12 Das Newton-Verfahren

Falls aus früheren VL bekannt, wird es hier als "lokales" bzw. "ungedämpftes" Newton-Verfahren bezeichnet. Es löst nichtlineare Gleichungssysteme. Im Folgenden geben wir einen Konvergenzsatz und eine Aussage zur Konvergenzgeschwindigkeit an und übertragen die Ergebnisse auf die Lösung unrestringierter Optimierungsprobleme.
Unter bestimmten Voraussetzungen ist "Newton" ein Verfahren vom Typ des Modellalgorithmus 8.5, wobei die Schrittweite 1 bei jeder Iteration ist. Dann gilt aber nur lokale Konvergenz, d.h. der Startpunkt muss schon recht nahe an der Lösung liegen. Um den Einzugsbereich zu erweitern, kann man es globalisieren, d.h. mit einer (semi-)effizienten Schrittweite versehen. Für dieses globalisierte bzw. gedämpfte Newton-Verfahren geben wir Konvergenzresultate an.

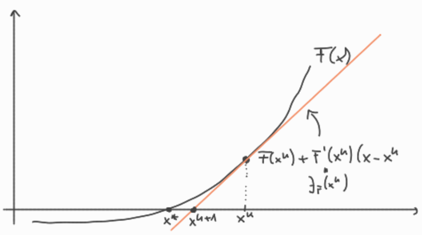
12.1 Das lokale Verfahren

12.1.1 Nichtlineare Gleichungssysteme

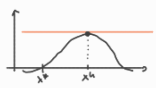
Aufgabenstellung: Finde eine Lösung $x^* \in D$ eines nichtlinearen Gleichungssystems $F_i(x_1, \dots, x_n) = 0 \ \forall i = 1, \dots, n$ $(F(x) = 0)$ wobei $D \subset \mathbb{R}^n$ offene Menge und $F: D \to \mathbb{R}^n$ eine nichtlineare, stetig differenzierbare Funktion mit Jakobi-Matrix $J_F(x) = \left(\frac{\partial F_i}{\partial x_j}(x)\right)_{i,j=1,\dots,n}$

Idee: Falls es eine Lösung x^* gibt, so finden sie näherungsweise durch die lineare Approximation an einer Stelle $x^k \approx x^*$: $F^k(x) := F(x^k) + J_F(x^k)(x - x^k)$. Die Nullstelle x^{k+1} von F^k ist eine neue Näherung an x^*.

im $\mathbb{R}^1 \to \mathbb{R}^1$



Dies führt auf die Iterationsvorschrift $x^{k+1} = x^k - (J_F(x^k))^{-1} F(x^k)$ für $k = 0, 1, 2, \dots$.
Dazu muss durch geeignete Bedingungen gesichert sein, dass das Verfahren überhaupt durchführbar ist, d.h die Matrix $J_F(x^k)$ muss nichtsingulär (invertierbar) sein, damit x^{k+1} definiert ist.



Die Inverse wird dabei nicht explizit berechnet, sondern es wird ein lineares Gleichungssystem gelöst. Die Iterationsvorschrift ist äquivalent zu $J_F(x^k) \cdot \underbrace{(x^{k+1} - x^k)}_{=:h} = -F(x^k)$. Also: löse das Gleichungssystem: $J_F(x^k) \cdot h = -F(x^k)$ und setze dann: $x^{k+1} := x^k + h^k$.

Das (lokale bzw. ungedämpfte) Newton-Verfahren lautet dann wie folgt:

Algorithmus 12.1

0) Wähle $x^0 \in \mathbb{R}^n$, setze $k := 0$
1) Falls $F(x^k) = 0 \to$ STOP!
2) Bestimme die eindeutige Lösung h^k des linearen Gleichungssystems $J_F(x^k) \cdot h^k = -F(x^k)$ und setze $x^{k+1} := x^k + h^k$.
3) Setze $k := k+1$, gehe zu 1).

