tau_k}(x^k)^T d^k$$

und setze $x^{k+1} := x^k + t_k d^k$.

(S.4) Ist $\|\Phi_{\tau_k}(x^k)\| \leq \gamma\tau_k$, so setze $\tau_{k+1} := \eta\tau_k$, andernfalls setze $\tau_{k+1} = \tau_k$.

(S.5) Setze $k := k + 1$ und gehe zu (S.1). \square

KOMMENTAR:

- Eine Lösung x^* der Gleichung $\Phi(x) = 0$ ist Lösung der Aufgabe $LCP(M, q)$, der Abbruch in Schritt (S.1) liefert also eine Näherungslösung x^k der Aufgabe.
- In (S.2) wird eine Suchrichtung d^k durch Lösen der Newtongleichung bestimmt. Geht das nicht oder wird mit d^k keine ausreichende Absenkung der Funktion ψ_{τ_k} im Punkt x^k erzielt, so setzt man $d^k := -\nabla\psi_{\tau_k}(x^k)$.

- In (S.3) wird die Schrittweite t_k mit Hilfe der Armijo-Regel bestimmt.
- In (S.4) wird geprüft, ob der Wert $\|\Phi_{\tau_k}(x^k)\|$ ausreichend abgesenkt worden ist. Ist dies der Fall, so wird der Glättungsparameter zu $\eta\tau_k$ verkleinert, wenn nicht, wird versucht, den Newtonschritt mit dem gleichen Parameter τ_k fortzusetzen.
- In der Literatur „empfohlene“ Werte für die Parameter sind (vgl.[4], Abschnitt 20): $\varepsilon := 10^{-6}$, $\gamma = \eta := 0.1$, $\beta := 0.9$, $\tau_0 := \|q\|/p$.

Wir wollen noch ergänzen, dass das zentrale Resultat des Satzes 7.2 über die eindeutige Lösbarkeit des gestörten Problems $pLCP(M, q, \mu)$ (für jedes $\mu \in (0, \infty)$) auch unter etwas anderen Voraussetzungen gilt. Zur Formulierung der entsprechenden Aussage wird folgende Definition benötigt:

Eine Matrix $M \in \mathbb{R}^{p \times p}$ heißt R_0 -Matrix, wenn das Problem $LCP(M, 0)$ nur die triviale Lösung $x^* = 0$ besitzt.

Satz 7.5 $M \in \mathbb{R}^{p \times p}$ sei positiv semidefinit und eine R_0 -Matrix, sei $q \in \mathbb{R}^p$. Dann besitzt das gestörte Problem $pLCP(M, q, \mu)$ für jedes $\mu > 0$ genau eine Lösung $x(\mu)$. Ist $\{\mu_k\} \subset \mathbb{R}_{++}$ mit $\mu_k \downarrow 0$, so ist jeder Häufungspunkt x^* der Folge $\{x(\mu_k)\}$ eine Lösung des Problems $LCP(M, q)$.

Ein Beweis dieses Satzes wird hier nicht geführt, es wird auf [4], Abschnitt 23, verwiesen.

Kapitel 8

Variationsungleichungen

Dieses Kapitel beschäftigt sich mit der Theorie und Numerik von sogenannten Variationsungleichungen (Variational Inequality Problems, kurz: VIP). Derartige Probleme treten in verschiedenen Bereichen der Mathematik (z.B. freie Randwertprobleme), in den Ingenieurwissenschaften (z.B. Kontaktprobleme), in den Wirtschaftswissenschaften (z.B. Gleichgewichtsprobleme) und in der Spieltheorie (z.B. Nash-Gleichgewichte) auf. Da die Variationsungleichungen in einem engen Zusammenhang zu den Optimierungsproblemen stehen, können die hier vorgestellten Verfahren zum Teil auch zur Lösung von Optimierungsaufgaben verwendet werden. Ferner ist es möglich, Probleme der Spieltheorie als Variationsungleichungen zu formulieren, so dass Verfahren aus diesem Bereich zur Lösung spieltheoretischer Probleme eingesetzt werden können.

8.1 Definition und Beispiele

Zunächst wird der Begriff „Variationsungleichung“ eingeführt. Anschließend wird eine Verbindung zu wichtigen mathematischen Problemen hergestellt.

Definition 8.1 *Seien $X \subseteq \mathbb{R}^n$ nichtleer und abgeschlossen sowie $F : X \mapsto \mathbb{R}^n$ gegeben. Als Variationsungleichung (variational inequality problem; kurz: $VIP(X, F)$) versteht man das Problem, einen Vektor $x^* \in X$ zu finden, der der Bedingung*

$$F(x^*)^T(x - x^*) \geq 0 \quad \forall x \in X$$

genügt. Der Vektor x^ heißt dann Lösung der Variationsungleichung $VIP(X, F)$, während X als zulässige Menge von $VIP(X, F)$ bezeichnet wird.*

Die folgenden Resultate zeigen, dass sich bei einer geeigneten Wahl der zulässigen Menge X und/oder der Funktion F zahlreiche Probleme als Spezialfall einer Variationsungleichung erweisen. Wir beginnen zunächst mit einem Zusammenhang zwischen nichtlinearen Gleichungssystemen und Variationsungleichungen.

Lemma 8.1 *Betrachte die Variationsungleichung $VIP(X, F)$ mit $X = \mathbb{R}^n$. Dann ist der Vektor $x^* \in X$ genau dann eine Lösung von $VIP(X, F)$, wenn er das Gleichungssystem $F(x) = 0$ löst.*

BEWEIS: Sei x^* zunächst als Lösung von $VIP(X, F)$ mit $X = \mathbb{R}^n$ vorausgesetzt. Dann gilt $F(x^*)^T(x - x^*) \geq 0 \quad \forall x \in \mathbb{R}^n$. Speziell für den Vektor $x := x^* - F(x^*)$ folgt dann:

$$0 \leq F(x^*)^T(x - x^*) = -F(x^*)^T F(x^*) = -\|F(x^*)\|^2$$

Daraus folgt: $F(x^*) = 0$.

Gilt umgekehrt $F(x^*) = 0$, so folgt $F(x^*)^T(x - x^*) \geq 0 \quad \forall x \in \mathbb{R}^n$. \square

Bevor wir auf einen weiteren wichtigen Spezialfall von Variationsungleichungen eingehen, verallgemeinern wir den Begriff des „Linearen Komplementaritätsproblems“.

Definition 8.2 Sei $F : \mathbb{R}_+^n \mapsto \mathbb{R}^n$ gegeben. Das (nichtlineare) Komplementaritätsproblem besteht darin, einen Vektor $x^* \in \mathbb{R}^n$ zu finden, so dass $x = x^*$ dem folgenden System genügt:

$$x \geq 0, \quad F(x) \geq 0, \quad x^T F(x) = 0$$

Dieses System wird mit $NCP(F)$ bezeichnet (nonlinear complementary problem). Besitzt $F(x)$ die Form $F(x) := Mx + q$ mit $M \in \mathbb{R}^{n \times n}$ und $q \in \mathbb{R}^n$, so liegt ein lineares Komplementaritätsproblem vor.

Wir werden zeigen, dass auch Komplementaritätsprobleme als Spezialfall von Variationsungleichungen aufgefasst werden können. Alle Verfahren zur Lösung von Variationsungleichungen können somit auch auf Komplementaritätsprobleme angewendet werden.

Lemma 8.2 Seien $X = \mathbb{R}_+^n$ und $F : X \mapsto \mathbb{R}^n$. Dann löst ein Vektor $x^* \in \mathbb{R}^n$ genau dann die Variationsungleichung $VIP(X, F)$, wenn x^* das Komplementaritätsproblem $NCP(F)$ löst.

BEWEIS: Sei zunächst $x^* \in X = \mathbb{R}_+^n$ eine Lösung von $VIP(X, F)$, d.h. für alle $x \in X$ gilt: $F(x^*)^T(x - x^*) \geq 0$. Setze speziell den Vektor $x = x^* + e_i$ für $i \in \{1, \dots, n\}$. Dann folgt:

$$F(x^*)^T e_i \geq 0 \quad \forall i \iff F_i(x^*) \geq 0 \quad \forall i \iff F(x^*) \geq 0$$

Damit ist $x^* \geq 0$ und $F(x^*) \geq 0$ gezeigt. Daraus folgt $(x^*)^T F(x^*) \geq 0$.

Annahme: Es gäbe ein $i \in \{1, \dots, n\}$ mit $x_i^* F_i(x^*) > 0$.

Wähle dann $x := (x_1^*, \dots, x_{i-1}^*, 0, x_{i+1}^*, \dots, x_n^*)$, so dass $x - x^* = -x_i^* e_i$ gilt. Damit erhält man wegen

$$0 \leq F(x^*)^T(x - x^*) = -F_i(x^*)x_i^* < 0$$

einen Widerspruch. Somit gilt auch $F(x^*)^T x^* = 0$ und x^* löst $NCP(F)$.

Sei nun umgekehrt x^* eine Lösung von $NCP(F)$, also $x^* \geq 0$, $F(x^*) \geq 0$, $F(x^*)^T x^* = 0$. Für beliebiges $x \geq 0$ gilt dann:

$$F(x^*)^T(x - x^*) = F(x^*)^T x - F(x^*)^T x^* = F(x^*)^T x \geq 0$$

d.h. x^* ist eine Lösung von $VIP(X, F)$ mit $X = \mathbb{R}_+^n$. \square

Beispiel 8.1 (Cournot'sches Oligopol)

In einem oligopolistischen Angebotsmodell wird davon ausgegangen, dass ein spezielles homogenes Gut von n konkurrierenden Unternehmen auf den Markt gebracht wird. Die Angebotsmenge des Unternehmens $i \in \{1, \dots, n\}$ sei mit x_i , die gesamte Angebotsmenge der n Unternehmen mit $\xi := \sum_{i=1}^n x_i$ bezeichnet. Der Preis pro Mengeneinheit für das Gut hängt von der Menge ξ ab, die auf dem Markt angeboten wird. Der Preis wird mit $p(\xi)$ notiert (man spricht hier von der inversen Nachfragefunktion). Die Produktionskosten des Unternehmens i sind eine Funktion der Ausbringungsmenge x_i , sie werden mit $c_i(x_i)$ bezeichnet.

