18.4 Das Newton-Verfahren

Ziel: Wir suchen die Nullstellen einer Funktion $\mathbf{f} : D \to \mathbb{R}^n$, $D \subset \mathbb{R}^n$:

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$$

- Wir kennen bereits die Fixpunktiteration

$$\mathbf{x}^{k+1} := \Phi(\mathbf{x}^k)$$

mit Startwert $\mathbf{x}^0$ und Iterationsvorschrift $\Phi : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$.

- Konvergenzaussagen liefert der Banachsche Fixpunktsatz.

Vorteil: Dieses Verfahren ist **ableitungsfrei**

Nachteile:

- numerisches Verfahren konvergiert zu langsam (nur linear),
- es gibt keine eindeutige Iterationsvorschrift.

Zur Konstruktion des Newton-Verfahrens.

Ausgangspunkt: Gegeben sei eine C^1-Funktion $\mathbf{f} : D \to \mathbb{R}^n$, $D \subset \mathbb{R}^n$ offen.

Wir suchen *eine* Nullstelle von $\mathbf{f}$, d.h. ein $\mathbf{x}^* \in D$ mit

$$f(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}$$

Konstruktion des Newton-Verfahrens: Die Taylor-Entwicklung von $\mathbf{f}(\mathbf{x})$ um einen Startwert $\mathbf{x}^0$ lautet

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{f}(\mathbf{x}^0) + \mathbf{Jf}(\mathbf{x}^0)(\mathbf{x} - \mathbf{x}^0) + \mathbf{o}(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}^0\|)$$

Setzen wir $\mathbf{x} = \mathbf{x}^*$, so folgt

$$\mathbf{Jf}(\mathbf{x}^0)(\mathbf{x}^* - \mathbf{x}^0) \approx -\mathbf{f}(\mathbf{x}^0)$$

Eine Näherungslösung für $\mathbf{x}^*$ ist dann $\mathbf{x}^1$, $\mathbf{x}^1 \approx \mathbf{x}^*$, die Lösung des linearen Gleichungssystems

$$\mathbf{Jf}(\mathbf{x}^0)(\mathbf{x}^1 - \mathbf{x}^0) = -\mathbf{f}(\mathbf{x}^0)$$

Das Newton-Verfahren als Algorithmus.

Das Newton-Verfahren kann man somit wie folgt als Algorithmus formulieren.

Algorithmus (Newton-Verfahren)**:**

(1) FOR $k = 0, 1, 2, \ldots$

(2a) Löse $\mathbf{Jf}(\mathbf{x}^k) \cdot \Delta\mathbf{x}^k = -\mathbf{f}(\mathbf{x}^k)$;

(2b) Setze $\mathbf{x}^{k+1} := \mathbf{x}^k + \Delta\mathbf{x}^k$;

- Man löst im *jedem* Newton-Schritt ein lineares Gleichungssystem.
- Dessen Lösung $\Delta\mathbf{x}^k$ heißt Newton-Korrektur.
- Das Newton-Verfahren ist skalierungsinvariant. □

Invarianzen des Newton-Verfahrens.

Satz: *Das Newton-Verfahren ist invariant unter linearen Transformationen der Form*

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) \to \mathbf{g}(\mathbf{x}) = \mathbf{A}\mathbf{f}(\mathbf{x}) \qquad \text{für } \mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n\times n} \text{ regulär,}$$

d.h. die Iterierten für $\mathbf{f}$ *und* $\mathbf{g}$ *sind in diesem Fall identisch.*

Beweis: Bildet man das Newton-Verfahren für $\mathbf{g}(\mathbf{x})$, so lautet die Newton-Korrektur

$$\begin{aligned}\Delta\mathbf{x}^k &= -(\mathbf{Jg}(\mathbf{x}^k))^{-1}\cdot\mathbf{g}(\mathbf{x}^k)\\ &= -(\mathbf{AJf}(\mathbf{x}^k))^{-1}\cdot\mathbf{Af}(\mathbf{x}^k)\\ &= -(\mathbf{Jf}(\mathbf{x}))^{-1}\cdot\mathbf{f}(\mathbf{x}^k)\end{aligned}$$

womit die Newton-Korrekturen von $\mathbf{f}$ und $\mathbf{g}$ übereinstimmen.

