6 Die Methode von Newton

Es geht in diesem ganzen Abschnitt um die Minimierung einer ein- oder zweimal stetig differenzierbaren Funktion $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$. Ist

$$f(\hat{\boldsymbol{x}}) \le f(\boldsymbol{u}) \text{ für alle } \boldsymbol{u} \in U(\hat{\boldsymbol{x}}) \tag{6.1}$$

einer bestimmten *Umgebung* $U(\hat{\boldsymbol{x}})$ von $\hat{\boldsymbol{x}}$, so wollen wir sagen, daß $\hat{\boldsymbol{x}}$ eine *lokale Minimalstelle* von f ist. Den Wert $f(\hat{\boldsymbol{x}})$ wollen wir *lokales Minimum* von f nennen. Wir wollen also zwischen dem *Wert* und der *Stelle* unterscheiden können. Kann man als Umgebung $U(\hat{\boldsymbol{x}})$ den ganzen $\mathbb{R}^n$ wählen, so wollen wir von einer *globalen Minimalstelle* bzw. von einem *globalen Minimum* sprechen. Gilt in (6.1) für alle $\boldsymbol{u} \in U(\hat{\boldsymbol{x}})$ mit Ausnahme von $\boldsymbol{u} = \hat{\boldsymbol{x}}$ sogar $<$ statt $\le$, so sprechen wir von einer *strikten* (lokalen oder globalen) *Minimalstelle*, bzw. von einem *strikten* (lokalen oder globalen) *Minimum*. Einige typische Beispiele sind in Abbildung 6.1 wiedergegeben.

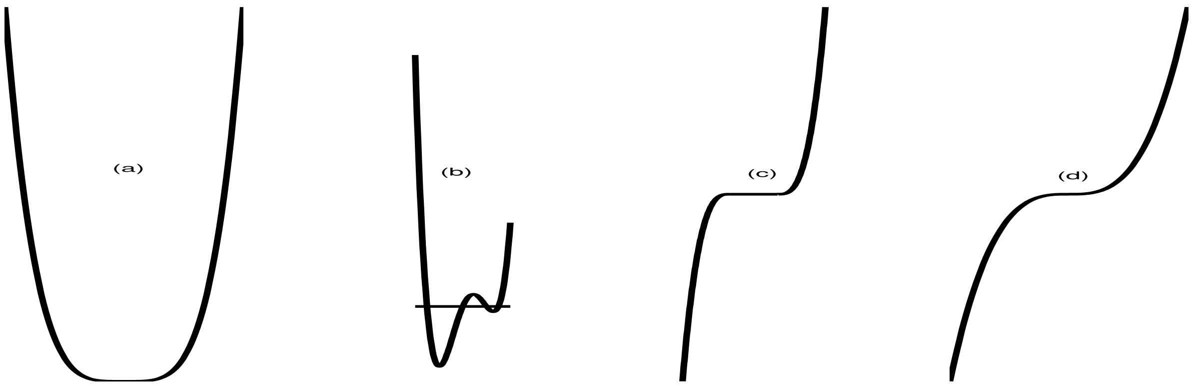

Abb. 6.1. Verschiedene Typen von Minimalstellen: (a) striktes globales Minimum, (b) mehrere lokale Minima, (c) ein lokales, nicht striktes Minimum, unendlich viele Minimalstellen, (d) kein Minimum

Die notwendigen Optimalitätsbedingungen zur Minimierung von $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ haben i. w. immer die Form

$$\text{(a)} \quad \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) := \boldsymbol{f}\,'(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{0}, \quad \text{(b)} \quad \boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{g}\,'(\boldsymbol{x})\boldsymbol{u} \ge 0 \text{ für alle } \boldsymbol{u} \in \mathbb{R}^n. \tag{6.2}$$

Das wurde bereits in Satz 1.8, S. 6 hergeleitet und ist auch von eindimensionalen Funktionen her bekannt. Genauer heißt das: Ist f einmal stetig differenzierbar, und ist $\boldsymbol{x}$ eine lokale Minimalstelle von f, so gilt (6.2)(a). Ist zusätzlich f zweimal stetig differenzierbar, so gilt auch (6.2)(b). Am Beispiel $f(x) := x^3$, $x \in \mathbb{R}$ sieht man aber, daß aus $f'(x) = 0$ nicht notwendig folgt, daß x tatsächlich eine Minimalstelle ist (Abbildung 6.1, (d)). Ist man aber in der Lage, *alle* Lösungen von $\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{0}$ zu bestimmen, so müssen sich darunter auch alle Minimalstellen von f befinden, sofern es überhaupt welche gibt. Die Nullstellen von $\boldsymbol{g}$ nennen wir auch *stationäre Punkte* von f.

Der *Gradient* $\boldsymbol{g} := \boldsymbol{f}'$ ist der Vektor aller partiellen Ableitungen von f, d. h. bei (6.2) handelt es sich um ein i. a. nichtlineares Gleichungssystem mit n Gleichungen und mit n Unbekannten $\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, \ldots, x_n)^{\mathrm{T}}$.