Der Profit der Firma i berechnet sich dann zu

$$u_i(x) := x_i \cdot p(\xi) - c_i(x_i) \quad \text{mit } x_i \geq 0$$

Es stellt sich die Frage, welche Menge x_i soll das Unternehmen i auf den Markt bringen, um einen möglichst großen Nutzen zu erzielen. Entscheidet sich jeder Anbieter für eine größtmögliche Menge, so wird die auf dem Markt befindliche Gesamtmenge ξ groß sein und einen Verfall des Preises $p(\xi)$ bewirken, so dass für jeden Spieler auch der Nutzen $u_i(x)$ sinkt. Wenn x_i zu klein gewählt wird, wird der Nutzen für i ebenfalls gering ausfallen. Gibt es einen Punkt $x^* := (x_1^*, \dots, x_n^*)$, der von allen Beteiligten akzeptiert werden kann?

Ein solcher Punkt ist das sogenannte Nash-Gleichgewicht. $x^* \in X := \mathbb{R}_+^n$ heißt Nash-Gleichgewicht (im vorliegenden Problem auch Cournotscher Punkt), wenn für jedes $i \in \{1, \dots, n\}$ die Komponente x_i^* Maximierer der Aufgabe

$$\max x_i p(x_i + \sum_{j \neq i} x_j^*) - c_i(x_i) \quad \text{s.d. } x_i \geq 0 \quad (8.1)$$

ist. Der Punkt x^* ist „stabil“ in folgendem Sinne: Wenn der Spieler i im Punkt x^* als einziger seine Strategie x_i^* abändert zu x_i , so kann er seinen Nutzen nicht verbessern, vielmehr ist eine Verringerung seines Nutzens zu erwarten.

Betrachtet man $f(x_i) := -[x_i p(x_i + \sum_{j \neq i} x_j^*) - c_i(x_i)]$ als Zielfunktion einer Minimumaufgabe und $g(x_i) := -x_i \leq 0$ als Nebenbedingung, so lauten die KKT-Bedingungen der Aufgabe (8.1) mit einem Lagrange-Multiplikator $\lambda \geq 0$ wie folgt:

$$\begin{aligned} f'(x_i) + \lambda g'(x_i) &= 0, \quad -x_i \leq 0, \quad \lambda \geq 0, \quad \lambda g(x_i) = 0 \\ \iff f'(x_i) - \lambda &= 0, \quad x_i \geq 0, \quad \lambda \geq 0, \quad \lambda x_i = 0 \\ \iff f'(x_i) \geq 0, \quad x_i &\geq 0, \quad x_i f'(x_i) = 0 \end{aligned}$$

Wegen $f'(x_i) = c'_i(x_i) - p(\xi) - x_i p'(\xi)$ folgt daraus:

$$\begin{aligned} x_i &\geq 0 \\ c'_i(x_i) - p(\xi) - x_i p'(\xi) &\geq 0 \\ x_i (c'_i(x_i) - p(\xi) - x_i p'(\xi)) &= 0 \end{aligned}$$

Definiert man die Funktion $F : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}^n$ mittels der Komponenten

$$F_i(x) := c'_i(x_i) - p(\xi) - x_i p'(\xi)$$

so folgt: $x \geq 0$, $F(x) \geq 0$, $x^T F(x) = 0$, d.h. es liegt ein nichtlineares Komplementaritätsproblem vor.

Als nächstes stellen wir eine Beziehung von Variationsungleichungen zu Optimierungsproblemen her. Zu diesem Zweck betrachten wir das Problem

$$\min f(x) \quad \text{s.d. } x \in X \quad (8.2)$$

wobei $f : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}$ stetig differenzierbar und $X \subseteq \mathbb{R}^n$ nichtleer, abgeschlossen und konvex seien.

Lemma 8.3 *Es gelten folgende Aussagen:*

- a) *Ist x^* ein lokaler Minimierer der Aufgabe (8.2), so löst x^* die Variationsungleichung $VIP(X, F)$ mit $F = \nabla f$.*
- b) *Ist f eine konvexe Funktion auf \mathbb{R}^n und x^* eine Lösung von $VIP(X, F)$ mit $F = \nabla f$, so ist x^* ein globaler Minimierer der Aufgabe (8.2).*

BEWEIS: a) Sei $x^* \in X$ ein lokaler Minimierer von (8.2). Da X konvex ist, ist $d := x - x^*$ für beliebiges $x \in X$ eine zulässige Richtung in x^* . Da x^* ein lokaler Minimierer ist, gilt für die Richtungsableitung $\nabla f(x^*)^T d \geq 0$. (Andernfalls würde $f(x^* + t d) < f(x^*)$ für hinreichend kleine $t > 0$ gelten und d wäre eine Abstiegsrichtung in x^* .) Somit gilt $\nabla f(x^*)^T (x - x^*) \geq 0$ für beliebiges $x \in X$ und x^* ist eine Lösung von $VIP(X, F)$ mit $F = \nabla f$.

b) Sei nun $x^* \in X$ eine Lösung von $VIP(X, F)$. Dann gilt für alle Vektoren $x \in X$: $\nabla f(x^*)^T (x - x^*) \geq 0$. Für eine differenzierbare konvexe Funktion gilt für jedes Paar $x^*, x \in X$: $f(x) \geq f(x^*) + \nabla f(x^*)^T (x - x^*)$. Wegen $\nabla f(x^*)^T (x - x^*) \geq 0$ folgt daraus $f(x) \geq f(x^*)$ für beliebiges $x \in X$. Somit ist x^* globaler Minimierer von (8.2). \square

Das Lemma zeigt, dass Verfahren für VIP auch zur Lösung von Optimierungsaufgaben eingesetzt werden können. Ein weiteres wichtiges Anwendungsgebiet der Variationsungleichungen ist die Spieltheorie, sowohl in theoretischer wie numerischer Hinsicht. Existenz- und Eindeutigkeitsätze für Nash-Gleichgewichte können via VIP begründet werden; Nash-Gleichgewichte können mit Verfahren für VIP berechnet werden (s. hierzu das Vorlesungsskript „Mendel“: Einführung in die Spieltheorie).

8.2 Monotone Funktionen

Bei der Formulierung von Voraussetzungen für Existenz- und Eindeutigkeitsätze spielen sogenannte monotone Funktionen eine wichtige Rolle. In diesem Abschnitt führen wir diese Funktionen ein und stellen ihre grundlegenden Eigenschaften vor. Insbesondere wird eine Beziehung zu der wichtigen Klasse der konvexen Funktionen hergestellt.

Definition 8.3 Sei $X \subseteq \mathbb{R}^n$ eine beliebige Menge. Eine Funktion $F : X \mapsto \mathbb{R}^n$ heißt auf X

a) *monoton*, wenn gilt:

$$(x - y)^T (F(x) - F(y)) \geq 0 \quad \forall x, y \in X$$

b) *strikt monoton*, wenn gilt:

$$(x - y)^T (F(x) - F(y)) > 0 \quad \forall x, y \in X, x \neq y$$

c) *gleichmäßig monoton*, wenn es ein $\mu > 0$ gibt mit

$$(x - y)^T (F(x) - F(y)) \geq \mu \|x - y\|^2 \quad \forall x, y \in X$$

Anschaulich versteht man im Fall $n = 1$ unter einer (strikt) monotonen Funktion eine (strikt) monoton wachsende Funktion, während eine (strikt) monoton fallende Funktion keine (strikt) monotone Funktion im Sinne der Definition 8.3 ist.

Offenbar ist jede gleichmäßig monotone Funktion auch strikt monoton und jede strikt monotone Funktion ist monoton, wobei die Umkehrungen dieser Aussagen nicht gelten.

Als Nächstes charakterisieren wir die (strikt, gleichmäßig) monotonen Funktionen mit Hilfe ihrer Jacobi-Matrizen.

Satz 8.1 Seien $X \subseteq \mathbb{R}^n$ eine offene und konvexe Menge und $F : X \mapsto \mathbb{R}^n$ stetig differenzierbar. Dann gelten:

a) F ist genau dann monoton auf X , wenn $F'(x)$ für alle $x \in X$ positiv semi-definit ist.

b) Ist $F'(x)$ für alle $x \in X$ positiv definit, so ist F strikt monoton auf X .

c) F ist genau dann gleichmäßig monoton auf X , wenn $F'(x)$ gleichmäßig positiv definit auf X ist, d.h. wenn es ein $\mu > 0$ gibt mit

$$d^T F'(x) d \geq \mu \|d\|^2 \tag{8.3}$$

für alle $x \in X$ und für alle $d \in \mathbb{R}^n$.

BEWEIS: Wir beginnen mit Teil c) des Satzes, und setzen zunächst voraus, dass F gleichmäßig monoton auf X ist. Da F stetig differenzierbar ist, folgt aus der Richtungs-differenzierbarkeit für beliebiges $d \in \mathbb{R}^n$ und $x \in X$:

$$\begin{aligned} d^T F'(x) d &= d^T \lim_{t \rightarrow 0} \frac{F(x + td) - F(x)}{t} \\ &= \lim_{t \rightarrow 0} \frac{td^T (F(x + td) - F(x))}{t^2} \\ &\geq \lim_{t \rightarrow 0} \frac{1}{t^2} \mu \|td\|^2 \\ &= \mu \|d\|^2 \end{aligned}$$

Verwendet wurde dabei, dass auf Grund der gleichmäßigen Monotonie für hinreichend kleine t gilt: $td^T(F(x+td) - F(x)) \geq \mu \|td\|^2$.

