

Numerisches Rechnen

Nichtlineare Gleichungssysteme

M. Grepl

J. Berger & R. O'Connor

Institut für Geometrie und Praktische Mathematik
RWTH Aachen

Wintersemester 2015/16

Vorlesungsinhalt

4. Nichtlineare Gleichungssysteme, iterative Lösungsverfahren

geg.: $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$;

ges.: $x^* \in \mathbb{R}^n$, so dass $f(x^*) = 0$

5. Nichtlineare Ausgleichsrechnung

geg.: $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$;

ges.: $x^* \in \mathbb{R}^n$, so dass $x^* = \arg \min_{x \in \mathbb{R}^n} \|F(x)\|_2$

6. Interpolation

geg.: Stützstellen und zugehörige Daten

$(x_0, f(x_0)), (x_1, f(x_1)), \dots, (x_n, f(x_n));$

ges.: Polynom $P_n \in \Pi_n$, so dass

$$P_n(x_j) = f(x_j), \quad j = 0, \dots, n$$

Übersicht

Themen: Dahmen & Reusken Kap. 5.1-5.6

- ▶ Kondition des Nullstellenproblems
- ▶ Fixpunktiteration
- ▶ Konvergenz und Fehlerschätzung
- ▶ Berechnung von Nullstellen, Newton-Verfahren

Was Sie mitnehmen sollten:

- ▶ Verschiedene Lösungsverfahren für nichtlineare Gleichungssysteme
- ▶ Konvergenzeigenschaften und Genauigkeit der Verfahren

Motivation

1. Die meisten Probleme in der Praxis führen auf nichtlineare Gleichungssysteme
2. Je genauer das (mathematische) Modell ist, desto eher ist es nichtlinear:

- ▶ Pendelschwingung: Auslenkungswinkel φ beschrieben durch

$$\ddot{\varphi}(t) + \frac{g}{\ell}\varphi(t) = 0 \quad \text{vs.} \quad \ddot{\varphi}(t) + \frac{g}{\ell}\sin(\varphi(t)) = 0$$

für kleine vs. große Auslenkungen.

- ▶ Lineare vs. nichtlineare Diffusion: Temperatur u beschrieben durch

$$u_t = \operatorname{div}(k \nabla u) \quad \text{vs.} \quad u_t = \operatorname{div}(k(u) \nabla u)$$

mit Wärmeleitfähigkeit $k(u) = c_1 + c_2 u + c_3 u^3$.

- ▶ Strömungsprobleme, Netzwerkanalyse, ...

Problemstellung

Aufgabe

Zu gegebenem $f = (f_1, \dots, f_n)^T : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ bestimme ein $x^* = (x_1^*, \dots, x_n^*)^T \in \mathbb{R}^n$, so dass

$$\begin{array}{rcl} f_1(x_1^*, \dots, x_n^*) & = & 0 \\ \vdots & & \vdots \\ f_n(x_1^*, \dots, x_n^*) & = & 0 \end{array}$$

erfüllt ist. Wir werden dies häufig kurz als

$$f(x^*) = 0$$

schreiben.

Problemstellung

Aufgabe

Gegeben: $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$;

Gesucht: $x^* \in \mathbb{R}^n$, so dass $f(x^*) = 0$.

- ▶ Lineare Gleichungssysteme: Sonderfall dieser Problemstellung

$$A x^* = b \quad \Leftrightarrow \quad f(x^*) = A x^* - b = 0.$$

- ▶ Der Spezialfall $n = 1$ wird oft als *skalare* Gleichung in *einer* Unbekannten bezeichnet.
- ▶ Hat man mehr (nichtlineare) Gleichungen als Unbekannte, d.h.

$$f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m \text{ mit } m > n$$

erhält man ein *nichtlineares Ausgleichsproblem* (siehe nächstes Kapitel).