Bei gleichem Startwert $\mathbf{x}^0$ stimmen somit auch alle Iterierten $\mathbf{x}^k$ überein. ■

Zur lokalen Konvergenz des Newton-Verfahrens.

Satz: *Sei* $\mathbf{f} : \mathrm{D} \to \mathbb{R}^n$ *eine* C^1*-Funktion,* $\mathrm{D} \subset \mathbb{R}^n$ *offen und konvex. Sei* $\mathbf{x}^* \in \mathrm{D}$ *Nullstelle von* $\mathbf{f}$*, d.h.* $\mathbf{f}(\mathbf{x}^*) = 0$*. Weiterhin sei die Jacobi-Matrix* $\mathbf{Jf}(\mathbf{x})$ *regulär für* $\mathbf{x} \in \mathrm{D}$*, und es gelte eine* Lipschitz-Bedingung

$$\|(\mathbf{Jf}(\mathbf{x}))^{-1}(\mathbf{Jf}(\mathbf{y}) - \mathbf{Jf}(\mathbf{x}))\| \leq \mathrm{L}\|\mathbf{y} - \mathbf{x}\| \qquad \text{für alle } \mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathrm{D},$$

mit einem $\mathrm{L} > 0$*. Dann ist das Newton-Verfahren für alle Startwerte* $\mathbf{x}^0 \in \mathrm{D}$ *mit*

$$\|\mathbf{x}^0 - \mathbf{x}^*\| < \frac{2}{\mathrm{L}} =: r \qquad \text{und} \qquad \mathrm{K}_r(\mathbf{x}^*) \subset \mathrm{D}$$

wohldefiniert mit $\mathbf{x}^k \in \mathrm{K}_r(\mathbf{x}^*)$, $k = 0, 1, 2, \ldots$*, und die Newton-Iterierten* $\mathbf{x}^k$ *konvergieren* **quadratisch** *gegen* $\mathbf{x}^*$*, d.h.*

$$\|\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^*\| \leq \frac{\mathrm{L}}{2}\|\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^*\|^2.$$

Weiterhin ist $\mathbf{x}^*$ *die eindeutige Nullstelle von* $\mathbf{f}(\mathbf{x})$ *innerhalb der Kugel* $\mathrm{K}_r(\mathbf{x}^*)$*.*

Beweis: Betrachte für $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in D$ die Funktion

$$\varphi(t) = (\mathbf{Jf}(\mathbf{x}))^{-1} \cdot \mathbf{f}(\mathbf{x} + t(\mathbf{y} - \mathbf{x})) \qquad \text{für } t \in [0, 1].$$

Dann ist $\varphi(t)$ stetig differenzierbar mit

$$\varphi'(t) = (\mathbf{Jf}(\mathbf{x}))^{-1} \cdot \mathbf{Jf}(\mathbf{x} + t(\mathbf{y} - \mathbf{x})) \cdot (\mathbf{y} - \mathbf{x})$$

und daraus folgt

$$\begin{aligned}
\|\varphi'(t) - \varphi'(0)\| &= \|(\mathbf{Jf}(\mathbf{x}))^{-1}(\mathbf{Jf}(\mathbf{x} + t(\mathbf{y} - \mathbf{x})) - \mathbf{Jf}(\mathbf{x}))(\mathbf{y} - \mathbf{x})\| \\
&\leq \|(\mathbf{Jf}(\mathbf{x}))^{-1}(\mathbf{Jf}(\mathbf{x} + t(\mathbf{y} - \mathbf{x})) - \mathbf{Jf}(\mathbf{x}))\| \|(\mathbf{y} - \mathbf{x})\| \\
&\leq L \cdot t \cdot \|(\mathbf{y} - \mathbf{x})\|^2.
\end{aligned}$$

Hieraus erhält man weiterhin die folgende Abschätzung.