Sei nun umgekehrt die Ungleichung (8.3) vorausgesetzt. Benutzt wird nun der Mittelwertsatz in der folgenden integralen Form:

$$\Theta(y+h) - \Theta(y) = \int_0^1 \Theta'(y+th) h dt$$

Damit erhält man dann

$$(x-y)^T(F(x) - F(y)) = \int_0^1 (x-y)^T F'(y+t(x-y))(x-y) dt \geq \mu \|x-y\|^2$$

woraus die gleichmäßige Monotonie von F auf X direkt folgt.

Der Beweis von Teil a) erfolgt analog, indem man in obiger Beweisführung einfach $\mu = 0$ setzt.

Zum Beweis von b): Es sei $F'(z)$ positiv definit für alle $z \in X$. Dann ist $\Theta(t) := (x-y)^T F'(y+t(x-y))(x-y) > 0$ für alle $x, y \in X$ mit $x \neq y$ und für alle $t \in [0, 1]$. Folglich ist

$$(x-y)^T(F(x) - F(y)) = \int_0^1 \Theta(t) dt > 0$$

für alle $x, y \in X$ mit $x \neq y$. Also ist F strikt monoton. \square

Man beachte, dass die Umkehrung der Aussage des Satzes 8.1 b) im Allgemeinen nicht gilt; z.B. ist $F(x) = x^3$ strikt monoton, aber $F'(0) = 0$ ist nicht positiv definit.

Beispiel 8.2 Sei $F : \mathbb{R} \mapsto \mathbb{R}$. Dann gelten:

- a) Die Funktion $F(x) := c$ (c eine beliebige Konstante) ist monoton, aber nicht strikt monoton.
- b) Die Funktion $F(x) := x^3$ ist strikt monoton, aber nicht gleichmäßig monoton.
- c) Die Funktion $F(x) := x$ ist gleichmäßig monoton.

Die nächste Bemerkung charakterisiert die Klasse der (strikt, gleichmäßigen) monotonen Funktionen im Falle affin-linearer Abbildungen.

Beispiel 8.3 Sei $F : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}^n$ eine affin-lineare Abbildung, d.h. es gilt

$$F(x) := Mx + q \text{ mit } M \in \mathbb{R}^{n \times n}, q \in \mathbb{R}^n$$

Dann gelten die folgenden Aussagen, deren Beweise dem Leser überlassen bleiben:

- a) F ist monoton $\iff M$ ist positiv semi-definit.
- b) F ist strikt monoton $\iff F$ ist gleichmäßig monoton $\iff M$ ist positiv definit.

Im folgenden soll nun ein Zusammenhang zwischen (strikt, gleichmäßig) konvexen Funktionen $f : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}$ und (strikt, gleichmäßig) monotonen Funktionen $F : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}^n$ hergestellt werden. Die grundlegenden Eigenschaften (strikter, gleichmäßiger) konvexer Funktionen setzen wir dabei aus der Vorlesung über Nichtlineare Optimierung als bekannt voraus (s. auch Geiger/Kanzow: Theorie und Numerik restringierter Optimierungsaufgaben, Springer 2002, Abschnitt 2.1).

Satz 8.2 *Seien $X \subseteq \mathbb{R}^n$ eine offene und konvexe Menge und $f : X \mapsto \mathbb{R}$ zweimal stetig differenzierbar. Dann gelten:*

- a) *f ist genau dann konvex auf X , wenn $\nabla^2 f(x)$ positiv-semidefinit ist für alle $x \in X$.*
- b) *Ist $\nabla^2 f(x)$ positiv definit für alle $x \in X$, so ist f strikt konvex auf X .*
- c) *f ist genau dann gleichmäßig konvex auf X , wenn $\nabla^2 f(x)$ gleichmäßig positiv definit auf X ist.*

Auch hier ist die Umkehrung der Aussage b) im Allgemeinen nicht richtig. Die Funktion $f(x) = x^4$ ist strikt konvex auf \mathbb{R} , aber $f''(0) = 0$ ist nicht positiv definit.

Da f genau dann (strikt, gleichmäßig) konkav auf X ist, wenn $g := -f$ auf X (strikt, gleichmäßig) konvex ist, gilt eine entsprechende Aussage über konkave Funktionen: Wenn man in Satz 8.2 „konvex“ durch „konkav“ ersetzt, so ist $\nabla^2 f(x)$ durch $-\nabla^2 f(x)$ zu ersetzen.

Als Folgerung aus den Sätzen 8.1 und 8.2 erhält man den folgenden Zusammenhang zwischen monotonen und konvexen Funktionen.

Korollar 8.1 *Seien $X \subseteq \mathbb{R}^n$ eine offene und konvexe Menge und $f : X \mapsto \mathbb{R}$ zweimal stetig differenzierbar. Dann gelten:*

- a) *f ist genau dann konvex auf X , wenn ∇f auf X monoton ist.*
- b) *f ist genau dann gleichmäßig konvex auf X , wenn ∇f gleichmäßig monoton auf X ist.*

Es gilt auch die Aussage: f ist genau dann streng konvex auf X , wenn ∇f auf X streng monoton ist. Diese Aussage läßt sich aber nicht als Folgerung der beiden zitierten Sätze gewinnen (vgl. das bereits genannte Buch von Geiger/Kanzow).

Da f genau dann (strikt, gleichmäßig) konkav auf X ist, wenn $g := -f$ auf X (strikt, gleichmäßig) konvex ist, gilt eine entsprechende Aussage über konkave Funktionen: Wenn man in Korollar 8.1 „konvex“ durch „konkav“ ersetzt, so ist ∇f durch $-\nabla f$ zu ersetzen.

8.3 Projektionen auf konvexe Mengen

Projektionen auf konvexe Mengen spielen im Zusammenhang mit VIP sowohl in Bezug auf Existenzsätze wie auch bei der Konstruktion von Verfahren eine Rolle. In diesem Abschnitt werden deshalb elementare Eigenschaften von Projektionen hergeleitet.

Lemma 8.4 *Gegeben seien ein Vektor $y \in \mathbb{R}^n$ und eine nichtleere, abgeschlossene und konvexe Menge $X \subseteq \mathbb{R}^n$. Dann gibt es genau einen Vektor $z \in X$, so dass gilt:*

$$\|y - z\| = \inf_{x \in X} \|y - x\|$$

Der Vektor z heißt *Projektion von y auf die Menge X* . Man verwendet dafür die Notation: $z = \text{Proj}_X(y)$.

BEWEIS: Wir betrachten für $f : X \mapsto \mathbb{R}$, $f(x) := \|y - x\|^2$ die folgende Optimierungsaufgabe:

$$\min f(x) \text{ s.d. } x \in X \tag{8.4}$$

Für die erste und zweite Ableitung von f nach x gilt:

$$\nabla f(x) = \nabla \left(\sum_{i=1}^n (x_i - y_i)^2 \right) = 2(x - y), \quad \nabla^2 f(x) = 2I$$

Da $\nabla^2 f(x)$ positiv definit für alle $x \in X$ ist, ist f streng konvex auf X . f kann also höchstens einen Minimierer in X besitzen. Sei nun x_0 ein Punkt aus $X \neq \emptyset$. Die Aufgabe

$$\min f(x) \text{ s.d. } x \in X, \|y - x\| \leq \|y - x_0\| \tag{8.5}$$

besitzt dieselben Minimierer wie Aufgabe (8.4). Da der zulässige Bereich der Aufgabe (8.5) nichtleer und kompakt und f auf X stetig ist, existiert ein Minimierer z , der eindeutig bestimmt ist. \square

Die in Lemma 8.4 definierte Abbildung $\text{Proj}_X : \mathbb{R}^n \mapsto X$ besitzt offensichtlich die folgenden Eigenschaften:

$$\text{Proj}_X(y) = y \quad \forall y \in X, \quad \text{Proj}_X \circ \text{Proj}_X = \text{Proj}_X$$

Der folgende Satz, Projektionsatz genannt, gibt eine Charakterisierung der Projektion von y auf X dar.

Satz 8.3 *Gegeben seien ein Vektor $y \in \mathbb{R}^n$ und eine nichtleere, abgeschlossene und konvexe Menge $X \subseteq \mathbb{R}^n$. Dann ist z genau dann die Projektion von y auf X , wenn die folgende Bedingung gilt:*

$$(z - y)^T (x - z) \geq 0 \quad \forall x \in X \tag{8.6}$$

BEWEIS: Sei zunächst z als Projektion von y auf X vorausgesetzt. Wir definieren wieder die Funktion $f(x) := \|y - x\|^2$. Für beliebiges $x \in X$ gilt nun $z + \lambda(x - z) \in X$ für alle $\lambda \in (0, 1)$. Es folgt:

$$\begin{aligned} f(z) &\leq f(z + \lambda(x - z)) \\ &= \|(z - y) + \lambda(x - z)\|^2 \\ &= ((z - y) + \lambda(x - z))^T ((z - y) + \lambda(x - z)) \\ &= 2\lambda(z - y)^T(x - z) + \|z - y\|^2 + \lambda^2\|x - z\|^2 \end{aligned}$$

Wegen $f(z) = \|z - y\|^2$ folgt daraus: $0 \leq 2\lambda(z - y)^T(x - z) + \lambda^2\|x - z\|^2$. Dividiert man diese Ungleichung durch 2λ und läßt dann λ gegen $0+$ gehen, so folgt: $(z - y)^T(x - z) \geq 0$ für $x \in X$.