Eine sehr wirksame Methode zur Lösung von $\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{0}$ ist das Newtonsche Verfahren. Ist n=1 und mithin g auch nur eindimensional (wir schreiben daher g nicht fett), so lautet die bekannte Newtonsche Methode

$$x_{j+1} := x_j - \frac{g(x_j)}{g'(x_j)},\ j = 0, 1, \ldots, \quad x_0 \text{ geeignet gewählt.} \tag{6.3}$$

Es ist bekannt, daß diese Methode lokal, quadratisch gegen eine Lösung $\hat{x}$ konvergiert, sofern $g'(\hat{x}) \neq 0$. Das Wort *lokal* bedeutet, daß der Startpunkt x_0 hinreichend nahe bei $\hat{x}$ liegen muß. *Quadratisch* bedeutet, daß sich der Fehler in jedem Schritt quadriert, oder in anderen Worten, daß sich die Anzahl der richtigen Stellen von x_j mit jedem Schritt verdoppelt. In Formeln heißt das

$$|\hat{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{x}_{j+1}| \le c\,|\hat{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{x}_j|^2 \quad \text{für ein } \ c > 0. \tag{6.4}$$

Beispiel 6.2. *Anwendung des Newton-Verfahrens*
Wir minimieren eine nicht ganz triviale Funktion, nämlich

$$f(x) := \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\Big(\frac{1}{2\sqrt{2}}x^2 - \int_{-\infty}^{x} \exp(-t^2/2)\,\mathrm{dt}\Big). \tag{6.5}$$

Zu bestimmen sind also die Lösungen von

$$f'(x) = g(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\Big(\frac{1}{\sqrt{2}}x - \exp(-x^2/2)\Big) = 0 \Leftrightarrow h(x) := \sqrt{2}\exp(-x^2/2) = x.$$

Durch $\exp(-x^2/2)$ ist eine *Glockenkurve* definiert, die auch auf dem Zehnmarkschein abgebildet ist. Setzen wir $y = x/\sqrt{2}$, also $y^2 = x^2/2$, so lautet unsere Gleichung

$$\tilde{g}(y) := \exp(-y^2) - y = 0.$$

Wir suchen, geometrisch gesprochen, also den Schnittpunkt der Glocke $\exp(-y^2)$ mit der Geraden, die den ersten Quadranten gleichmäßig teilt. Für die Funktion $\tilde{g} = 0$ lautet das Newton-Verfahren (6.3)

$$y_{j+1} = y_j - \frac{\exp(-y_j^2) - y_j}{-2y_j\exp(-y_j^2) - 1}.$$

Startet man mit $y_0 = 0.5$, so erhält man nacheinander $y_1 = 0.65673\,52486\,7130$, $y_2 = 0.65291\,93602\,4849$, $y_3 = 0.65291\,86404\,1923$, $y_4 = 0.65291\,86404\,1920$, $y_5 = 0.65291\,86404\,1920$, also in wenigen Schritten etwa 14 richtige Stellen. Wegen $x = \sqrt{2}y$ erhalten wir $x = 0.92336\,63964\,0703$ und $f(x) = -0.70183\,40655\,3362$ in Übereinstimmung mit Abbildung 6.3.

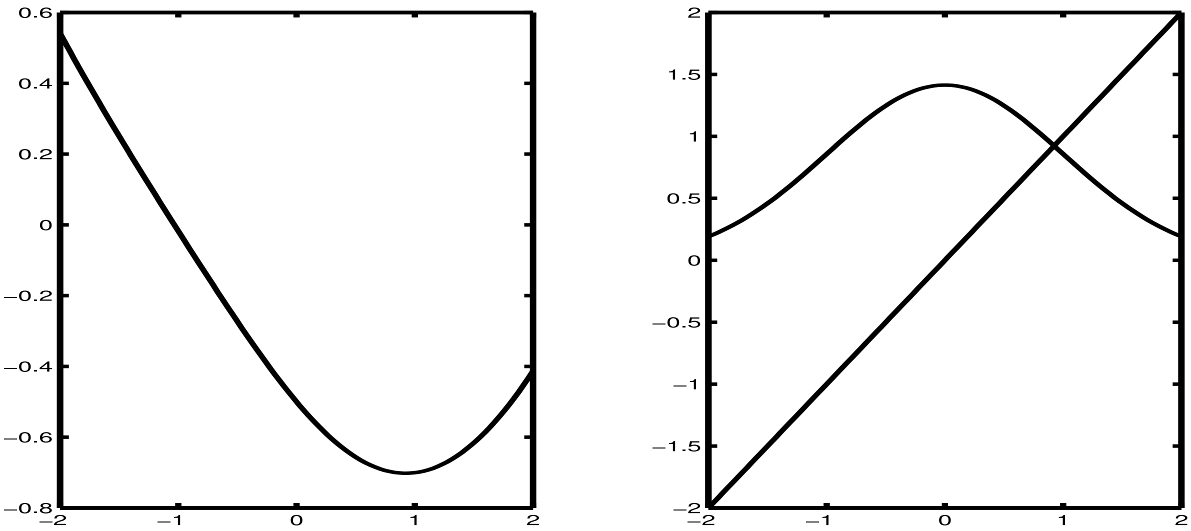

Abb. 6.3. Minimum in Beispiel 6.2, links zu minimierende Funktion f, rechts zu lösendes Gleichungssystem $h(x) = x$