Aus Numerik-Veranstaltungen ist folgender Konvergenzsatz bekannt:
$\|\cdot\|$ sei euklidische Norm im $\mathbb{R}^n$ bzw. die durch sie induzierte Matrixnorm (Spektralnorm) im $\mathbb{R}^{n \times n}$ und $U_\delta(x^*) := \{x \in \mathbb{R}^n \mid \|x^* - x\| < \delta\}$ die offene δ-Umgebung von x^* bzgl. Norm $\|\cdot\|$.

Satz 12.2

Sei $D \subset \mathbb{R}^n$ offen, $F: D \to \mathbb{R}^n$ einmal stetig differenzierbar. Es gebe eine Lösung $x^* \in D$ mit $F(x^*) = 0$ und $J_F(x^*)$ sei nichtsingulär. Dann gibt es eine Umgebung $U_\delta(x^*)$ für ein $\delta > 0$, sodass Algorithmus 12.1 für jeden Startpunkt $x^0 \in U_\delta(x^*)$ durchführbar ist und er entweder nach endlich vielen Schritten mit x^* abbricht oder er eine Folge $(x^k)_k$ erzeugt mit

i) $(x^k)_k$ konvergiert superlinear gegen x^*
ii) gibt es ein $L > 0$ mit $\|J_F(x) - J_F(x^*)\| \leq L \cdot \|x - x^*\|$ für alle $x \in U_\delta(x^*)$, dann konvergiert $(x^k)_k$ quadratisch gegen x^*.

Für Algorithmus 12.1 gilt unter der Voraussetzung von Satz 12.2 lokale Konvergenz, man spricht hierbei auch vom lokalen Newton-Verfahren

12.1.2 Minimierungsprobleme

Verwende das lokale Newton-Verfahren zur Bestimmung einer Lösung x^* des Gleichungssystems $\nabla f(x) = 0$, d.h. zur Bestimmung eines kritischen Punktes x^* einer Funktion $f \in C^2(\mathbb{R}^n)$.
Da wir nur an lokalen Minimierern von f interessiert sind (und nicht an Sattelpunkten oder lokalen Maxima), nehmen wir zusätzlich an, dass die hinreichenden Optimalitätsbedingungen 2. Ordnung aus Satz 7.15 in x^* erfüllt sind, d.h. $\nabla f(x^*) = 0$ und $\nabla^2 f(x^*)$ ist positiv definit. Da $f \in C^2(\mathbb{R}^n)$, ist $\nabla^2 f$ stetig. Die Hesse-Matrix $\nabla^2 f$ von f ist gleichsam die Jacobi-Matrix von ∇f. Aufgrund der Stetigkeit von $\nabla^2 f$ gibt es so eine Umgebung $U_\eta(x^*)$ (mit $\eta > 0$), sodass die Jacobi-Matrizen für alle $x \in U_\eta(x^*)$ stets positiv definit sind und somit nichtsingulär.

Lemma 12.3

Sei $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ eine symmetrische, positiv definite Matrix. Ist $\Delta A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ eine symmetrische Matrix mit $\|\Delta A\| \leq \frac{\lambda_{min}(A)}{2}$, so ist auch die Matrix $A + \Delta A$ symmetrisch und positiv definit und es gilt $\lambda_{min}(A + \Delta A) \geq \frac{1}{2} \lambda_{min}(A)$.

Beweis: Es gilt: $\lambda_{min}(A) \cdot \|x\|^2 \leq x^T A x \leq \lambda_{max}(A) \cdot \|x\|^2$.

Dann ist für alle $y \in \mathbb{R}^n$ mit $\|y\| = 1$: $y^T(A + \Delta A)y = y^T A y + y^T \Delta A y \geq \lambda_{min}(A) - \|\Delta A\| \geq \frac{1}{2} \lambda_{min}(A)$

NR: $y^T A y = \langle y, \Delta A y \rangle \overset{CSU}{\leq} \|y\| \cdot \|\Delta A y\| = \|\Delta A y\| \leq \|\Delta A\|$

$\Rightarrow -y^T A y \leq \|\Delta A\| \overset{\cdot(-1)}{\Rightarrow} y^T \Delta A y \geq -\|\Delta A\|$

Setzt man $y := \frac{1}{\|x\|} x$ für $x \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}$, so folgt $x^T(A + \Delta A)x \geq \frac{\lambda_{min}(A)}{2} \|x\|^2 > 0 \ \forall x \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}$ (*).