Wir setzen nun die Eigenschaft (8.6) voraus, dann gilt für beliebiges $x \in X$:

$$\begin{aligned} 0 &\geq (y - z)^T(x - z) \\ &= (y - z)^T(x - y + y - z) \\ &= \|y - z\|^2 + (y - z)^T(x - y) \\ &\geq \|y - z\|^2 - \|y - z\|\|x - y\| \end{aligned}$$

Daraus folgt: $\|x - y\| \geq \|y - z\|$ für beliebiges $x \in X$, und somit: $z = \text{Proj}_X(y)$. \square

Der Projektionssatz besagt, dass für $z = \text{Proj}_X(y)$ und beliebiges $x \in X$ stets die Ungleichung $(z - y)^T(x - z) \geq 0$ erfüllt ist. Wegen $(z - y)^T(x - z) = \|z - y\|\|x - z\|\cos\varphi$ (φ der von den Vektoren $z - y$ und $x - z$ eingeschlossene Winkel) heißt dies, dass der Winkel zwischen $z - y$ und $x - z$ für alle $x \in X$ zwischen 0° und 90° liegt.

Als Nächstes zeigen wir, dass der Abstand zweier projizierter Punkte niemals größer sein kann als der Abstand dieser beiden Punkte selbst.

Lemma 8.5 *Sei $X \subseteq \mathbb{R}^n$ eine nichtleere, abgeschlossene und konvexe Menge. Dann gilt für alle $x, y \in \mathbb{R}^n$:*

$$\|\text{Proj}_X(x) - \text{Proj}_X(y)\| \leq \|x - y\|$$

Die Abbildung $x \mapsto \text{Proj}_X(x)$ ist also auf \mathbb{R}^n Lipschitz-stetig.

BEWEIS: Seien $x, y \in \mathbb{R}^n$ beliebig gegeben. Dann ist

$$\begin{aligned} x - y &= \text{Proj}_X(x) - \text{Proj}_X(y) + (x - \text{Proj}_X(x)) + (\text{Proj}_X(y) - y) \\ &= \text{Proj}_X(x) - \text{Proj}_X(y) + u \end{aligned}$$

mit $u := (x - \text{Proj}_X(x)) + (\text{Proj}_X(y) - y)$. Damit folgt:

$$\begin{aligned} \|x - y\|^2 &= \|\text{Proj}_X(x) - \text{Proj}_X(y)\|^2 + \|u\|^2 + 2u^T(\text{Proj}_X(x) - \text{Proj}_X(y)) \\ &= \|\text{Proj}_X(x) - \text{Proj}_X(y)\|^2 + \|u\|^2 \\ &\quad + 2(x - \text{Proj}_X(x))^T(\text{Proj}_X(x) - \text{Proj}_X(y)) \\ &\quad + 2(\text{Proj}_X(y) - y)^T(\text{Proj}_X(x) - \text{Proj}_X(y)) \end{aligned}$$

Anwendung des Projektionssatzes 8.3 ergibt:

$$\begin{aligned}(x - Proj_X(x))^T(Proj_X(x) - Proj_X(y)) &\geq 0 \\ (Proj_X(y) - y)^T(Proj_X(x) - Proj_X(y)) &\geq 0\end{aligned}$$

Damit ist insgesamt gezeigt $\|x - y\|^2 \geq \|Proj_X(x) - Proj_X(y)\|^2$ und die Behauptung des Lemmas bewiesen. \square

Die Abbildung $x \mapsto Proj_X(x)$ von \mathbb{R}^n nach X ist also nicht expansiv.

8.4 Existenz- und Eindeutigkeitsätze

In diesem Abschnitt beschäftigen wir uns mit Existenz- und Eindeutigkeitsaussagen von Lösungen von Variationsungleichungen. Um zu einer ersten Existenzaussage zu gelangen, wollen wir zunächst eine äquivalente Formulierung des Problems $VIP(X, F)$ als Fixpunktproblem angeben.

Satz 8.4 *Seien $X \subseteq \mathbb{R}^n$ nichtleer, abgeschlossen und konvex, $F : X \mapsto \mathbb{R}^n$ sowie $\gamma > 0$. Dann ist $x^* \in \mathbb{R}^n$ genau dann eine Lösung der Variationsungleichung $VIP(X, F)$, wenn x^* ein Fixpunkt der Abbildung*

$$P : X \mapsto X, P(x) := Proj_X(x - \gamma F(x))$$

ist, d.h. wenn $x^ = P(x^*)$ gilt.*

BEWEIS: Man beachte, dass für jedes $x \in X$ die Projektion $Proj_X(x - \gamma F(x))$ wieder in X liegt, also eine Selbstabbildung der Menge X vorliegt. Es gelten nun folgende Äquivalenzen:

$$\begin{aligned}x^* \text{ löst } VIP(X, F) &\iff F(x^*)^T(x - x^*) \geq 0 \forall x \in X \\ &\iff \gamma F(x^*)^T(x - x^*) \geq 0 \forall x \in X \\ &\iff (x^* - (x^* - \gamma F(x^*)))^T(x - x^*) \geq 0 \forall x \in X \\ &\iff x^* = Proj_X(x^* - \gamma F(x^*)) = P(x^*)\end{aligned}$$

Die letzte Äquivalenz begründet sich mit dem Projektionssatz 8.3, wobei x^* die Rolle von z und $x^* - \gamma F(x^*)$ jene von y spielt. \square

Mit Hilfe des folgenden Fixpunktsatzes von Brouwer, den wir ohne Beweis angeben, kann - unter bestimmten Voraussetzungen - die Existenz von Lösungen für $VIP(X, F)$ begründet werden.

Satz 8.5 *Seien $X \subseteq \mathbb{R}^n$ eine nichtleere, konvexe und kompakte Menge sowie $f : X \mapsto X$ stetig. Dann besitzt f einen Fixpunkt, d.h. es existiert ein $x^* \in X$ mit $f(x^*) = x^*$.*

Als Folgerung aus den Sätzen 8.4 und 8.5 erhalten wir nun einen ersten Existenzsatz für Lösungen des Problems $VIP(X, F)$, bei dem die Menge X nichtleer, konvex und kompakt vorausgesetzt wird.

Satz 8.6 *Seien $X \subseteq \mathbb{R}^n$ eine nichtleere, konvexe und kompakte Menge sowie $F : X \mapsto \mathbb{R}^n$ stetig. Dann besitzt die Variationsungleichung $VIP(X, F)$ (mindestens) eine Lösung.*

BEWEIS: Betrachte wieder die Abbildung $P(x) := Proj_X(x - \gamma F(x))$, die als Komposition von zwei stetigen Abbildungen stetig ist. Da P eine Selbstabbildung auf X ist und die übrigen Voraussetzungen des Brouwerschen Satzes 8.5 erfüllt, besitzt die Abbildung einen Fixpunkt $x^* = P(x^*)$. Nach Satz 8.4 ist x^* dann eine Lösung von $VIP(X, F)$. \square

Im Folgenden soll nun gezeigt werden, dass das Problem $VIP(X, F)$ unter gewissen Voraussetzungen an die Funktion F genau ein Lösung besitzt. Dazu beginnen wir mit einem einfach zu begründendem Resultat, das besagt, dass $VIP(X, F)$ für strikt monotonen F höchstens eine Lösung besitzt.

Lemma 8.6 *Seien $X \subseteq \mathbb{R}^n$ nichtleer, abgeschlossen und konvex und die Funktion $F : X \mapsto \mathbb{R}^n$ strikt monoton. Dann besitzt $VIP(X, F)$ höchstens eine Lösung.*

BEWEIS: Wir gehen von der Annahme aus, dass $VIP(X, F)$ zwei Lösungen x^1, x^2 besitzt mit $x^1 \neq x^2$. Dann gilt:

$$F(x^1)^T(x - x^1) \geq 0, \quad F(x^2)^T(x - x^2) \geq 0 \quad \forall x \in X$$

Setzt man für $x \in X$ speziell x^2 bzw. x^1 ein, dann folgt:

$$F(x^1)^T(x^2 - x^1) \geq 0, \quad F(x^2)^T(x^1 - x^2) \geq 0$$

Multipliziert man beide Ungleichungen mit (-1) und addiert, so erhält man:

$$\left(F(x^1) - F(x^2)\right)^T(x^1 - x^2) \leq 0$$

Da F streng monoton auf X ist, gilt aber andererseits:

$$(x^1 - x^2)^T(F(x^1) - F(x^2)) > 0$$

Wir haben also einen Widerspruch erhalten, und $VIP(X, F)$ kann höchstens eine Lösung besitzen. \square

Der Nachweis der Existenz einer Lösung ist etwas schwieriger und bedarf einer weiteren Forderung an das Wachstumsverhalten der Funktion F . Für $r > 0$ definieren wir die Schnittmenge X_r mit

$$X_r := X \cap K_r(0)$$

wobei $K_r(0) := \{x \in \mathbb{R}^n \mid \|x\| \leq r\}$ ist. Ist X nichtleer, abgeschlossen und konvex, so ist für hinreichend großes r auch X_r nichtleer, konvex und kompakt.

Lemma 8.7 Seien $X \subseteq \mathbb{R}^n$ nichtleer, abgeschlossen, konvex sowie $F : X \mapsto \mathbb{R}^n$ stetig. Dann besitzt $VIP(X, F)$ genau dann eine Lösung x^* , wenn es ein $r > \|x^*\|$ gibt, so dass x^* eine Lösung von $VIP(X_r, F)$ ist.

BEWEIS: Wir setzen zunächst voraus, dass $VIP(X, F)$ eine Lösung x^* besitzt. Wähle dann ein $r > \|x^*\|$ beliebig. Wegen $X_r \subseteq X$ und $x^* \in X_r$ ist dann x^* auch eine Lösung von $VIP(X_r, F)$.