Haben wir mehrere Veränderliche, so ist die Form (6.3) nicht zur Bestimmung einer Lösung von $\boldsymbol{g} = \boldsymbol{0}$ geeignet, da z. B. der Nenner gar nicht definiert ist. Schreiben wir aber die Taylor-Entwicklung von $\boldsymbol{g}$ hin,

$$\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{h}) = \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) + \boldsymbol{g}'(\boldsymbol{x})\boldsymbol{h} + o(||\boldsymbol{h}||), \tag{6.6}$$

so wird folgendermaßen argumentiert. Ist $\boldsymbol{x}$ bereits eine gute Approximation der Nullstelle von $\boldsymbol{g}$, so bedarf es nur noch einer sehr kleinen Korrektur $\boldsymbol{h}$, damit $\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{h}) = \boldsymbol{0}$ ist. Wir lassen daher den kleinen Anteil $o(||\boldsymbol{h}||)$ weg und bestimmen $\boldsymbol{h}$ aus der jetzt linearen Gleichung

$$\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) + \boldsymbol{g}'(\boldsymbol{x})\boldsymbol{h} = \boldsymbol{0}. \tag{6.7}$$

Das ist der Kern vom allgemeinen Newton-Verfahren. Die symmetrische Matrix $\boldsymbol{g}'$, das ist die Matrix der zweiten Ableitungen von f, heißt auch *Hesse-Matrix*. Aus (6.7) ergibt sich die allgemeine Rechenvorschrift:

$$\boldsymbol{g}'(\boldsymbol{x}_j)\boldsymbol{h}_j = -\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}_j), \quad \boldsymbol{x}_{j+1} = \boldsymbol{x}_j + \boldsymbol{h}_j,\ j = 0, 1, \ldots,\ \boldsymbol{x}_0 \text{ gegeben.} \tag{6.8}$$

Bevor wir weitergehen, nehmen wir mal ein einfaches Beispiel zur Handhabung des Newton-Verfahrens:

Beispiel 6.4. *Pädagogisches Beispiel*
Sei

$$f(x^{\underline{1}}, x^{\underline{2}}) \;=\; (x^{\underline{1}}-1)^2 + 2(x^{\underline{2}}-2)^2 + 3(x^{\underline{1}}-1)(x^{\underline{2}}-2)$$

zu minimieren. Dann ist mit $\boldsymbol{x} = (x^{\underline{1}}, x^{\underline{2}})^{\mathrm{T}}$

$$\begin{aligned} \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) &= \begin{pmatrix} 2(x^{\underline{1}}-1)+3(x^{\underline{2}}-2) \\ 3(x^{\underline{1}}-1)+4(x^{\underline{2}}-2) \end{pmatrix}, \\ \boldsymbol{g}'(\boldsymbol{x}) &= \begin{pmatrix} 2 & 3 \\ 3 & 4 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Das Newtonsche Verfahren lautet dann

$$\boldsymbol{g}'(\boldsymbol{x}_j)\boldsymbol{h}_j \;=\; -\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}_j),$$

oder explizit

$$\begin{pmatrix} 2 & 3 \\ 3 & 4 \end{pmatrix} \boldsymbol{h}_j \;=\; -\begin{pmatrix} 2(x_j^{\underline{1}}-1)+3(x_j^{\underline{2}}-2) \\ 3(x_j^{\underline{1}}-1)+4(x_j^{\underline{2}}-2) \end{pmatrix},$$

wobei $\boldsymbol{h}_j = \begin{pmatrix} h_j^{\underline{1}} \\ h_j^{\underline{2}} \end{pmatrix}$ als Unbekannte aufzufassen ist. Beginnen wir die Iteration mit $\boldsymbol{x}_0 = \mathbf{0}$, so ist das Gleichungssystem

$$\begin{pmatrix} 2 & 3 \\ 3 & 4 \end{pmatrix} \boldsymbol{h}_0 = \begin{pmatrix} 8 \\ 11 \end{pmatrix}$$

zu lösen. Die Lösung ist $\boldsymbol{h}_0 = (1,2)^{\mathrm{T}}$, und somit $\boldsymbol{x}_1 = \boldsymbol{x}_0 + \boldsymbol{h}_0 = (1,2)^{\mathrm{T}}$. Für diesen Punkt ist f stationär, aber hat dort kein Minimum. Wir erkennen das auch daran, daß die Matrix $\boldsymbol{g}'$ nicht definit ist.