Problemstellung

Aufgabe

Gegeben: $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$;

Gesucht: $x^* \in \mathbb{R}^n$, so dass $f(x^*) = 0$.

Problem: analytische Lösung i.A. nicht möglich, d.h. exakte Lösung in einer endlichen Anzahl von Schritten.

Vorgehen: iterative Lösungsverfahren, d.h. schrittweise Annäherung an Lösung, bis gewünschte Genauigkeit erreicht ist.

Fragen/Probleme:

- ▶ Wie finden wir ein geeignetes iteratives Verfahren?
- ▶ Unter welchen Bedingungen konvergiert das Verfahren?
- ▶ Wie schnell konvergiert das Verfahren?
- ▶ Ist die gewünschte Genauigkeit erreicht?

Kondition des Nullstellenproblems: $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$

- ▶ Störungen in den Daten (Funktionswerten)

$$|\tilde{f}(x) - f(x)| \leq \epsilon.$$

- ▶ Sei \tilde{x}^* eine Nullstelle für die gestörte Funktion \tilde{f} , d.h.

$$\tilde{f}(\tilde{x}^*) = 0 \quad \Rightarrow \quad |f(\tilde{x}^*)| \leq \epsilon.$$

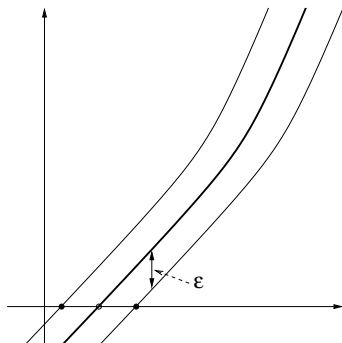
- ▶ Sei m die Vielfachheit der Nullstelle x^* , d.h.

$$f(x^*) = 0, \quad f'(x^*) = 0, \dots, \quad f^{(m-1)}(x^*) = 0, \quad f^{(m)}(x^*) \neq 0$$

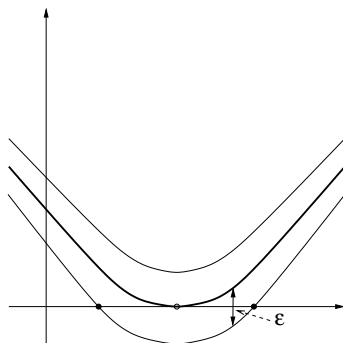
Störung im Ergebnis

$$|\tilde{x}^* - x^*| \lesssim \epsilon^{\frac{1}{m}} \left| \frac{m!}{f^{(m)}(x^*)} \right|^{\frac{1}{m}}.$$

Merke: Probleme mit mehrfachen Nullstellen sind i.A. hinsichtlich Störungen in f sehr schlecht konditioniert.

Kondition des Nullstellenproblems: $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ 

einfache Nullstelle



mehrfache Nullstelle

Kondition des Nullstellenproblems: $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$

Beispiel 5.4.

► Funktion $f(x) = (x - 1)^3$ hat dreifache Nullstelle $x^* = 1$.

► Nullstelle der gestörten Funktion $\tilde{f}(x) = (x - 1)^3 - \epsilon$ ist

$$\tilde{x}^* = 1 + \epsilon^{\frac{1}{3}}.$$

► Für $\epsilon = 10^{-12}$ ergibt sich

$$|f(x) - \tilde{f}(x)| = 10^{-12}, \quad |x^* - \tilde{x}^*| = 10^{-4}.$$

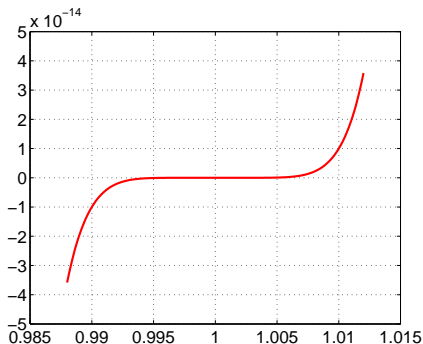
► Nullstelle einer quadratischen Funktion N5.1

► Eine gestörte Funktion hat möglicherweise viele Nullstellen.