$$
\begin{aligned}
\left\|(\mathbf{Jf}(\mathbf{x}))^{-1}(\mathbf{f}(\mathbf{y})-\mathbf{f}(\mathbf{x})-\mathbf{Jf}(\mathbf{x})(\mathbf{y}-\mathbf{x}))\right\| &= \|\varphi(1)-\varphi(0)-\varphi'(0)\| \\
&\le \left\|\int_0^1 (\varphi'(t)-\varphi'(0))\,dt\right\| \\
&\le \int_0^1 \|\varphi'(t)-\varphi'(0)\|\,dt \\
&\le \int_0^1 L\cdot t\cdot \|\mathbf{y}-\mathbf{x}\|^2\,dt = \frac{L}{2}\|\mathbf{y}-\mathbf{x}\|^2
\end{aligned}
$$

Den Fehler der Newton-Iteration stellen wir folgendermaßen dar.

$$
\begin{aligned}
\mathbf{x}^{k+1}-\mathbf{x}^* &= \mathbf{x}^k-(\mathbf{Jf}(\mathbf{x}^k))^{-1}\mathbf{f}(\mathbf{x}^k)-\mathbf{x}^* \\
&= -(\mathbf{Jf}(\mathbf{x}^k))^{-1}(\mathbf{f}(\mathbf{x}^k)-\mathbf{f}(\mathbf{x}^*))+(\mathbf{x}^k-\mathbf{x}^*) \\
&= (\mathbf{Jf}(\mathbf{x}^k))^{-1}\left(\mathbf{f}(\mathbf{x}^*)-\mathbf{f}(\mathbf{x}^k)-\mathbf{Jf}(\mathbf{x}^k)(\mathbf{x}^*-\mathbf{x}^k)\right).
\end{aligned}
$$

Daraus bekommen wir für $0 < \|\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^*\| < r = \frac{2}{L}$ die Abschätzung

$$\|\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^*\| \leq \frac{L}{2}\|\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^*\|^2 < \frac{L}{2} \cdot r\|\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^*\| = \|\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^*\|.$$

Die nichtnegative Folge $\|\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^*\|$ ist somit streng monoton fallend und daher konvergent, gegen eine reelle Zahl d mit $0 \leq d < r = 2/L$ und $d \leq L/2 \cdot d^2$, woraus $d = 0$ folgt. Somit konvergiert die Folge $\{\mathbf{x}^k\}$.

Die Nullstelle $\mathbf{x}^*$ ist eindeutig. Denn gäbe es eine weitere Nullstelle $\mathbf{x}^{**} \in K_r(\mathbf{x}^*)$ von $\mathbf{f}$, so folgt ein Widerspruch mit

$$\begin{aligned}
\|\mathbf{x}^{**} - \mathbf{x}^*\| &= \|(\mathbf{Jf}(\mathbf{x}^*))^{-1}(\mathbf{f}(\mathbf{x}^{**}) - \mathbf{f}(\mathbf{x}^*) - \mathbf{Jf}(\mathbf{x}^*))(\mathbf{x}^* - \mathbf{x}^{**})\| \\
&\leq \frac{L}{2}\|\mathbf{x}^{**} - \mathbf{x}^*\|^2 < \|\mathbf{x}^{**} - \mathbf{x}^*\|.
\end{aligned}$$

Somit ist $\mathbf{x}^*$ einzige Nullstelle von $\mathbf{f}$ in $K_r(\mathbf{x}^*)$. ■

Das gedämpfte Newton-Verfahren.

- Das Newton-Verfahren konvergiert zwar quadratisch, aber nur **lokal**.
- **Globale** Konvergenz kann ggf. durch einen Dämpfungsterm erreicht werden:

Algorithmus (Gedämpftes Newton-Verfahren)**:**

(1) FOR $k = 0, 1, 2, \ldots$

(2a) Löse $J\mathbf{f}(\mathbf{x}^k) \cdot \Delta\mathbf{x}^k = -\mathbf{f}(\mathbf{x}^k)$;

(2b) Setze $\mathbf{x}^{k+1} := \mathbf{x}^k + \lambda_k \Delta\mathbf{x}^k$;

Frage: Wie wählt man die Dämpfungsfaktoren λ_k?

Strategie: Verwende eine Testfunktion $T(\mathbf{x}) = \|\mathbf{f}(\mathbf{x})\|$, womit gilt

$$\begin{aligned} T(\mathbf{x}) &\geq 0, \quad \forall \mathbf{x} \in D \\ T(\mathbf{x}) &= 0 \quad \Longleftrightarrow \quad \mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}. \end{aligned}$$

Wahl des Dämpfungsparameters.