Das Beispiel zeigt noch ein anderes Phänomen. Rechnet man weiter, so erhält man immer denselben Wert $\boldsymbol{x}_j = (1,2)^{\mathrm{T}}, j \geq 1$, obwohl man kein Minimum erreicht hat, denn $f(2,1) = -1 < f(1,2) = 0$. Das Newton-Verfahren zeigt *zyklisches* Verhalten.

Wir kommen jetzt zum allgemeinen Fall (6.8) zurück. Die aus dem linearen Gleichungssystem (6.8) sich ergebende Richtung $\boldsymbol{h}_j$ heißt auch *Newton-Richtung*. Die Frage ist, ob es sich dabei um eine *Abstiegsrichtung* für f handelt. Es ist also zu fragen, ob

$$f(\boldsymbol{x}_{j+1}) = f(\boldsymbol{x}_j + \boldsymbol{h}_j) \leq f(\boldsymbol{x}_j). \tag{6.9}$$

Satz 6.5. Sei die Matrix $\boldsymbol{g}'(\boldsymbol{x}_j)$ positiv semidefinit, und $\boldsymbol{x}_j$ hinreichend nahe bei einer Minimalstelle von f. Dann ist die nach (6.8) bestimmte Richtung $\boldsymbol{h}_j$ eine Abstiegsrichtung an der Stelle $\boldsymbol{x}_j$.

Beweis: Der Satz von Taylor liefert

$$f(\boldsymbol{x}_{j+1}) = f(\boldsymbol{x}_j + \boldsymbol{h}_j) = f(\boldsymbol{x}_j) + \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}_j)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{h}_j + \frac{1}{2}\boldsymbol{h}_j^{\mathrm{T}}\boldsymbol{g}'(\boldsymbol{x}_j)\boldsymbol{h}_j + o(||\boldsymbol{h}_j||^2). \tag{6.10}$$

Benutzen wir (6.8), so lassen sich der zweite und dritte Term rechts zusammenfassen zu $0.5\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}_j)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{h}_j$. Multipliziert man (6.8) von links mit $\boldsymbol{h}_j^{\mathrm{T}}$, so erhält man $\boldsymbol{h}_j^{\mathrm{T}}\boldsymbol{g}'(\boldsymbol{x}_j)\boldsymbol{h}_j = -\boldsymbol{h}_j^{\mathrm{T}}\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}_j) \geq 0$. Unsere Annahme, daß $\boldsymbol{x}_j$ hinreichend nahe bei einer Minimalstelle liegt, erlaubt das Weglassen des Terms mit o. □

Aus dem Beweis ergibt sich, daß an der Stelle $\boldsymbol{x}$ die Richtung $\boldsymbol{h}$ eine Abstiegsrichtung für f ist, wenn $\boldsymbol{h}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) \leq 0$. Insbesondere ist $\boldsymbol{h} = -\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x})$ die Richtung des steilsten Abstiegs. Man vgl. den Abschnitt 3. Eigenschaften von Verfahren zur unrestringierten Optimierung studiert man zuallererst an einem Modellproblem , nämlich

$$f(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}\boldsymbol{x},\ \boldsymbol{A} \text{ eine SPD-Matrix } \Rightarrow \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b},\ \boldsymbol{g}'(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{A}. \tag{6.11}$$

Die Voraussetzungen des Satzes 6.5 sind für das Modellproblem ohne Einschränkungen erfüllt. Wir bemerken weiter, daß das Newton-Verfahren eine bemerkenswerte Eigenschaft hat, nämlich eine *Skalierungsinvarianz*. Ist $\boldsymbol{A}$ eine beliebige, nicht singuläre Matrix, so heißt ein iteratives Nullstellenverfahren für $\boldsymbol{g} = \boldsymbol{0}$ *skalierungsinvariant*, wenn das Verfahren bei gleichem Anfangswert für $\boldsymbol{g} = \boldsymbol{0}$ und für $\boldsymbol{A}\boldsymbol{g} = \boldsymbol{0}$ dieselbe Folge $\boldsymbol{x}_0, \boldsymbol{x}_1, \ldots$ liefert.

Satz 6.6. Das Newton-Verfahren ist skalierungsinvariant.