Beispiel: Polynom 7. Grades

Matlab Plot

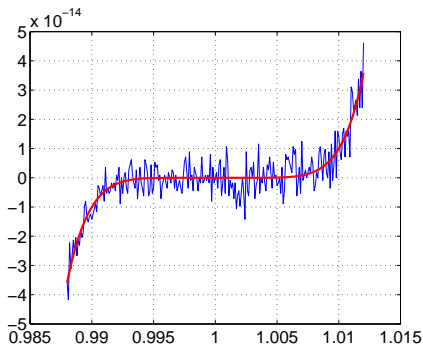
```
x = 0.988:0.0001:1.012;  
y = (x-1).^7;  
plot(x,y)
```



Beispiel: Polynom 7. Grades

Matlab Plot

```
x = 0.988:0.0001:1.012;  
y = x.^7-7*x.^6+21*x.^5-35*x.^4+35*x.^3-21*x.^2+7*x-1;  
plot(x,y)
```



Fixpunktiteration

Fragen/Probleme:

- Wie finden wir ein geeignetes iteratives Verfahren?

Ansatz:

- Sei $M_x \in \mathbb{R}^{n \times n}$ eine von x abhängige Matrix, die in einer Umgebung der Nullstelle x^* invertierbar ist. Dann folgt

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

- Erweitere die Gleichung mit x^* , d.h.

$$M_{x^*} f(x^*) = 0 \iff x^* = x^* - M_{x^*} f(x^*)$$

Daraus folgt: Das *Nullstellenproblem*

$$f(x^*) = 0$$

ist äquivalent zum *Fixpunktproblem*

$$x^* = \Phi(x^*), \quad \text{mit} \quad \Phi(x) := x - M_x f(x).$$

Fixpunktiteration

Fixpunktiteration

N5.2

- ▶ Wähle Startwert x_0 in einer Umgebung von x^*
- ▶ Bilde

$$x_{k+1} = \Phi(x_k), \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

Bemerkungen:

1. Die Steigung von Φ an x^* entscheidet darüber, ob die Fixpunktiteration gegen x^* konvergiert oder divergiert
 - ▶ $|\Phi'(x^*)| < 1$: x^* anziehend
 - ▶ $|\Phi'(x^*)| > 1$: x^* abstoßend
2. Durch eine geeignete Wahl von M_x (bzw. $\Phi(x)$) lässt sich die Konvergenzeigenschaft der Fixpunktiteration positiv beeinflussen.

Ein paar Definitionen

Lipschitz-Stetigkeit

Eine Funktion $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ heißt Lipschitz stetig, wenn eine Konstante L existiert, so dass

$$|f(x) - f(y)| \leq L |x - y|$$

für alle $x, y \in \mathbb{R}$.

Selbstabbildung

Eine Abbildung Φ ist eine Selbstabbildung auf E , wenn

$$\Phi : E \rightarrow E.$$

Beispiel:

N5.3

- ▶ Selbstabbildung $E = [a, b] \subset \mathbb{R}$
- ▶ Geometrische Interpretation

Ein paar Definitionen

Kontraktion

Sei $E \subseteq \mathbb{R}^n$. Eine Abbildung $\Phi : E \rightarrow \mathbb{R}^n$ heißt Kontraktion auf E , wenn

$$\|\Phi(x) - \Phi(y)\| \leq L \|x - y\|$$

für alle $x, y \in E$ mit $L < 1$.

- Φ ist genau dann eine Kontraktion, wenn sie Lipschitz stetig mit der Konstanten $L \in [0, 1)$ ist.

Beispiele:

1. Analyse von Fall I und Fall II in N5.2. N5.4
2. Bestimme die größere der beiden Nullstelle der Funktion $f(x) = x^2 - x - 2$. N5.5 D:SC

Beispiel 5.7.