Sei umgekehrt ein $r > 0$ gegeben, so dass $VIP(X_r, F)$ eine Lösung x^* besitzt mit $\|x^*\| < r$. Sei $x \in X$ beliebig. Für hinreichend kleines $\lambda > 0$ ist dann

$$y := x^* + \lambda(x - x^*) \in X_r$$

Da x^* das Problem $VIP(X_r, F)$ löst, folgt:

$$\begin{aligned} F(x^*)^T(y - x^*) &\geq 0 \\ \implies \lambda F(x^*)^T(x - x^*) &\geq 0 \\ \implies F(x^*)^T(x - x^*) &\geq 0 \end{aligned}$$

Da $x \in X$ beliebig gewählt ist, ist x^* auch Lösung von $VIP(X, F)$. \square

Das folgende Resultat zeigt nun, dass unter einer geeigneten Wachstumsbedingung an die Funktion F die Existenz einer Lösung des Problems $VIP(X, F)$ garantiert werden kann, auch wenn die Menge X nicht beschränkt ist.

Satz 8.7 Seien $X \subseteq \mathbb{R}^n$ nichtleer, abgeschlossen, konvex sowie $F : X \mapsto \mathbb{R}^n$ stetig. Existiert ein $\bar{x} \in X$ mit

$$\lim_{x \in X, \|x\| \rightarrow \infty} \frac{(x - \bar{x})^T(F(x) - F(\bar{x}))}{\|x - \bar{x}\|} = \infty \quad (8.7)$$

so besitzt $VIP(X, F)$ (mindestens) eine Lösung.

BEWEIS: Sei μ eine Zahl mit $\mu > \|F(\bar{x})\|$. Wegen (8.7) gibt es eine Zahl $r > \|\bar{x}\|$, so dass gilt:

$$(x - \bar{x})^T(F(x) - F(\bar{x})) > \mu \|x - \bar{x}\| \quad \forall x \in X \text{ mit } \|x\| \geq r$$

Damit erhält man für alle $x \in X$ mit $\|x\| \geq r$:

$$\begin{aligned} F(x)^T(x - \bar{x}) &> \mu \|x - \bar{x}\| + F(\bar{x})^T(x - \bar{x}) \\ &\geq \mu \|x - \bar{x}\| - \|F(\bar{x})\| \|x - \bar{x}\| \\ &= (\mu - \|F(\bar{x})\|) \|x - \bar{x}\| \\ &\geq (\mu - \|F(\bar{x})\|) (\|x\| - \|\bar{x}\|) \\ &> 0 \end{aligned} \quad (8.8)$$

Betrachte nun die Menge $X_r := X \cap K_r(0)$, die wegen $\bar{x} \in X_r$ nichtleer ist. Ferner ist sie konvex und kompakt. Nach Satz 8.6 besitzt das Problem $VIP(X_r, F)$ eine Lösung x^* . Wir zeigen nun, dass $\|x^*\| < r$ gelten muss. Es folgt:

$$\begin{aligned} & F(x^*)^T(x - x^*) \geq 0 \quad \forall x \in X_r \\ \implies & F(x^*)^T(\bar{x} - x^*) \geq 0 \quad (\text{da } \bar{x} \in X_r) \\ \implies & F(x^*)^T(x^* - \bar{x}) \leq 0 \end{aligned}$$

Wegen (8.8) erhält man daher $\|x^*\| < r$. Nach Lemma 8.7 ist damit x^* eine Lösung von $VIP(X, F)$. \square

Als Folgerung der obigen Resultate erhalten wir die folgende Aussage über die Existenz und Eindeutigkeit einer Lösung von $VIP(X, F)$ bei einer gleichmäßig monotonen Funktion F .

Satz 8.8 *Seien $X \subseteq \mathbb{R}^n$ nichtleer, abgeschlossen, konvex sowie $F : X \mapsto \mathbb{R}^n$ stetig und gleichmäßig monoton. Dann besitzt $VIP(X, F)$ genau eine Lösung.*

BEWEIS: Da F gleichmäßig monoton ist, gibt es ein $\mu > 0$, so dass gilt:

$$(x - y)^T(F(x) - F(y)) \geq \mu\|x - y\|^2 \quad \forall x, y \in X$$

Daraus kann man ablesen, dass F der Wachstumsbedingung (8.7) genügt für ein beliebiges $y := \bar{x}$. Wegen Satz 8.7 besitzt $VIP(X, F)$ mindestens eine Lösung. Andererseits ist die gleichmäßig monotone Funktion F insbesondere strikt monoton, so dass $VIP(X, F)$ nach Lemma 8.6 höchstens eine Lösung besitzt. Also gibt es genau eine Lösung. \square

8.5 Numerische Verfahren

Es gibt zahlreiche Verfahren zur Lösung von Variationsungleichungen. Wir stellen hier drei verschiedene Verfahren vor: 1) ein Fixpunktverfahren, 2) ein Verfahren, das auf Newtoniteration beruht, 3) ein Inneres-Punkte-Verfahren.

8.5.1 Fixpunkt- oder Projektionsverfahren

In Satz 8.4 haben wir festgestellt, dass x^* genau dann eine Lösung von $VIP(X, F)$ ist, wenn x^* ein Fixpunkt der Abbildung

$$P : X \mapsto X, \quad P(x) := Proj_X(x - \gamma F(x)) \quad (8.9)$$

ist. Dabei ist X eine nichtleere, abgeschlossene, konvexe Teilmenge des \mathbb{R}^n , F ist eine Funktion von X nach \mathbb{R}^n und $\gamma > 0$. Daher ist es naheliegend, eine Lösung des Problems $VIP(X, F)$ mit Hilfe eines Fixpunktverfahrens zu ermitteln. Tatsächlich sind zahlreiche Fixpunktverfahren zur Lösung von Variationsungleichungen entwickelt worden. Wir

werden in diesem Abschnitt ein einfaches Fixpunktverfahren sowie eine Modifikation, für die etwas schwächere Voraussetzungen erforderlich, sind vorstellen.

ALGORITHMUS *VIP* 1 (*Fixpunkt- oder Projektionsverfahren*)

- (S.0) Wähle $x^0 \in X$, $\gamma > 0$, und setze $k := 0$.
 (S.1) Ist x^k Lösung von $VIP(X, F)$, STOP.
 (S.2) Berechne x^{k+1} gemäß $x^{k+1} := Proj_X(x^k - \gamma F(x^k))$.
 (S.3) Setze $k := k + 1$ und gehe zu Schritt (S.1).

Der Konvergenzsatz für Algorithmus *VIP*1 beruht auf dem Fixpunktsatz von Banach, den wir hier in etwas vereinfachter Form (ohne Beweis) wiedergegeben wird.

Satz 8.9 (Fixpunktsatz von Banach)

Seien $X \subseteq \mathbb{R}^n$ eine nichtleere und abgeschlossene Menge sowie $P : X \mapsto X$ eine kontrahierende Selbstabbildung, d.h. es gibt eine Konstante $\kappa \in (0, 1)$, so dass für alle $x, y \in X$ gilt:

$$\|P(x) - P(y)\| \leq \kappa \|x - y\|$$

Dann besitzt P genau einen Fixpunkt x^* in X . Ferner konvergiert jede durch die Vorschrift $x^{k+1} := P(x^k)$, $k = 0, 1, 2, \dots$, $x^0 \in X$ beliebig erzeugte Folge $\{x^k\}$ gegen diesen Fixpunkt x^* .

Dieser Fixpunktsatz wird nun auf die Abbildung $P(x) := Proj_X(x - \gamma F(x))$ angewandt, wobei die Voraussetzungen an X und F so gestellt werden müssen, dass P eine kontrahierende Selbstabbildung wird.

Satz 8.10 Sei $X \subseteq \mathbb{R}^n$ nichtleer, abgeschlossen, konvex. Sei ferner $F : X \mapsto \mathbb{R}^n$ gleichmäßig monoton mit der Monotonie-Konstanten $\mu > 0$ sowie Lipschitz-stetig auf X mit der Lipschitz-Konstanten $L > 0$. Sei $\gamma < 2\mu/L^2$. Dann konvergiert die durch den Algorithmus *VIP*1 erzeugte Folge $\{x^k\}$ gegen die eindeutige Lösung von $VIP(X, F)$.

Beweis: Wir gehen davon aus, dass Algorithmus 8.1 eine unendliche Folge $\{x^k\}$ erzeugt, also nicht nach endlich vielen Schritten abbricht. Die Menge X genügt offenbar den Voraussetzungen des Banachschen Fixpunktsatzes. Ferner ist die Abbildung P gemäß (8.9) eine Selbstabbildung von X in sich. Wir weisen nach, dass sie unter den angegebenen Bedingungen kontrahierend ist. Es gilt:

$$\begin{aligned} \|P(x) - P(y)\|^2 &= \|Proj_X(x - \gamma F(x)) - Proj_X(y - \gamma F(y))\|^2 \\ &\leq \|x - y - \gamma(F(x) - F(y))\|^2 \quad (\text{nach Lemma 8.5}) \\ &= \|x - y\|^2 + \gamma^2 \|F(x) - F(y)\|^2 - 2\gamma(x - y)^T(F(x) - F(y)) \\ &\leq (1 + \gamma^2 L^2 - 2\gamma\mu) \|x - y\|^2 \end{aligned}$$

Bei der letzten Abschätzung werden die Voraussetzungen der Funktion F genutzt. Wir setzen nun

$$\kappa := \sqrt{1 + \gamma^2 L^2 - 2\gamma\mu}$$

Wegen $\gamma < 2\mu/L^2$ ist $\kappa \in (0, 1)$, d.h. P ist kontrahierend. Wegen Satz 8.9 besitzt $VIP(X, F)$ genau einen Fixpunkt x^* , der nach Satz 8.4 Lösung von $VIP(X, F)$ ist. Nach Satz 8.9 gilt: $x^k \mapsto x^*$. \square

Satz 8.10 liegen sehr einschränkende Voraussetzungen zugrunde. Hinzu kommt, dass γ so gewählt werden muss, dass die Bedingung $\gamma < 2\mu/L^2$ erfüllt ist. Dies ist insofern problematisch, weil die Monotonie-Konstante μ und die Lipschitz-Konstante L im Allgemeinen nicht bekannt sind.