Wähle nun $\lambda_k \in (0, 1]$, so dass die Folge $T(\mathbf{x}^k)$ streng monoton fällt, d.h.

$$\|\mathbf{f}(\mathbf{x}^{k+1})\| < \|\mathbf{f}(\mathbf{x}^k)\| \qquad \text{für } k \geq 0.$$

- *In der Nähe* der gesuchten Lösung $\mathbf{x}^*$ sollte $\lambda_k = 1$ gewählt werden, um (lokale) quadratische Konvergenz zu sichern.

Der folgende Satz garantiert die Existenz eines Dämpfungsparameters.

Satz: *Sei* $\mathbf{f}$ *eine* C^1*-Funktion auf der offenen und konvexen Menge* $D \subset \mathbb{R}^n$*. Für* $\mathbf{x}^k \in D$ *mit* $\mathbf{f}(\mathbf{x}^k) \neq \mathbf{0}$ *gibt es dann ein* $\mu_k > 0$*, so dass*

$$\|\mathbf{f}(\mathbf{x}^k + \lambda\Delta\mathbf{x}^k)\|_2^2 < \|\mathbf{f}(\mathbf{x}^k)\|_2^2 \qquad \textit{für alle } \lambda \in (0, \mu_k).$$

Beweis: Betrachte die C^1-Funktion

$$\varphi(\lambda) = \|\mathbf{f}(\mathbf{x}^k + \lambda\Delta\mathbf{x}^k)\|_2^2$$

für $\lambda \in (-\epsilon, \epsilon)$, mit $\epsilon > 0$.

Dann gilt

$$\varphi(0) = \|\mathbf{f}(\mathbf{x}^k)\|_2^2 > 0$$

sowie

$$\varphi'(0) = 2(\mathbf{f}(\mathbf{x}^k))^T \mathbf{Jf}(\mathbf{x}^k)\Delta\mathbf{x}^k = -2(\mathbf{f}(\mathbf{x}^k))^T\mathbf{f}(\mathbf{x}^k) < 0.$$

Somit fällt die Funktion $\varphi(\lambda)$ *streng monoton* in einem (hinreichend kleinen) Intervall um Null, $(0, \mu)$, wo gilt

$$\varphi(0) = \|\mathbf{f}(\mathbf{x}^k)\|_2^2 > \|\mathbf{f}(\mathbf{x}^k + \lambda\Delta\mathbf{x}^k)\|_2^2 = \varphi(\lambda) \qquad \text{für alle } \lambda \in (0, \mu).$$

■

Dämpfungsstrategie.

Für die Startiteration: $k = 0$.

Wähle

$$\lambda_0 \in \left\{ 1, \frac{1}{2}, \frac{1}{4}, \ldots, \lambda_{\min} \right\}$$

möglichst groß, so dass gilt

$$\|\mathbf{f}(\mathbf{x}^k)\|_2 > \|\mathbf{f}(\mathbf{x}^k + \lambda_0 \Delta \mathbf{x}^k)\|_2$$

Dämpfungsstrategie.

Für nachfolgende Iterationen: $k > 0$.

- Setze $\lambda_k = \lambda_{k-1}$.

IF $\|\mathbf{f}(\mathbf{x}^k)\|_2 > \|\mathbf{f}(\mathbf{x}^k + \lambda_k \Delta\mathbf{x}^k)\|_2$ **THEN**

- $\mathbf{x}^{k+1} := \mathbf{x}^k + \lambda_k \Delta\mathbf{x}^k$
- $\lambda_k := 2\lambda_k$, falls $\lambda_k < 1$.

ELSE

- Bestimme $\mu = \max\{\lambda_k/2, \lambda_k/4, \ldots, \lambda_{\min}\}$ mit

$$\|\mathbf{f}(\mathbf{x}^k)\|_2 > \|\mathbf{f}(\mathbf{x}^k + \lambda_k \Delta\mathbf{x}^k)\|_2$$

- $\lambda_k := \mu$

END

Nichtlineare Ausgleichsprobleme.