N5.6

Man berechne die positive Nullstelle der Funktion

$$f(x) := x^6 - x - 1.$$

- ▶ Die Funktion f hat eine eindeutige positive Nullstelle x^* und es gilt $x^* \in [0, 2]$.

- ▶ Mögliche Fixpunktfunktionen sind

$$\Phi_1(x) := x^6 - 1 \quad \text{oder} \quad \Phi_2(x) := (x + 1)^{\frac{1}{6}}.$$

- ▶ Betrachte $\Phi_1(x)$: wir erhalten

$$|\Phi_1'(x)| = |6x^5| > 1 \quad \text{für } x \in [1, 2],$$

d.h. $\Phi_1(x)$ ist nicht als Fixpunktfunktion geeignet.

- ▶ Betrachte $\Phi_2(x)$: wir erhalten

$$|\Phi_2'(x)| = \left| \frac{1}{6}(x + 1)^{-\frac{5}{6}} \right| \leq \frac{1}{6} \quad \text{für } x \in [0, 2],$$

Beispiel 5.7.

und damit

$$\begin{aligned} |\Phi_2(x) - \Phi_2(y)| &= |\Phi'_2(\xi)(x - y)| \\ &\leq \frac{1}{6} |x - y| \quad \text{für } x, y \in [0, 2]. \end{aligned}$$

- Die Funktion $\Phi_2(x)$ ist eine *Selbstabbildung* auf $[0, 2]$, d.h. $\Phi_2 : [0, 2] \rightarrow [0, 2]$.
- Ergebnisse

k	$x_0 = 0.5$ $x_{k+1} = \Phi_2(x_k)$	$x_0 = 0.5$ $x_{k+1} = \Phi_1(x_k)$	$x_0 = 1.13$ $x_{k+1} = \Phi_1(x_k)$	$x_0 = 1.135$ $x_{k+1} = \Phi_1(x_k)$
0	0.50000000	0.50000000	1.13000000	1.14e+00
1	1.06991319	-0.98437500	1.08195175	1.14e+00
2	1.12890836	-0.09016330	0.60415884	1.17e+00
3	1.13420832	-0.99999946	-0.95136972	1.57e+00
4	1.13467844	-0.00000322	-0.25852598	1.38e+01
5	1.13472009	-1.00000000	-0.99970144	6.91e+06
6	1.13472378	0.00000000	-0.00179000	1.09e+41
7	1.13472411	-1.00000000	-1.00000000	1.69e+246

Banachscher Fixpunktsatz 5.8

Sei X ein linear normierter Raum und $E \subseteq X$ eine vollständige Teilmenge von X . Sei Φ eine **Selbstabbildung** auf E , d.h.

$$\Phi : E \rightarrow E,$$

und ferner eine **Kontraktion** auf E

$$\|\Phi(x) - \Phi(y)\| \leq L\|x - y\| \quad \text{für alle } x, y \in E,$$

mit $L < 1$. Dann gilt:

1. Es existiert genau ein Fixpunkt x^* von Φ in E .
2. Für beliebiges $x_0 \in E$ konvergiert

$$x_{k+1} = \Phi(x_k), \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

gegen den Fixpunkt x^* .

Banachscher Fixpunktsatz 5.8

Sei X ein linear normierter Raum und $E \subseteq X$ eine vollständige Teilmenge von X . Sei Φ eine **Selbstabbildung** auf E , d.h.

$$\Phi : E \rightarrow E,$$

und ferner eine **Kontraktion** auf E

$$\|\Phi(x) - \Phi(y)\| \leq L\|x - y\| \quad \text{für alle } x, y \in E,$$

mit $L < 1$. Dann gilt:

3. A-priori-Fehlerabschätzung:

B5.1

$$\|x_k - x^*\| \leq \frac{L^k}{1 - L} \|x_1 - x_0\|.$$

4. A-posteriori-Fehlerabschätzung:

B5.1

$$\|x_k - x^*\| \leq \frac{L}{1 - L} \|x_k - x_{k-1}\|.$$

Bemerkung

Fragen/Probleme:

- ▶ Unter welchen Bedingungen konvergiert das Verfahren?