Beweis: Wir vergleichen die beiden Folgen:

$$\boldsymbol{h}_j = -\boldsymbol{g}'(\boldsymbol{x}_j)^{-1}\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}_j), \quad \tilde{\boldsymbol{h}}_j = -(\boldsymbol{A}\boldsymbol{g}'(\tilde{\boldsymbol{x}}_j))^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{g}(\tilde{\boldsymbol{x}}_j).$$

Wir sehen, daß sich in der zweiten Folge wegen $(\boldsymbol{A}\boldsymbol{g}'(\tilde{\boldsymbol{x}}_j))^{-1} = \boldsymbol{g}'(\tilde{\boldsymbol{x}}_j)^{-1}\boldsymbol{A}^{-1}$ die Matrix $\boldsymbol{A}$ heraushebt. □

Satz 6.7. Sei $\boldsymbol{g} : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ zweimal stetig differenzierbar, und gebe es eine Stelle $\hat{\boldsymbol{x}}$ mit $\boldsymbol{g}(\hat{\boldsymbol{x}}) = \boldsymbol{0}$ und $\boldsymbol{g}'(\hat{\boldsymbol{x}})$ nicht singulär. Dann konvergiert das Newton-Verfahren lokal und quadratisch gegen $\hat{\boldsymbol{x}}$. Das bedeutet, daß es einen Startwert $\boldsymbol{x}_0$ gibt und eine Zahl $c > 0$ mit

$$||\hat{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{x}_{j+1}|| \leq c||\hat{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{x}_j||^2,\ j = 0, 1, \ldots \tag{6.12}$$

Beweis: z. B. Ansorge & Oberle [1994, S. 77], Opfer [1994, S. 259]. □

Bemerkung: Die Existenz der zweiten Ableitung kann durch die Lipschitzstetigkeit der ersten Ableitung ersetzt werden. Ist die Voraussetzung $\boldsymbol{g}'(\hat{\boldsymbol{x}})$ nicht singulär, nicht erfüllt, so kann das Newton-Verfahren dennoch funktionieren, aber nicht mehr so schnell. Ein einfaches Beispiel ist $g(x) = x^k,\ k \geq 2$. Dann ist $x - g(x)/g'(x) = x - x^k/(kx^{k-1}) = ((k-1)/k)x$, ein linear konvergierendes Verfahren.

Die lokale Konvergenz bedeutet, daß die Menge derjenigen Startpunkte $\boldsymbol{x}_0$ für die das Newton-Verfahren gegen eine gesuchte Lösung $\hat{\boldsymbol{x}}$ konvergiert, nicht einfach zu bestimmen und eine bizarre Menge ist. Diese Menge nennt man *Einzugsbereich* von $\hat{\boldsymbol{x}}$. Diese Mengen sind nicht nur bizarr, sondern auch ästhetisch, und werden daher auch als Raumschmuck verwendet, Peitgen & Richter [1986, S. 93ff.].

6.1 Das vereinfachte Newton-Verfahren

Das angegebene Verfahren (6.8) zur Berechnung von Lösungen von $\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) = \mathbf{0}$ ist wegen der Neuberechnung von $\boldsymbol{g}'(\boldsymbol{x}_j)$ in jedem Schritt aufwendig. Wir werden verschiedene Möglichkeiten zur Vereinfachung besprechen. Eine naheliegende Variante ist die folgende:

$$\boldsymbol{g}'(\boldsymbol{x}_0)\boldsymbol{h}_j = -\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}_j), \quad \boldsymbol{x}_{j+1} = \boldsymbol{x}_j + \boldsymbol{h}_j,\ j = 0, 1, \ldots,\ \boldsymbol{x}_0 \text{ gegeben.} \tag{6.13}$$

Man berechnet die Matrix $\boldsymbol{g}'(\boldsymbol{x}_0)$ also nur einmal. Diese Variante heißt *vereinfachtes Newton-Verfahren*. Sei $\hat{\boldsymbol{x}}$ eine Nullstelle von $\boldsymbol{g}$. Das vereinfachte Newton-Verfahren kann aufgefaßt werden als *Fixpunktproblem* für

$$\boldsymbol{N}(\boldsymbol{x}) := \boldsymbol{x} - \boldsymbol{g}'(\boldsymbol{x}_0)^{-1}\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}). \tag{6.14}$$

Der folgende Satz gibt nicht nur Information über die Konvergenz des vereinfachten Newton-Verfahrens, sondern erlaubt auch eine Fehlerabschätzung, auch für das allgemeine Newton-Verfahren und für viele andere Verfahren in Fixpunktform.

Satz 6.8. (Banachscher Fixpunktsatz). Sei $D \subset \mathbb{R}^n$ nicht leer und abgeschlossen und $\boldsymbol{f} : D \to \mathbb{R}^n$ habe (für eine beliebige Vektornorm) die folgenden Eigenschaften:

$$\begin{array}{ll} \text{(a)} & \boldsymbol{f}(D) \subset D, \\ \text{(b)} & ||\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}) - \boldsymbol{f}(\boldsymbol{y})|| \le c||\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}|| \text{ für alle } \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in D \text{ und ein } 0 < c < 1. \end{array} \tag{6.15}$$

Dann hat $\boldsymbol{f}$ in D genau einen Fixpunkt $\hat{\boldsymbol{x}}$, und bei beliebigem Startpunkt $\boldsymbol{x}_0 \in D$ konvergiert die durch $\boldsymbol{x}_{j+1} = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_j), j = 0, 1, \ldots$ definierte Folge gegen $\hat{\boldsymbol{x}}$, und es gilt die *Fehlerabschätzung*

$$||\hat{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{x}_j|| \le \frac{c^j}{1-c}\,||\boldsymbol{x}_1 - \boldsymbol{x}_0||,\ j \ge 1. \tag{6.16}$$