Da die Ungleichung aus Lemma 7.10 scharf ist, ist $\lambda_{min}(A + \Delta A)$ die größte Konstante, die einer solchen Ungleichung (*) genügt, also ist $\lambda_{min}(A + \Delta A) \geq \frac{\lambda_{min}}{2} > 0$.

Symmetrie von $A + \Delta A$ klar, als Summe von zwei symmetrischen Matrizen. □

Anwendung des Lemmas nun auf $D^2 f(x) = \overbrace{D^2 f(x^*)}^{A} + \overbrace{(D^2 f(x) - D^2 f(x^*))}^{\Delta A}$ zeigt, dass $D^2 f(x)$ (gleichmäßig) positiv definit ist. Algorithmus 12.1 für Problem (P) lautet dann:

Algorithmus 12.4

Lokales Newton-Verfahren

0) Wähle $x^0 \in \mathbb{R}^n$ und setze $k := 0$.

1) Falls $Df(x^k) = 0 \to$ STOP! x^k ist kritische Lösung von (P).

2) Bestimme die eindeutige Lösung p^k des linearen Gleichungssystems $D^2 f(x^k) \cdot p = -Df(x^k)$ und setze $x^{k+1} := x^k + p^k$.

3) Setze $k := k+1$ und gehe zu 1).

Aus Satz 12.2 folgt diese Aussage über die lokale Konvergenz des lokalen Newton-Verfahrens:

Satz 12.5

Sei $f \in C^2(\mathbb{R}^n)$, sei x^* lokaler Minimalpunkt von f, an dem die Hesse-Matrix $D^2 f(x^*)$ positiv definit ist. Dann existiert eine Umgebung $U_\eta(x^*)$ für ein x^* für ein $\eta > 0$, sodass Algorithmus 12.4 für jeden Startpunkt $x^0 \in U_\eta(x^*)$ durchführbar ist und er dann entweder in endlich vielen Schritten in x^* abbricht, oder er eine Folge $(x^k)_k$ erzeugt, für die gilt:

i) $(x^k)_k$ konvergiert superlinear gegen x^*.

ii) Gibt es eine Konstante $L > 0$ mit $\|D^2 f(x) - D^2 f(x^*)\| \leq L \|x - x^*\| \ \forall x \in U_\eta(x^*)$, so konvergiert $(x^k)_k$ quadratisch gegen x^*.

(Die Bedingung in ii) ist z.B. $f \in C^3(\mathbb{R}^n)$ erfüllt.)

12.2 Das globalisierte Newton-Verfahren

Algorithmus 12.6

Das globalisierte Newton-Verfahren

0) Wähle eine (semi-)effiziente Schrittweitenregel und $x^0 \in \mathbb{R}^n$. Setze $k := 0$.

1) Falls $Df(x) = 0 \to$ STOP! x^k ist kritische Lösung von (P).

2) Bestimme die eindeutige Lösung p^k des linearen Gleichungssystems: $D^2 f(x)p = -Df(x^k)$, berechne $t_k > 0$ und setze $x^{k+1} := x^k + t_k \cdot p^k$.

3) Setze $k := k+1$ und gehe zu 1).

Um abzusichern, dass die Newton-Richtung p^k existiert und eine Abstiegsrichtung ist, setzen wir die gleichmäßige positive Definitheit der Hesse-Matrix $D^2 f(x)$ auf der Menge N_0 voraus.

(V5) Sei $f \in C^2(\mathbb{R}^n)$, sei die Menge N_0 konvex und es existieren Konstanten $0 < m < M$ mit $\frac{1}{M} \cdot \|u\|^2 \leq u^T D^2 f(x) u \leq \frac{1}{m} \|u\|^2 \ \forall u \in \mathbb{R}^n, x \in N_0$.