⇒ Banachscher Fixpunktsatz liefert hinreichende Bedingungen, damit $x_{k+1} = \Phi(x_k)$, $k = 0, 1, \dots$ gegen einen Fixpunkt x^* konvergiert.

Fragen/Probleme:

- ▶ Ist die gewünschte Genauigkeit erreicht?

Wir möchten eine gewünschte Genauigkeit ϵ erreichen, so dass

$$\|x_k - x^*\| \leq \epsilon.$$

Frage: Wie viele Iterationen müssen wir durchführen?

Bemerkung

Mit Hilfe der a-priori-Fehlerabschätzung erhalten wir

$$\|x_k - x^*\| \leq \frac{L^k}{1 - L} \|x_1 - x_0\| < \epsilon.$$

und damit

$$L^k \leq \frac{\epsilon(1 - L)}{\|x_1 - x_0\|}.$$

Die maximal benötigte Anzahl an Iterationen ist daher:

$$k \geq \log \left(\frac{\epsilon(1 - L)}{\|x_1 - x_0\|} \right) / \log(L).$$

Beachte

Wegen

$$\|x_k - x_{k-1}\| \leq L^{k-1} \|x_1 - x_0\|$$

ist die Schranke in der a-posteriori-Fehlerabschätzung immer besser (d.h., kleiner) als die in der a-priori-Fehlerabschätzung.

Folgerungen aus Satz 5.8

Folgerung 5.10.

Sei $X = \mathbb{R}$, $E = [a, b]$ und Φ eine auf E stetig differenzierbare Funktion. Es gelte

$$\Phi : [a, b] \rightarrow [a, b] \quad (\text{Selbstabbildung}),$$

und

$$\max_{x \in [a, b]} |\Phi'(x)| =: L < 1.$$

Dann sind alle Voraussetzungen aus Satz 5.8 erfüllt für $\|\cdot\| = |\cdot|$

Beachte: Mittelwertsatz

$$|\Phi(x) - \Phi(y)| = |\Phi'(\xi)(x - y)| \leq \max_{\xi \in [a, b]} |\Phi'(\xi)| |x - y|,$$

d.h. Φ ist eine Kontraktion.

Folgerungen aus Satz 5.8

Folgerung 5.11.

Sei $X = \mathbb{R}^n$, $E \subseteq \mathbb{R}^n$ eine abgeschlossene konvexe Menge, und $\Phi : E \rightarrow \mathbb{R}^n$ sei stetig differenzierbar. Es gelte

$$\Phi : E \rightarrow E \quad (\text{Selbstabbildung}),$$

und bzgl. einer Vektornorm $\|\cdot\|$ auf \mathbb{R}^n gelte für die zugehörige Matrixnorm

$$\max_{x \in E} \|\Phi'(x)\| = L < 1.$$

Dann sind alle Voraussetzungen aus Satz 5.8 erfüllt.

Hierbei ist $\Phi'(x) = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x_1} \Phi_1(x) & \dots & \frac{\partial}{\partial x_n} \Phi_1(x) \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial}{\partial x_1} \Phi_n(x) & \dots & \frac{\partial}{\partial x_n} \Phi_n(x) \end{pmatrix}$

die Jacobi-Matrix von Φ an der Stelle x .

Beispiel 5.13

Zeigen Sie, dass das System

$$\begin{aligned}6x &= \cos x + 2y \\ 8y &= xy^2 + \sin x\end{aligned}$$

auf $E = [0, 1] \times [0, 1]$ eine eindeutige Lösung besitzt. Bestimmen Sie diese Lösung bis auf eine Genauigkeit 10^{-3} in der ∞ -Norm.