Beweis: In vielen Lehrbüchern, z. B. in Opfer [1994, S. 252ff]. □

Die Bedingung (a) stellt sicher, daß die Iteration überhaupt ausgeführt werden kann. Man sagt, daß $\boldsymbol{f}$ eine *Selbstabbildung* ist. Die Bedingung (b) sagt, daß die Abstände der Bildpunkte unter $\boldsymbol{f}$ kleiner sind als die der Ausgangspunkte. Daher nennt man $\boldsymbol{f}$ eine *Kontraktion* oder eine *kontrahierende Abbildung*. Eine differenzierbare Abbildung auf einem konvexen Bereich D ist nach dem Mittelwertsatz kontrahierend, wenn $||\boldsymbol{f}'(\boldsymbol{x})|| \le c < 1$ für alle $\boldsymbol{x} \in D$. Man kann also die Konstante c berechnen nach

$$c = \max_{\boldsymbol{x} \in D} |||\boldsymbol{f}'(\boldsymbol{x})||.$$

Satz 6.9. Sei $\boldsymbol{g}$ eine in einem konvexen, (nicht leeren) Bereich $D \subset \mathbb{R}^n$ definierte und dort stetig differenzierbare Funktion mit Werten im $\mathbb{R}^n$. Gäbe es eine Stelle $\boldsymbol{x}_0 \in D$ an der $\boldsymbol{g}'(\boldsymbol{x}_0)$ nicht singulär ist, und gelte (mit beliebiger Norm)

$$c := ||\boldsymbol{g}'(\boldsymbol{x}_0)^{-1}|| \sup_{\boldsymbol{x}\in D} ||\boldsymbol{g}'(\boldsymbol{x}_0) - \boldsymbol{g}'(\boldsymbol{x})|| < 1. \tag{6.17}$$

Habe $\boldsymbol{x}_1 := \boldsymbol{N}(\boldsymbol{x}_0)$ mit $\boldsymbol{N}$ nach (6.14) die Eigenschaft

$$K := \{\boldsymbol{x} : ||\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_1|| \leq \frac{c}{1-c}||\boldsymbol{x}_1 - \boldsymbol{x}_0||\} \subset D,$$

so konvergiert das vereinfachte Newton-Verfahren gegen den einzigen in K vorhandenen Fixpunkt $\hat{\boldsymbol{x}}$, und es gilt die Fehlerabschätzung (6.16).

Beweis: Wir betrachten die durch $\boldsymbol{N}$, (6.14) erzeugte Folge. Es ist

$$\boldsymbol{N}'(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{I} - \boldsymbol{g}'(\boldsymbol{x}_0)^{-1}\boldsymbol{g}'(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{g}'(\boldsymbol{x}_0)^{-1}(\boldsymbol{g}'(\boldsymbol{x}_0) - \boldsymbol{g}'(\boldsymbol{x}))$$

$$\Rightarrow ||\boldsymbol{N}'(\boldsymbol{x})|| \leq ||\boldsymbol{g}'(\boldsymbol{x}_0)^{-1}||\,||\boldsymbol{g}'(\boldsymbol{x}_0) - \boldsymbol{g}'(\boldsymbol{x})||.$$

Die Abbildung $\boldsymbol{N}$ ist also nach (6.17) in D eine Kontraktion. Sie ist auch eine Selbstabbildung auf (der abgeschlossenen Kugel) K. Sei $\boldsymbol{x} \in K$, dann ist auch $\boldsymbol{N}(\boldsymbol{x}) \in K$ wegen $||\boldsymbol{N}(\boldsymbol{x}) - \boldsymbol{x}_1|| \leq ||\boldsymbol{N}(\boldsymbol{x}) - \boldsymbol{N}(\boldsymbol{x}_1)|| + ||\boldsymbol{N}(\boldsymbol{x}_1) - \boldsymbol{x}_1|| \leq c||\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_1|| + c||\boldsymbol{x}_1 - \boldsymbol{x}_0|| \leq c/(1-c))||\boldsymbol{x}_1 - \boldsymbol{x}_0||$. □

Dieser Satz erlaubt auch eine einfache Fehlerabschätzung für das gewöhnliche Newton-Verfahren. Hat man bis $\boldsymbol{x}_{j+1}$ gerechnet, so faßt man dieses Ergebnis auf als ersten und einzigen Schritt des vereinfachten Newton-Verfahrens mit Startwert $\boldsymbol{x}_j$. Man erhält also

$$||\hat{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{x}_{j+1}|| \leq \frac{c}{1-c}\,||\boldsymbol{x}_{j+1} - \boldsymbol{x}_j||. \tag{6.18}$$

Rechnen wir das Beispiel 6.2 mit demselben Anfangswert $y_0 = 0.5$ noch einmal mit dem vereinfachten Newton-Verfahren, so erhalten wir

$y_1 = 0.65673\,52486\,7130$, $y_2 = 0.65275\,95154\,4255$, $y_4 = 0.65291\,83665\,3593$, $y_5 = 0.65291\,86517\,8297$, $y_6 = 0.65291\,86399\,4771$, $y_7 = 0.65291\,86404\,3877$, $y_9 = 0.65291\,86404\,1924$, $y_{10} = 0.65291\,86404\,1920$.