16. Juli 2024

Bemerkung 12.7

i) Voraussetzung (V1) ist hier durch $f \in C^2(\mathbb{R}^n)$ zu ersehen

Aus (V5) folgen bereits (V2) - (V4):

Aus Satz 7.4 iii) folgt, dass auch (V4) gilt. Aus V1) und (V4) folgt nach Bemerkung 8.6 iii), dass auch (V2) gilt.

Dann folgt aus Bemerkung 8.6 ii) die Gültigkeit von (V3).

Insbesondere garantiert uns (V5) die Existenz eines eindeutigen (globalen) Minimierers x^* auf f in $\mathbb{R}^n$, welcher auch der einzige kritische Punkt von f ist, der in N_0 liegt (Bem 8.6 iii)).

ii) Die Bedingung $\frac{1}{M} \|u\|^2 \leq u^T D^2 f(x) u \leq \frac{1}{m} \|u\|^2 \ \forall u \in \mathbb{R}^n, x \in N_0$ ist nach Lemma 7.10 äquivalent zu $m \|u\|^2 \leq u^T (D^2 f(x))^{-1} u \leq M \cdot \|u\|^2 \ \forall u \in \mathbb{R}^n, x \in N_0$. Aus Bemerkung 8.16 folgt dann $m \leq \|(D^2 f(x))^{-1}\| \leq M \ \forall x \in N_0$

Bedingung (V5) erzwingt damit, dass die Matrix $D^2 f(x^0)$ positiv definit ist. Damit ist p^0 eine Abstiegsrichtung (denn: p^0 ist Lösung von $D^2 f(x^0) p^0 = -Df(x^0)$, also $0 < (p^0)^T D^2 f(x^0) \cdot p^0 = -(p^0)^T Df(x^0)$, also Abstiegsrichtung). Somit ist $x^1 \in N_0$. Dieses gleiche Argument lässt sich induktiv weiter anwenden. Somit ist p^k für jedes k eine Abstiegsrichtung für f in x^k und $x^{k+1} \in N_0$ und $D^2 f(x^{k+1})$ ist positiv definit. Also passt Algorithmus 12.6 in das Schema von Modellalgorithmus 8.5 und die Matrizen $H_k := (D^2 f(x^k))^{-1}$ in $p^k := -H_k Df(x^k)$ erfüllen alle die Forderung $m \cdot \|u\|^2 \leq u^T H u \leq M \cdot \|u\|^2 \ \forall u \in \mathbb{R}^n$ aus Satz 8.17.

Nach (V5) existiert x^* als (eindeutiger, globaler) Minimierer von f, also ist dort $\nabla f(x^*)=0$. Damit kann die Norm abgeschätzt werden zu
$\|p^k\| = \| -(\nabla^2 f(x^k))^{-1} \nabla f(x^k)\| \leq M \cdot \|\nabla f(x^k) - \nabla f(x^*)\|$.

Wenn nun $(x^k)_k$ gegen x^* konvergiert, dann konvergiert die Folge $(p^k)_k$ der Newton-Richtungen gegen 0.

Satz 12.8

Es gelte (V5) und x^* sei die dann existierende, eindeutige Lösung von (P). Dann ist das globalisierte Newton-Verfahren durchführbar und für die durch ihn erzeugten Folgen $(x^k)_k$ und $(p^k)_k$ gelten (falls kein Abbruch nach endlich vielen Schritten) $\lim_{k\to\infty} x^k = x^*$ und $\lim_{k\to\infty} p^k = 0$.

Beweis: Folgt direkt aus Satz 8.17 für beliebige semi-effiziente Schrittweitenregeln, da (V5) ja (V1)-(V4) impliziert. Das die Voraussetzung an die H_k erfüllt ist, wurde zuvor gezeigt. □

Die Konvergenzgeschwindigkeits-Aussage in Satz 8.17 ist zwar ebenfalls gültig, aber recht pessimistisch. Möchte lieber Satz 12.5 verwenden. Das würde möglich sein, wenn das globalisierte Newton-Verfahren nach endlich vielen Iterationen in das lokale Newton-Verfahren übergeht. D.h. wenn für die Schrittweitenregel gilt: $t_k=1$ für hinreichend große k.