Aufgabenstellung: Minimiere Funktion

$$g(\mathbf{x}) = \|\mathbf{F}(\mathbf{x}) - \mathbf{y}\|_2^2 \qquad \text{für } x \in \mathbb{R}^n,$$

wobei $\mathbf{y} = (y_1, \ldots, y_m)^T \in \mathbb{R}^m$ Messdaten, $m \gg n$, und

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} f(t_1; x_1, \ldots, x_n) \\ \vdots \\ f(t_m; x_1, \ldots, x_n) \end{bmatrix}$$

Werte der Ansatzfunktion

$$y = f(t; x_1, \ldots, x_n)$$

zu (verschiedenen) Messzeiten $t_1, \ldots, t_m$ und

$$\mathbf{x} = (x_1, \ldots, x_n)^T \in \mathbb{R}^n$$

gesuchte Parameter der Ansatzfunktion.

Konstruktion des Gauß-Newton-Verfahrens.

Startpunkt: Sei $\mathbf{x}^0 \approx \mathbf{x}^*$ Näherung an Lösung $\mathbf{x}^*$ des Minimierungsproblems.

Konstruktion: Dann gilt mit Taylor-Entwicklung um $\mathbf{x}^0$ *in erster Näherung*

$$\mathbf{g}(\mathbf{x}) \approx \|\mathbf{F}(\mathbf{x}^0) + \mathbf{JF}(\mathbf{x}^0)(\mathbf{x} - \mathbf{x}^0) - \mathbf{y}\|_2^2$$

Algorithmus (Gauß-Newton-Verfahren):

(1) FOR $k = 0, 1, 2, \ldots$

(2a) Löse Minimierungsaufgabe

$$\|\mathbf{JF}(\mathbf{x}^k)\Delta\mathbf{x}^k - (\mathbf{y} - \mathbf{F}(\mathbf{x}^k))\|_2^2 \longrightarrow \min_{\Delta\mathbf{x}_k}$$

durch lineare Ausgleichsrechnung.

(2b) Setze $\mathbf{x}^{k+1} := \mathbf{x}^k + \Delta\mathbf{x}^k$;

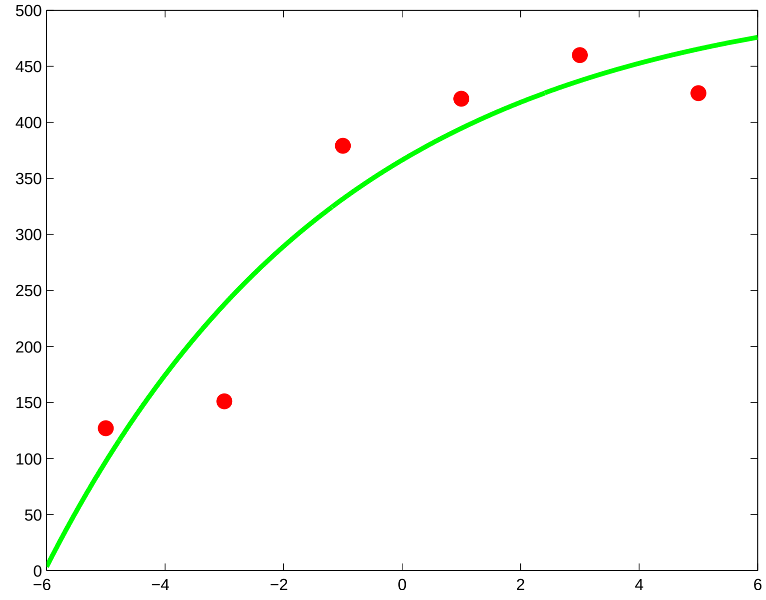
Beispiel.

Betrachte Ansatzfunktion

$$y = f(t, \mathbf{x}) = x_1 + x_2 \cdot \exp(t x_3)$$

und Messdaten

t_i	-5	-3	-1	1	3	5
y_i	127	151	379	421	460	426



Für Startwert $x_1^0 = 300$, $x_2^0 = -1$, $x_3^0 = -0.3$ liefert Gauss-Newton nach 13 Iterationen

$$x_1^* = 523.306 \quad x_2^* = -156.948 \quad x_3^* = -0.199665$$