- ▶ Fixpunktfunktion:

$$\Phi(x, y) = \begin{pmatrix} \frac{1}{6} \cos x + \frac{1}{3} y \\ \frac{1}{8} xy^2 + \frac{1}{8} \sin x \end{pmatrix}$$

- ▶ Selbstabbildung: Für $x \in [0, 1]$ gilt $0 \leq \cos x \leq 1$ und $0 \leq \sin x \leq 1$. Daher gilt

$$\Phi : E \rightarrow E.$$

Beispiel 5.13

- ▶ Kontraktion: Die Jacobi-Matrix ist

$$\Phi'(x, y) = \begin{pmatrix} -\frac{1}{6} \sin x & \frac{1}{3} \\ \frac{1}{8} y^2 + \frac{1}{8} \cos x & \frac{1}{4} xy \end{pmatrix}.$$

Damit erhält man für die ∞ -Norm auf \mathbb{R}^2

$$\begin{aligned} \|\Phi'(x, y)\|_{\infty} &= \max \left\{ \frac{1}{6} |\sin x| + \frac{1}{3}, \frac{1}{8} (|y^2 + \cos x| + 2|xy|) \right\} \\ &\leq \frac{1}{2}. \end{aligned}$$

Wegen Folgerung 5.11 existiert genau eine Lösung in E .

- ▶ Fehlerschätzung: Mit $\epsilon = 10^{-3}$ und $L = \frac{1}{2}$ benötigt man maximal

$$k \geq \log \left(\frac{0.5 \times 10^{-3}}{\|x_1 - x_0\|} \right) / \log \left(\frac{1}{2} \right)$$

Schritte.

Beispiel 5.13

Für den Startwert

$$(x_0, y_0) = (0, 0)$$

erhält man als 1. Iterierte

$$(x_1, y_1) = \left(\frac{1}{6}, 0\right)$$

und damit

$$k \geq \log \left(\frac{0.5 \times 10^{-3}}{1/6} \right) / \log \left(\frac{1}{2} \right) = 8.38,$$

d.h. es werden maximal 9 Iterationen benötigt.

Ergebnisse:

- ▶ Siehe folgende Tabelle.
- ▶ In der dritten Spalte werden die Resultate der a-posteriori-Fehlerabschätzung gezeigt.

Beispiel 5.13

k	$(x_0, y_0) = (0, 0),$ $(x_k, y_k) = \Phi(x_{k-1}, y_{k-1})$	$\frac{0.5}{1-0.5^*}$ $\ (x_k, y_k)^T - (x_{k-1}, y_{k-1})^T\ _\infty$
0	(0.00000000, 0.00000000)	—
1	(0.16666667, 0.00000000)	1.67e-01
2	(0.16435721, 0.02073702)	2.07e-02
3	(0.17133296, 0.02046111)	6.98e-03
4	(0.17104677, 0.02132096)	8.60e-04
5	(0.17134151, 0.02128646)	2.95e-04
6	(0.17132164, 0.02132275)	3.63e-05
7	(0.17133430, 0.02132034)	1.27e-05
8	(0.17133314, 0.02132189)	1.56e-06
9	(0.17133369, 0.02132175)	5.52e-07

Aus der a-posteriori-Fehlerabschätzung ergibt sich, dass schon für $k = 4$ (statt $k = 9$) die gewünschte Genauigkeit erreicht ist.

Konvergenzordnung und Fehlerschätzung

Ein Maß für die Konvergenzgeschwindigkeit einer Folge ist der Begriff der *Konvergenzordnung*.