Wir brauchen mehr als doppelt so viele Schritte.

6.2 Das gedämpfte Newton-Verfahren

Das Newton-Verfahren kann aufgefaßt werden als ein Richtungsverfahren zur Minimierung von f mit Startpunkt $\boldsymbol{x}$ in Richtung $\boldsymbol{h}$. Die Richtung $\boldsymbol{h}$ heißt in diesem Zusammenhang auch *Newton-Richtung*. Es ist daher naheliegend, die Richtung in der Länge zu modifizieren, um den Einzugsbereich des Newton-Verfahrens zu vergrößern. Wir rechnen nach wie vor $\boldsymbol{h}_j$ aus (6.7) aus und bestimmen aber den neuen Wert nach der Formel

$$\boldsymbol{x}_{j+1} = \boldsymbol{x}_j + \alpha_j \boldsymbol{h}_j, \tag{6.19}$$

wobei α_j nach verschiedenen Regeln bestimmt werden kann, im Regelfall so, daß $\alpha_j \leq 1$ ist. Daher spricht man von einem *gedämpften* Newton-Verfahren. Eine Methode, die sog. *Goldstein-Armijo-Methode* ist sehr beliebt. Schrittweitensteuerungen sind bereits im Abschnitt 5 besprochen worden.

6.3 Quasi-Newton-Verfahren

Der große Nachteil der bisher beschriebenen Newton-Verfahren ist die Notwendigkeit der Berechnung der Hesse-Matrix $\boldsymbol{g}'$. Bei größerer Dimension bedeutet das einerseits einen erheblichen Aufwand, andererseits kann auch der Fall eintreten, daß man die zweiten Ableitungen nicht berechnen will oder kann. Daher ist es naheliegend, die zweiten Ableitungen durch Differenzenapproximationen zu ersetzen. Man setzt also für ein hinreichend kleines $h > 0$ (typischerweise $h = 1.0e - 6$)

$$f_{xy} \approx \frac{f_x(x, y+h) - f_x(x, y)}{h}. \tag{6.20}$$

Dies Verfahren ist immer noch aufwendig, wenn auch jetzt nur die ersten Ableitungen von f verwendet werden. Wir schreiben die Gleichung (6.7) in die Form

$$\boldsymbol{h}_j = -\boldsymbol{B}_j \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}_j) \tag{6.21}$$

und fassen $\boldsymbol{B}_j$ als eine Approximation von $\boldsymbol{g}'(\boldsymbol{x}_j)^{-1}$ auf, so daß bei wachsendem j die Approximation immer besser wird. Außerdem versuchen wir eine einfache Formel zu finden, so daß $\boldsymbol{B}_{j+1}$ mit wenig Aufwand aus $\boldsymbol{B}_j$ ausgerechnet werden kann. Das ist ein relativ ehrgeiziges Ziel. Von $\boldsymbol{B}_{j+1}$ verlangt man, daß die sogenannte *quasi-Newton-Gleichung* gilt:

$$\boldsymbol{B}_{j+1}(\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}_{j+1}) - \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}_j)) = \boldsymbol{x}_{j+1} - \boldsymbol{x}_j. \tag{6.22}$$

Da die Hesse-Matrix symmetrisch und bei den zu behandelnden Problemen auch positiv definit ist, wird man das auch von den Matrizen $\boldsymbol{B}_j$ verlangen (die Inverse einer SPD-Matrix ist wieder eine SPD-Matrix). Eine Menge von Formeln erhält man in der Form

$$\begin{aligned} \boldsymbol{B}_{j+1} &= \tau_j \boldsymbol{B}_j + \Big(1 + \tau_j \theta_j \frac{\boldsymbol{q}_j^{\mathrm{T}} \boldsymbol{B}_j \boldsymbol{q}_j}{\boldsymbol{r}_j^{\mathrm{T}} \boldsymbol{q}_j}\Big) \frac{\boldsymbol{r}_j \boldsymbol{r}_j^{\mathrm{T}}}{\boldsymbol{r}_j^{\mathrm{T}} \boldsymbol{q}} - \frac{\tau_j (1 - \theta_j)}{\boldsymbol{q}_j^{\mathrm{T}} \boldsymbol{B}_j \boldsymbol{q}_j} \boldsymbol{B}_j \boldsymbol{q}_j (\boldsymbol{B}_j \boldsymbol{q}_j)^{\mathrm{T}} \\ &\quad - \frac{\tau_j \theta_j}{\boldsymbol{r}_j^{\mathrm{T}} \boldsymbol{q}_j} \Big(\boldsymbol{r}_j (\boldsymbol{B}_j \boldsymbol{q}_j)^{\mathrm{T}} + (\boldsymbol{B}_j \boldsymbol{q}_j) \boldsymbol{r}_j^{\mathrm{T}}\Big), \end{aligned} \tag{6.23}$$