Vermutung: Es genügt, dass $\lim_{k\to\infty} t_k = 1$ ist. Dies lässt sich für die Schrittweitenregeln aus Kapitel 9 beweisen.

Satz 12.9

Es gelte (V5). Bricht Algorithmus 12.6 nicht nach endlich vielen Schritten ab, dann gilt für die durch ihn erzeugte Schrittweitenfolge $(t^k)_k$:

i) Bei Verwendung der Minimum- oder Curry-Schrittweitenregel $\lim_{k\to\infty} t_k = 1$
ii) Bei Verwendung der Armijo-Schrittweite ist $t_k = 1$ für hinreichend große k.
iii) Bei Verwendung der Wolfe-Powell-Schrittweite ist $t_k=1$ für hinreichend große k.

Einschub Nebenrechnungen: a) Für die Newton-Richtung p^k gilt: $-\nabla f(x^k)^T p^k = -\nabla f(x^k)^T \cdot I \cdot p^k = -\nabla f(x^k)^T \cdot (\nabla^2 f(x^k))^{-1} \cdot \nabla^2 f(x^k) \cdot p^k = (p^k)^T \cdot \nabla^2 f(x^k) \cdot p^k$

b) Für Folgen $(y^k)_k$ und $(z^k)_k$ mit $y^k \in \mathbb{R}^n$, $z^k \in N_0$ und $\lim_{k\to\infty} \|y^k - z^k\| = 0$ gilt unter Verwendung von (V5):

$$\left|\frac{(p^k)^T \cdot (\nabla^2 f(y^k) - \nabla^2 f(z^k))\, p^k}{(p^k)^T \cdot \nabla^2 f(z^k) \cdot p^k}\right| \leq \frac{\|p^k\| \cdot \|\nabla^2 f(y^k) - \nabla^2 f(z^k)\| \cdot \|p^k\|}{\frac{1}{M} \cdot \|p^k\|} = M \cdot \|\nabla^2 f(y^k) - \nabla^2 f(z^k)\| \xrightarrow{k\to\infty} 0.$$

Beweis: i) Für jede exakte Schrittweite t_k gilt $\nabla f(x^k + t_k p^k)^T p^k = 0$. Wir entwickeln die Funktion $h: t \mapsto \nabla f(x^k + t_k p^k)^T p^k$ um den Entwicklungspunkt $t_0 = 0$ in einer Taylor-Reihe mit Lagrange-Restglied.

Zunächst: $h'(t) = (p^k)^T \cdot \nabla^2 f(x^k + t_k \cdot p^k) \cdot p^k$. Für die Taylor-Reihe 1. Ordnung ist dann: $\exists\, \vartheta \in (0,1)$, sodass $h(t) = h(t_0) + \overbrace{\frac{h'(t^0 + \vartheta (t - t_0))}{1!} (t-t_0)^1}^{\text{Restglied}}$.

Hier: $h(t) = \nabla f(x^k)^T p^k + (p^k)^T \nabla^2 f(x^k + \vartheta t \cdot p^k)\, p^k \cdot t$. Für $t = t_k$ ist $\vartheta t_k \cdot p^k = (x^k + t_k \cdot p^k - x^k)\vartheta = \vartheta (x^{k+1} - x^k)$, also $h(t_k) = 0 = \nabla f(x^k)^T \cdot p^k + t_k \cdot (p^k)^T \cdot \nabla^2 f(x^k + \vartheta (x^{k+1} - x^k))\, p^k$ (*).