Wir geben eine Modifikation von Algorithmus $VIP1$ an, die mit etwas schwächeren Voraussetzungen auskommt, dafür aber in Schritt (S.2) zwei Projektionen durchführen muss.

ALGORITHMUS VIP 2 (Extragradientenverfahren)

(S.0) Wähle $x^0 \in X$, $\gamma > 0$, und setze $k := 0$.

(S.1) Ist x^k Lösung von $VIP(X, F)$, STOP.

(S.2) Berechne

$$\begin{aligned} y^k &:= \text{Proj}_X(x^k - \gamma F(x^k)) \\ x^{k+1} &:= \text{Proj}_X(x^k - \gamma F(y^k)) \end{aligned}$$

(S.3) Setze $k := k + 1$ und gehe zu Schritt 1).

Der in Schritt (S.2) berechnete Hilfsvektor y^k entspricht gerade der nächsten Iterierten x^{k+1} aus Algorithmus $VIP1$. Wir geben für das Verfahren einen Konvergenzsatz an, verzichten hier aber auf einen Beweis des Satzes. Der Leser sei diesbezüglich auf das Buch von Geiger/Kanzow [2] (Abschnitt 7.2) verwiesen.

Satz 8.11 *Seien $X \subseteq \mathbb{R}^n$ nichtleer, abgeschlossen, konvex und $F : X \mapsto \mathbb{R}^n$ monoton und Lipschitz-stetig auf X mit der Lipschitz-Konstanten $L > 0$. Sei ferner $\gamma < 1/L$ und die Lösungsmenge von $VIP(X, F)$ nichtleer. Dann konvergiert die durch den Algorithmus 8.2 erzeugte Folge $\{x^k\}$ gegen eine Lösung von $VIP(X, F)$.*

Im Folgenden soll noch etwas zum Aufwand der beiden zuletzt dargestellten Verfahren gesagt werden. Dieser hängt offensichtlich im Wesentlichen davon ab, wie einfach sich die Berechnung der Projektion eines Vektors $y \in \mathbb{R}^n$ auf die konvexe Menge X gestaltet. Wird X durch Box-Restriktionen beschrieben, also in der Form

$$X := [a_1, b_1] \times \dots \times [a_n, b_n]$$

mit unteren Schranken $a_i \in \mathbb{R} \cup \{-\infty\}$ und oberen Schranken $b_i \in \mathbb{R} \cup \{\infty\}$ für $i = 1, \dots, n$, so läßt sich die Projektion komponentenweise angeben:

$$[Proj_X(y)]_i = \begin{cases} a_i & \text{falls } y_i < a_i \\ y_i & \text{falls } y_i \in [a_i, b_i] \\ b_i & \text{falls } y_i > b_i \end{cases}$$

In diesem Fall ist also die Berechnung der Projektion äußerst einfach und wenig aufwändig. Wird X dagegen durch lineare Restriktionen beschrieben, dann hat man bereits ein quadratisches Problem zu lösen. Entsprechend komplizierter wird die Berechnung im Fall nichtlinearer Restriktion, was als zu aufwändig angesehen wird.

Es gibt eine Vielzahl von Verfahren zur Lösung von Variationsungleichungen. Der Leser sei diesbezüglich auf das Vorlesungsskript von C.Kanzow (s. [4]) und auf das Buch von C.Geiger/C.Kanzow, Kapitel 7, (s. [2]) verwiesen. Neue Verfahren zur Lösung von Variationsungleichungen werden auch in den im Literaturverzeichnis aufgeführten und von mir betreuten Masterthesen vorgestellt.

Beispiel 8.4 Das folgende Beispiel ist im Wesentlichen dem Skript [4] entnommen. Dabei wird das Oligopolmodell aus Beispiel 8.1 mit der Nutzenfunktion

$$u_i(x_i) := x_i \cdot p(\xi) - c_i(x_i) \quad \text{mit } 0 \leq x_i \leq b_i$$

für das Unternehmen i (mit $i \in \{1, \dots, m\}$) zugrunde gelegt. Die Kostenfunktion sei nun definiert durch

$$c_i(x_i) := c_i x_i + \frac{\beta_i}{1 + \beta_i} L_i^{-1/\beta_i} x_i^{\frac{1+\beta_i}{\beta_i}}$$

während die inverse Nachfragefunktion gegeben ist durch

$$p(\xi) := (\alpha/\xi)^{\frac{1}{\alpha}}$$

Speziell wurden folgende Zahlen gewählt: $m = 5$, $\alpha := 5000$, $\gamma := 1.1$. Die Parameter c_i , β_i und L_i sind in der nachstehenden Tabelle angegeben.

i	1	2	3	4	5
c_i	10	8	6	4	2
β_i	1.2	1.1	1.0	0.9	0.8
L_i	5	5	5	5	5

Für die Grenzen b_i wurde $b_i = 50$ ($i = 1, \dots, 5$) gesetzt. Das Zahlenbeispiel wurde mit Algorithmus 8.2 bearbeitet, wobei als Startvektor $x^0 := (10, \dots, 10)$ und als Abbruchkriterium $\|x^{k+1} - x^k\| \leq 10^{-5}$ benutzt worden sind. Benötigt wurden dabei 24 Iterationen. Als Lösungsvektor wurde $x^* \approx (36.93, 41.82, 43.71, 42.66, 38.18)^T$ gefunden.

In der Masterthesis [7] wurde die Aufgabe mit verschiedenen anderen Verfahren, auf die hier nicht eingegangen wird, bearbeitet, wobei die niedrigste Anzahl der Iterationen bei 8 lag.

8.5.2 Josephy-Newton-Verfahren

In diesem Unterabschnitt beschäftigen wir uns mit dem sogenannten Josephy-Newton-Verfahren, das 1979 von Josephy vorgestellt und inzwischen in verschiedenen Modifikationen weiterentwickelt worden ist. Die Grundform des Verfahrens ist ein lokal schnell konvergentes Verfahren, was im Folgenden auch gezeigt wird.

Betrachtet wird wieder die Variationsungleichung $VIP(X, F)$ mit einer nichtleeren, abgeschlossenen und konvexen Menge und einer stetig differenzierbaren Funktion $F : X \mapsto \mathbb{R}^n$. Die zentrale Idee des Verfahrens besteht darin, eine Folge $\{x^k\}$ zu erzeugen, wobei x^{k+1} Lösung einer im Allgemeinen einfacher zu lösenden Variationsaufgabe $VIP(X, F_k)$ ist. Beim „klassischen Josephy-Newton-Verfahren“ ist die Funktion F_k die Linearisierung von F im Punkt x^k , also

$$F_k : X \mapsto \mathbb{R}^n, \quad F_k(x) := F(x^k) + F'(x^k)(x - x^k) \quad (8.10)$$

Das Verfahren wird durch folgenden Algorithmus formal beschrieben.

ALGORITHMUS VIP 3 (*Josephy-Newton-Verfahren*)

(S.0) Wähle $x^0 \in X$ und setze $k := 0$.

(S.1) Ist x^k eine Lösung von $VIP(X, F)$, stop!

(S.2) Setze $F_k(x) := F(x^k) + F'(x^k)(x - x^k)$ und bestimme x^{k+1} als Lösung der Variationsungleichung

$$F_k(x^{k+1})^T(x - x^{k+1}) \geq 0 \quad \forall x \in X$$

(S.3) Setze $k := k + 1$ und gehe zu (S.1).

KOMMENTAR: An Stelle des allgemeinen Problems $VIP(X, F)$ ist in Schritt (S.2) die Aufgabe $VIP(X, F_k)$ zu lösen mit der affin-linearen Funktion F_k . Unter speziellen Voraussetzungen ist dies verhältnismäßig einfach. Im Fall $X := \mathbb{R}_+^n$ ist $VIP(X, F)$ ein nichtlineares Komplementaritätsproblem (vgl. Lemma 8.2), folglich ist dann $VIP(X, F_k)$ ein lineares Komplementaritätsproblem, für das zahlreiche Lösungsverfahren (z.B. das Lemke-Verfahren) zur Verfügung stehen. Konkret ist dann $VIP(X, F_k)$ gegeben durch $LCP(M, q)$ mit $M := F'(x^k)$ und $q := F(x^k) - F'(x^k)x^k$.

Wir wollen für das Josephy-Newton-Verfahren zeigen, dass es unter gewissen Voraussetzungen lokal wohldefiniert und konvergent ist. Wie beim klassischen Newtonverfahren kann ferner superlineare Konvergenz und unter weitergehenden Voraussetzungen lokal quadratische Konvergenz begründet werden. Als Vorbereitungen benötigen wir das folgende Resultat.

Lemma 8.8 Seien $X \subseteq \mathbb{R}^n$ nichtleer, $x^* \in X$ und $F : X \mapsto \mathbb{R}^n$ stetig differenzierbar mit $F'(x^*)$ positiv definit. Dann existieren Konstanten $\delta > 0$ und $\mu > 0$, so dass

$$d^T F'(x)d \geq \mu \|d\|^2$$

für alle $x \in \mathbb{R}^n$ mit $\|x - x^*\| \leq \delta$ und alle $d \in \mathbb{R}^n$ gilt, d.h. die Jacobi-Matrizen $F'(x)d$ sind gleichmäßig positiv definit.

BEWEIS: Wir gehen von der Annahme aus, die Behauptung sei falsch. Dann gibt es eine Folge $\{x^k\}$ mit $x^k \mapsto x^*$ und Vektoren $d^k \in \mathbb{R}^n$ mit

$$(d^k)^T F'(x^k)d^k < \frac{1}{k} \|d^k\|^2 \quad (8.11)$$

Division dieser Gleichung durch $\|d^k\|^2$ zeigt, dass wir o.B.d.A. annehmen dürfen, dass $\|d^k\| = 1$ ist. Dann besitzt die Folge $\{d^k\}$ einen Häufungspunkt d^* mit $\|d^*\| = 1$, somit eine Teilfolge $\{d^k\}_K$, die gegen d^* konvergiert. Für $k \in K$ mit $k \mapsto \infty$ folgt dann:

$$(d^*)^T F'(x^*)d^* \leq 0$$

Dies widerspricht aber der positiven Definitheit von $F'(x^*)$. \square

Auf der Grundlage von Lemma 8.8 kann nun das folgende Resultat über die lokale Konvergenz des Verfahrens begründet werden.