wobei

$$\boldsymbol{q}_j : \;=\; \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}_{j+1}) - \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}_j), \quad \boldsymbol{r}_j := \boldsymbol{x}_{j+1} - \boldsymbol{x}_j$$

gesetzt wurde. Die beiden Größen $\tau_j > 0, \theta_j$ sind noch frei wählbare Parameter. Diese Klasse heißt die *Oren-Luenberger-Klasse*. Die genannte quasi-Newton-Gleichung hat mit obigen Bezeichnungen die Form $\boldsymbol{B}_{j+1}\boldsymbol{q}_j = \boldsymbol{r}_j$.

Sind $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}$ beliebige Vektoren gleicher Länge, so ist das Produkt $\boldsymbol{D} := \boldsymbol{x}\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}$ eine Matrix, deren Elemente die Produkte der Einträge der Vektoren sind. Dieses Produkt nennt man *dyadisches Produkt* und die Matrix $\boldsymbol{D}$ eine *Dyade*. Sind beide Vektoren $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}$ nicht die Nullvektoren, so hat $\boldsymbol{D}$ den Rang Eins, andernfalls den Rang Null (Nullmatrix). Die Dyaden charakterisieren die Matrizen vom Rang Eins. D. h., eine Matrix $\boldsymbol{M}$ hat genau dann den Rang Eins, wenn zwei Nichtnullvektoren $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}$ existieren mit $\boldsymbol{M} = \boldsymbol{x}\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}$. Eine Summe vom Typ $\boldsymbol{x}\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}} + \boldsymbol{y}\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}$ hat i. a. den Rang zwei. Eine Summe von k Dyaden hat höchstens den Rang k.

Die obige Formel (6.23) enthält drei Dyaden. Die Matrix $\boldsymbol{B}_{j+1}$ wird also aus $\boldsymbol{B}_j$ durch die Addition einer Matrix, die höchstens den Rang drei hat, umgerechnet. Die entstehenden Verfahren nennt man auch *Rang-Eins-Verfahren*, etc. Es gibt einige wichtige Spezialafälle:

(a) Die Broyden-Klasse: $\tau_j = 1$;
(a1) Die DFP-Formeln (nach Davidon, Fletcher, Powell): $\tau_j = 1, \theta_j = 0$;
(a2) Die BFGS-Formeln (nach Broyden, Fletcher, Goldfarb, Shanno): $\tau_j = 1, \theta_j = 1$.

Weitere Formeln für $\tau_j \neq 1$ kann man in der Literatur finden (Göpfert [1986, S. 143–145]). Ausführliches steht in Gill, Murray,& Wright [1981,4.4,4.5] und in Fletcher [1987, Ch. 3]. Die Formeln (6.23) lassen sich einfach in ein matlab-Programm umsetzen.

Programm 6.10. Die Aufdatierungsformeln der Oren-Luenberger-Klasse

```
function Bneu=BFGSetc(tau,theta,q,r,B);
%Wir formulieren die Aufdatierungsformeln der Oren-Luenberger-Klasse
%mit den Spezialfllen DFP, BFGS, (tau=1),SSVM (tau<>1).
Bneu=tau*B+(1+ tau*theta*(q'*B*q)/(r'*q))*r*r'/(r'*q)-...
     tau*(1- theta)/(q'*B*q)*(B*q)*(B*q)'-...
     tau*theta/(r'*q)*(r*(B*q)'+(B*q)*r');
return
%Der Test Bneu*q=r wird bestanden
```

6.4 Beispiele zu den Newton-Verfahren

Eine viel verwendete Testfunktion zum Testen von Algorithmen unrestringierter Optimierungsprobleme ist die sog. *Rosenbrock-Funktion*

$$f(x, y) := 100(y - x^2)^2 + (1 - x)^2. \tag{6.24}$$

Ihre Darstellung ähnelt einer Banane, daher wird sie auch *Bananenfunktion* genannt. Sie hat eine eindeutige Minimalstelle $(x, y) = (1, 1)$ mit $f(1, 1) = 0$. In der matlab-Toolbox *Optimization* gibt es einige Demonstrationsbeispiele mit den Anfangswerten $(-1.9, 2)$. Dort werden vorgeführt: BFGS, DFP, steilster Abstieg, Nelder-Mead, Gauß-Newton, Levenberg-Marquardt (noch nicht besprochen). Mit den wenigsten Funktionsauswertungen kommt das Gauß-Newton-Verfahren aus. Das Verfahren des steilsten Abstiegs rennt sich fest und wird abgebrochen.