Setze $\xi^k := x^k + \vartheta_k (x^{k+1} - x^k)$, so ist also $\xi^k \in N_0$. Löst man (*) nach t_k auf, so erhält man: $t_k = \frac{-\nabla f(x^k)^T p^k}{(p^k)^T \cdot \nabla^2 f(\xi^k) \cdot p^k} \overset{a)}{=} \frac{(p^k)^T \nabla^2 f(x^k)\, p^k}{(p^k)^T \nabla^2 f(\xi^k)\, p^k} = 1 + \frac{(p^k)^T \cdot (\nabla^2 f(x^k) - \nabla^2 (\xi^k)) \cdot p^k}{(p^k)^T \cdot \nabla^2 (\xi^k) \cdot p^k}$.

Satz 12.8 besagt $\lim_{k\to\infty} x^k = x^*$, also $\lim_{k\to\infty} \|x^{k+1} - x^k\| = \|x^* - x^k\| = 0$, also $\lim_{k\to\infty} \|\xi^k - x^k\| = 0$. Da $f \in C^2(\mathbb{R}^n)$, ist $\lim_{k\to\infty} t_k = 1$.

ii) Wir starten mit der Hilfsfunktion $h(t) := f(x^k + t_k p^k)$ und ihre Taylor-Entwicklung 2. Ordnung mit Lagrange-Restglied im Entwicklungspunkt $t^0 = 0$:

$\exists\, \eta \in (0,1)$: $h(t) = h(t^0) + h'(t^0)(t - t^0)^1 + \frac{1}{2} h''(t^0 + \eta (t - t^0)) \cdot (t - t^0)^2$

$\Rightarrow h(t^0) - h(t) = -h'(t^0)(t - t^0) - \frac{1}{2} h''(t^0 + \eta (t - t^0))(t - t^0)^2$

Mit $t^0 = 0$, $t = 1$ und obigen h (mit $h'(t) = \nabla f(x^k + t_k p^k) p^k$ sowie $h''(t) = (p^k)^T \cdot \nabla^2 f(x^k + t_k \cdot p^k) \cdot p^k$) gibt es ein $\eta_k \in (0,1)$:

$f(x^k) - f(x^k + p^k) = -\nabla f(x^k)^T p^k - \frac{1}{2} (p^k)^T \nabla^2 f(x^k + \eta_k p^k) p^k$

$$\Rightarrow \frac{f(x^k) - f(x^k + p^k)}{-\nabla f(x^k)^T \cdot p^k} = \frac{-\nabla f(x^k)^T p^k - \frac{1}{2} (p^k)^T \nabla^2 f(x^k + \eta_k p^k) p^k}{-\nabla f(x^k)^T \cdot p^k} = 1 - \frac{(p^k)^T \nabla^2 f(x^k + \eta_k \cdot p^k) p^k}{2 (p^k)^T \nabla^2 f(x^k) p^k} = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \frac{(p^k)^T (\nabla^2 f(x^k + \eta_k p^k) - \nabla^2 f(x^k))\, p^k}{(p^k)^T \nabla^2 f(x^k)\, p^k}$$

Da $\lim_{k\to\infty} p^k = 0$ (nach Satz 12.8) gilt $\lim_{k\to\infty} \|(x^k + \eta_k p^k) - x^k\| = 0$. Ferner ist $x^k \in N_0$, also folgt aus (b), dass der Zähler gegen 0 konvergiert.

Somit: $\frac{f(x^k) - f(x^k + p^k)}{-\nabla f(x^k)^T p^k} \xrightarrow{k\to\infty} \frac{1}{2}$. Somit gilt für jedes $\xi \in (0, \frac{1}{2})$ für genügend große k: $\frac{f(x^k) - f(x^k + p^k)}{-\nabla f(x^k)^T p^k} > \xi$

Mit Blick auf die Armijo-Schrittweite (Def. 9.10) "kleinstes q, so dass $f(x) - f(x - \eta^q p) \geq -\xi \eta^q \nabla f(x)^T p$ erfüllt" bedeutet dies, dass $q=0$ zur Erfüllung bereits ausreicht. $q=0$ bedeutet $t_k = \eta^0 = 1$ für hinreichend große k.

iii)