Satz 8.12 Seien $X \subseteq \mathbb{R}^n$ eine nichtleere, abgeschlossene und konvexe Menge und $F : X \mapsto \mathbb{R}^n$ stetig differenzierbar. Sei ferner $x^* \in X$ eine Lösung der Variationsungleichung $VIP(X, F)$, so dass die Jacobi-Matrix $F'(x^*)$ positiv definit ist. Dann existiert eine Konstante $\delta > 0$, so dass für jeden Startvektor $x^0 \in \mathbb{R}^n$ mit $\|x^0 - x^*\| \leq \delta$ die folgende Aussage gilt:

Das Josephy-Newton-Verfahren ist wohldefiniert und erzeugt eine Folge $\{x^k\}$, die gegen x^* konvergiert.

BEWEIS: Nach Lemma 8.8 gibt es ein $\delta_1 > 0$ und ein $\mu > 0$ mit

$$d^T F'(x)d \geq \mu \|d\|^2 \quad (8.12)$$

für alle $x \in \mathbb{R}^n$ mit $\|x - x^*\| \leq \delta_1$ und alle $d \in \mathbb{R}^n$. Auf Grund der stetigen Differenzierbarkeit von F gilt:

$$\|F(x) - F(x^*) - F'(x^*)(x - x^*)\| = o(\|x - x^*\|)$$

Mit Hilfe der Stetigkeit von F' lässt sich begründen, dass auch

$$\|F(x) - F(x^*) - F'(x)(x - x^*)\| = o(\|x - x^*\|)$$

gilt. Deshalb gibt es zu festem $r \in (0, 1)$ ein $\delta_2 > 0$, so dass

$$\|F(x) - F(x^*) - F'(x)(x - x^*)\| \leq \frac{r\mu}{2} \|x - x^*\| \quad (8.13)$$

gilt für alle $x \in \mathbb{R}^n$ mit $\|x - x^*\| \leq \delta_2$. Setze nun $\delta := \min\{\delta_1, \delta_2\}$ und wähle $x^0 \in \mathbb{R}^n$ mit $\|x^0 - x^*\| \leq \delta$. Dann ist $F'(x^0)$ wegen (8.12) positiv definit. Nach Beispiel 8.3 b) ist deshalb die in Schritt (S.2) auftretende Funktion F_0 gleichmäßig monoton. Deshalb besitzt die Variationsungleichung $VIP(X, F_0)$, die in (S.2) erscheint, eine eindeutige Lösung x^1 (Satz 8.9).

Als Lösung von $VIP(X, F_0)$ genügt $x^1 \in X$ der folgenden Ungleichung:

$$F_0(x^1)^T(x - x^1) = (F(x^0) + F'(x^0)(x^1 - x^0))^T(x - x^1) \geq 0 \quad \forall x \in X \quad (8.14)$$

Ferner ist $x^* \in X$ Lösung von $VIP(X, F)$, so dass

$$F(x^*)^T(x - x^*) \geq 0 \quad \forall x \in X \quad (8.15)$$

gilt. Einsetzen von $x = x^*$ in die erste Ungleichung und von $x = x^1$ in die zweite Ungleichung und anschließende Addition ergibt:

$$(x^* - x^1)^T(F(x^0) - F(x^*) - F'(x^0)(x^0 - x^* + x^* - x^1)) \geq 0 \quad (8.16)$$

Aus den vorangehenden Ungleichungen erhält man nun folgende Abschätzung:

$$\begin{aligned} \mu \|x^1 - x^*\|^2 &\leq (x^* - x^1)^T F'(x^0)(x^* - x^1) \quad (\text{wg. 8.12}) \\ &\leq (x^* - x^1)^T (F(x^0) - F(x^*) - F'(x^0)(x^0 - x^*)) \quad (\text{wg. 8.16}) \\ &\leq \|x^* - x^1\| \|F(x^0) - F(x^*) - F'(x^0)(x^0 - x^*)\| \quad (\text{Cauchy-Schwarz}) \\ &\leq \frac{r\mu}{2} \|x^* - x^1\| \|x^0 - x^*\| \quad (\text{wg. 8.13}) \end{aligned}$$

Daraus ergibt sich:

$$\|x^1 - x^*\| \leq \frac{r}{2} \|x^0 - x^*\| \leq \|x^0 - x^*\| \quad (8.17)$$

Somit liegt auch x^1 in der δ -Umgebung von x^* . Durch Induktion ergibt sich daraus die Wohldefiniertheit des Josephy-Newton-Verfahrens. Außerdem folgt aus (8.17) durch Induktion unmittelbar

$$\|x^k - x^*\| \leq \left(\frac{r}{2}\right)^k \|x^0 - x^*\|$$

und somit wegen $r \in (0, 1)$ die Konvergenz $x^k \mapsto x^*$. \square

Über die Konvergenzgeschwindigkeit der vom Josephy-Newton-Verfahren erzeugten Folge $\{x^k\}$ gelten Aussagen, die jenen des gewöhnlichen Newton-Verfahrens entsprechen. Unter den Voraussetzungen des Satzes 8.12 gelten die folgenden Resultate über lokale Konvergenz:

- Die Folge $\{x^k\}$ konvergiert superlinear gegen x^* .
- Besitzt F eine lokal Lipschitz-stetige Ableitung, so konvergiert $\{x^k\}$ sogar quadratisch gegen x^* .

Mit Hilfe sogenannter Gap-Funktionen kann das Josephy-Newton-Verfahren zu einem global konvergenten Verfahren ausgebaut werden. Wir verweisen diesbezüglich den Leser auf [2] (Geiger/Kanzow: Nichtlineare Optimierung, Kapitel 7).

8.5.3 Ein Inneres-Punkte-Verfahren

Einen weiteren interessanten Ansatz für die Entwicklung von Lösungsverfahren für Variationsungleichungsprobleme liefern die Inneren-Punkte-Methoden. Diese setzen nicht direkt am Problem $VIP(X, F)$ an, sondern an dessen KKT-Bedingungen. Da das Problem $VIP(X, F)$ kein Optimierungsproblem im eigentlichen Sinne ist, ist zunächst zu klären, was unter seinen KKT-Bedingungen zu verstehen ist. Zu diesem Zweck stellen wir einen Zusammenhang zwischen $VIP(X, F)$ und einem Optimierungsproblem her.

Lemma 8.9 *Sei $x^* \in X$ eine Lösung von $VIP(X, F)$. Dann ist x^* Minimierer der Optimierungsaufgabe*

$$\min f(x) \text{ s.d. } x \in X \quad (8.18)$$

mit $f(x) := F(x^*)^T(x - x^*)$.

BEWEIS: Da $x^* \in X$ das Problem $VIP(X, F)$ löst, gilt:

$$f(x) := F(x^*)^T(x - x^*) \geq 0 \quad \forall x \in X$$

Da ferner $f(x^*) = 0$ gilt, folgt: $f(x) \geq f(x^*)$ für alle $x \in X$. Somit ist x^* globaler Minimierer der Aufgabe (8.18). \square

Das dem Problem $VIP(X, F)$ zugeordnete Optimierungsproblem (8.18) ist aber nur von theoretischen Interesse. Da man die Zielfunktion f nicht kennt, kann es für praktische Zwecke nicht genutzt werden.

Für den Rest dieses Unterabschnitts nehmen wir an, dass die Menge X in der Form

$$X := \{x \in \mathbb{R}^n \mid g(x) \leq 0, h(x) = 0\} \quad (8.19)$$

vorliegt, wobei $g : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}^p$, $h : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}^m$ stetig differenzierbar seien. Die Funktion $F : X \mapsto \mathbb{R}^n$ sei stetig.

Die (verallgemeinerten) KKT-Bedingungen des Problems $VIP(X, F)$ sind nun gerade die „üblichen“ KKT-Bedingungen der Optimierungsaufgabe (8.18) (beachte: $\nabla_x f(x^*) = F(x^*)$).

Definition 8.4 *Ein Tripel $(x^*, z^*, y^*) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^p \times \mathbb{R}^m$ wird KKT-Punkt von $VIP(X, F)$ genannt, wenn es den folgenden (verallgemeinerten) KKT-Bedingungen von $VIP(X, F)$ genügt:*

$$\begin{aligned} F(x) + \sum_{i=1}^p z_i \nabla g_i(x) + \sum_{j=1}^m y_j \nabla h_j(x) &= 0 \\ h(x) &= 0 \\ g(x) \leq 0, z \geq 0, z^T g(x) &= 0 \end{aligned} \quad (8.20)$$

Die Vektoren z^* und y^* werden dann auch als Lagrange-Multiplikatoren von $VIP(X, F)$ bezeichnet.

Man beachte: Ersetzt man in (8.20) $F(x)$ durch $\nabla f(x)$, so erhält man gerade die *KKT-Bedingungen der Optimierungsaufgabe* $\min f(x)$ s.d. $x \in X$.

Mit den Jacobi-Matrizen $g'(x)$ und $h'(x)$ und nach Einführung des Schlupfvektors $u := -g(x) \in \mathbb{R}^p$ können die *KKT-Bedingungen* (8.20) wie folgt neu formuliert werden:

$$\begin{aligned} F(x) + g'(x)^T z + h'(x)^T y &= 0 \\ u + g(x) &= 0 \\ h(x) &= 0 \\ Z u &= 0 \\ u \geq 0, z &\geq 0 \end{aligned} \tag{8.21}$$

Im Folgenden beschränken wir uns auf den Fall, dass die Funktionen $g_i : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}$ ($i = 1, \dots, p$) konvex und die Funktionen $h_j : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}$ ($j = 1, \dots, m$) affin-linear sind; h ist also von der Form $h(x) := Ax - b$ mit $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $Rg(A) = m$, $b \in \mathbb{R}^m$. Man kann dann leicht zeigen, dass X eine konvexe Menge ist. Man sagt, die konvexe Menge X genügt der Slater-Bedingung, wenn es ein $\hat{x} \in X$ gibt mit $g(\hat{x}) < 0$.

Kombiniert man nun Lemma 8.9 mit entsprechenden Resultaten aus der nichtlinearen Optimierung (vgl. [2], 2.2.4 und 7.1.4), so erhält man die folgende Aussage.

Satz 8.13 *Gegeben sei ein Problem $VIP(X, F)$ derart, dass $h : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}^m$ affin-linear und die Komponentenfunktionen von g konvex auf \mathbb{R}^n sind, ferner erfülle X die Slater-Bedingung. Dann ist $x^* \in X$ genau dann eine Lösung von $VIP(X, F)$, wenn es Lagrange-Multiplikatoren $z^* \in \mathbb{R}^p$ und $y^* \in \mathbb{R}^m$ gibt, so dass (x^*, z^*, y^*) ein *KKT-Punkt* von $VIP(X, F)$ ist.*

Zur Lösung des Systems (8.21) wird wieder das Newtonverfahren eingesetzt, das auf das „gestörte System“ angewendet wird, d.h. die Bedingung $Z u = 0$ wird durch $Z u = \mu e$ mit einem Parameter $\mu \in (0, \infty)$ ersetzt. Zur Abkürzung setzen wir noch

$$\Phi(x, z, y) := F(x) + g'(x)^T z + h'(x)^T y$$

Die Newtongleichung ist dann für $h(x) := Ax - b$ und somit $h'(x) = A$ in einem Punkt $(x, z, y, u) = (x^k, z^k, y^k, u^k)$ gegeben durch

$$\begin{pmatrix} \Phi'_x(x, z, y) & g'(x)^T & A^T & 0 \\ g'(x) & 0 & 0 & I \\ A & 0 & 0 & 0 \\ 0 & U & 0 & Z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta x \\ \Delta z \\ \Delta y \\ \Delta u \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} \Phi(x, z, y) \\ g(x) + u \\ Ax - b \\ Zu - \mu e \end{pmatrix} \tag{8.22}$$

Die auf (x^k, z^k, y^k, u^k) folgende Iterierte wird auf dem Suchrichtungsstrahl

$$(x^k(t), z^k(t), y^k(t), u^k(t)) := (x^k, z^k, y^k, u^k) + t(\Delta x^k, \Delta z^k, \Delta y^k, \Delta u^k) \text{ mit } t \geq 0$$

ermittelt, wobei $(\Delta x^k, \Delta z^k, \Delta y^k, \Delta u^k)$ eine Lösung des System (8.22) im Punkt (x^k, z^k, y^k, u^k) ist. Es wird nun der Algorithmus *EPF* zur Lösung der primal-dualen linearen Optimierungsaufgabe auf das Problem $VIP(X, F)$ übertragen. Für diesen Zweck setzen wir

$$\mu(z, u) := \frac{z^T u}{p}$$

und definieren die Umgebung

$$\mathcal{N}_{-\infty}(\gamma, \beta) := \left\{ (x, z, y, u) \left| \begin{array}{l} z > 0, u > 0, z_i u_i \geq \gamma \mu(z, u), i = 1, \dots, p \\ \|\Phi(x, z, y)\| \leq \beta \mu(z, u) \\ \|g(x) + u\| \leq \beta \mu(z, u) \\ \|Ax - b\| \leq \beta \mu(z, u) \end{array} \right. \right\}$$

Das Ziel des folgenden Algorithmus besteht darin, eine Folge (x^k, z^k, y^k, u^k) in $\mathcal{N}_{-\infty}(\gamma, \beta)$ mit der Eigenschaft $\mu(z^k, u^k) \mapsto 0$ zu erzeugen. Dann ist zu erwarten, dass der Punkt (x^k, z^k, y^k, u^k) für hinreichend großes k die *KKT*-Bedingungen (8.21) erfüllt.

ALGORITHMUS VIP 4 (*Exterior-Point-Method*)

(S.0) Wähle $\gamma, \varrho, \sigma_{\min}, \sigma_{\max}$ mit $\gamma, \varrho \in (0, 1), 0 < \sigma_{\min} < \sigma_{\max} \leq 1$ und wähle $\varepsilon > 0$. Wähle $\beta \geq 1$ und $w^0 := (x^0, z^0, y^0, u^0)$ so, dass $w_0 \in \mathcal{N}_{-\infty}(\gamma, \beta)$ ist. Setze $k := 0$.

(S.1) Ist $(z^k)^T u^k \leq \varepsilon$, dann STOP.

(S.2) Wähle $\sigma_k \in [\sigma_{\min}, \sigma_{\max}]$. Setze $\mu_k := \sigma_k ((z^k)^T u^k)/p$ und bestimme eine Lösung $\Delta w^k := (\Delta x^k, \Delta z^k, \Delta y^k, \Delta u^k)$ der Newtongleichung (8.22) im Punkt $(x, z, y, u) := (x^k, z^k, y^k, u^k)$.

(S.3) Bestimme t_k als erstes Element der Folge $\{1, \varrho, \varrho^2, \varrho^3, \dots\}$ so, dass für $t = t_k$ die folgenden Bedingungen erfüllt sind:

$$\begin{aligned} (x^k(t), z^k(t), y^k(t), u^k(t)) &\in \mathcal{N}_{-\infty}(\gamma, \beta) \\ z^k(t)^T u^k(t) &\leq (1 - 0.01 t) (z^k)^T u^k \end{aligned}$$

(S.4) Setze $(x^{k+1}, z^{k+1}, y^{k+1}, u^{k+1}) := (x^k(t_k), z^k(t_k), y^k(t_k), u^k(t_k))$, $k := k + 1$ und gehe zu Schritt (S.1). \square

Man kann zeigen, dass Algorithmus *VIP4* unter der Voraussetzung, dass die Funktion $F : X \mapsto \mathbb{R}^n$ stetig und streng monoton ist, wohldefiniert ist, und dass jeder Häufungspunkt der Folge $\{w^k\}$ eine Lösung von $VIP(X, F)$ ist (vgl. hierzu [3], Kapitel 8).

KOMMENTAR:

- Nach Konstruktion liegen alle Iterierten w^k in der Umgebung $\mathcal{N}_{-\infty}(\gamma, \beta)$; deshalb ist bei Abbruch des Verfahrens wegen

$$\|\Phi(x^k, z^k, y^k)\| \leq \beta \mu(z^k, u^k), \|g(x^k) + u^k\| \leq \beta \mu(z^k, u^k), \|Ax^k - b\| \leq \beta \mu(z^k, u^k)$$

ein „ausreichender Abbau“ der Residuen gewährleistet. Die Größe der normierten Residuen wird durch $\mu(z^k, u^k) := \frac{(z^k)^T u^k}{p}$ „kontrolliert“.

- Die Ähnlichkeiten dieses Verfahrens mit Algorithmus EPF sind unverkennbar. Ein wesentlicher Unterschied besteht allerdings darin, dass in (S.3) die Schrittweite nach den Prinzipien der Armijo-Regel ermittelt wird.
- Bei geeigneter „Uminterpretation“ der Problemdaten kann Algorithmus *VIP4* auch als Optimierungsverfahren für **konvexe Optimierungsprobleme** verstanden werden. Eine Aufgabe der Form

$$\min f(x) \text{ s.d. } g(x) \leq 0, h(x) = 0 \quad (8.23)$$

heißt konvexes Optimierungsproblem, wenn die Funktionen $f : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}$, $g_i : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}$ ($i = 1, \dots, p$) konvex sind und $h(x) := Ax - b$ ist mit $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $b \in \mathbb{R}^m$. Unter geeigneten Differenzierbarkeitsvoraussetzungen sind die *KKT*-Bedingungen der Aufgabe (8.23) gegeben durch

$$\begin{aligned} \nabla f(x) + \sum_{i=1}^p z_i \nabla g_i(x) + \sum_{j=1}^m y_j \nabla h_j(x) &= 0 \\ h(x) &= 0 \\ g(x) \leq 0, z \geq 0, z^T g(x) &= 0 \end{aligned} \quad (8.24)$$

Diese Bedingungen stimmen mit jenen von (8.20) vollkommen überein, wenn man $F(x)$ durch $\nabla f(x)$ ersetzt. Dies ist in der Definition von $\Phi(x, z, y)$ zu ändern, dann liegt mit Algorithmus *VIP4* ein Verfahren zur Lösung der Aufgabe (8.23) vor.

Kapitel 9

Literaturverzeichnis

- [1] M. Mendel. Primal-duale pfadorientierte Innere- und Äußere-Punkte-Verfahren zur Lösung linearer Optimierungsaufgaben. Shaker Verlag. 1998.
- [2] C. Geiger, C. Kanzow. Theorie und Numerik restringierter Optimierungsaufgaben. Springer 2001.
- [3] S. Wright. Primal-Dual Interior-Point Methods. SIAM 1998.
- [4] C. Kanzow. Optimierungsverfahren zur Lösung linearer Komplementaritätsprobleme. Vorlesungsskript Universität Hamburg. SS 1996.
- [5] U. Schäfer. Einführung in das lineare Komplementaritätsproblem. Springer 2008.
- [6] M. Mendel. Eine Einführung in die Spieltheorie. Vorlesungsskript Universität Wuppertal. SS 2009.
- [7] B. Penschinski. Theorie und Numerik von Fixpunktverfahren zu Lösung von Variationsungleichungen. Masterthesis am FB Mathematik und Naturwissenschaften der Bergischen Universität Wuppertal. 2008.