Definition 5.14

Eine konvergente Folge $\{x_k\}_{k \in \mathbb{N}}$ in \mathbb{R}^n mit Grenzwert x^* hat die Konvergenzordnung p , falls für ein $k_0 \in \mathbb{N}$

$$\|x_{k+1} - x^*\| \leq c \|x_k - x^*\|^p$$

für alle $k \geq k_0$ gilt, wobei

$$0 < c < 1 \quad \text{falls} \quad p = 1.$$

Ein *iteratives Verfahren* zur Bestimmung von $x^* \in \mathbb{R}^n$ (z.B. die Nullstelle einer Funktion) hat die Konvergenzordnung p , wenn es eine Umgebung U von x^* gibt, so dass für alle Startwerte aus $U \setminus \{x^*\}$ die von dem Verfahren erzeugte Folge gegen x^* konvergiert und die Konvergenzordnung p hat.

Beispiel 5.15.

Vergleich der Konvergenzgeschwindigkeit zwischen

1. Verfahren der Ordnung $p = 1$ (lineare Konvergenz), und
2. Verfahren der Ordnung $p = 2$ (quadratische Konvergenz).

Sei $\|x_0 - x^*\| = 0.2$ und $e_k := \|x_k - x^*\|$, dann ergibt sich

1. Linear: $p = 1$ und $c = \frac{1}{2}$

k	1	2	3	4	5	6
$e_k \leq$	0.1	0.05	0.025	0.0125	0.00625	0.003125

2. Quadratisch: $p = 2$ und $c = 3$

k	1	2	3	4	5	6
$e_k \leq$	0.12	0.0432	0.0056	0.000094	$3 \cdot 10^{-8}$	$2 \cdot 10^{-15}$

Bemerkungen 5.16

Sei

$$x_{k+1} = \Phi(x_k), \quad k = 0, 1, \dots,$$

eine konvergente Fixpunktiteration mit Fixpunkt x^* . Mit Hilfe der Taylorreihenentwicklung erhält man

$$\begin{aligned} x_{k+1} - x^* &= \Phi(x_k) - \Phi(x^*) \\ &= \Phi'(x^*)(x_k - x^*) + \mathcal{O}(\|x_k - x^*\|^2). \end{aligned}$$

Daraus folgt für die Konvergenzordnung:

- ▶ wenn $0 \neq \|\Phi'(x^*)\| < 1$: Lineare Konvergenz ($p = 1$).
- ▶ wenn $\Phi'(x^*) = 0$: Quadratische Konvergenz ($p = 2$).

Für die meisten in der Praxis benutzten Methoden zur Nullstellenbestimmung gilt $p = 1$ (lineare Konvergenz) oder $p = 2$ (quadratische Konvergenz).

Bisektion

Algorithmus 5.20.

Gegeben $a_0 < b_0$ mit $f(a_0)f(b_0) < 0$.

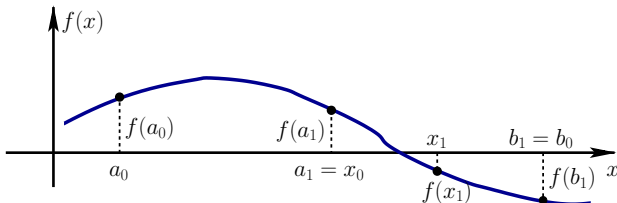
Für $k = 0, 1, 2, \dots$ berechne:

► $x_k = \frac{1}{2}(a_k + b_k), f(x_k).$

► Setze

$$a_{k+1} = a_k, \quad b_{k+1} = x_k \quad \text{falls } f(x_k)f(a_k) \leq 0$$

$$a_{k+1} = x_k, \quad b_{k+1} = b_k \quad \text{sonst.}$$



Beispiel 5.21.

D:SC

Bestimmen Sie die Nullstelle $x^* \in [0, 2]$ der Funktion $f(x) = x^6 - x - 1$ mittels Bisektion (vgl. Beispiel 5.7).

Die Bisektion mit Startwerten $a_0 = 0$ und $b_0 = 2$ liefert die Resultate:

k	a_k	b_k	x_k	$b_k - a_k$	$f(x_k)$
0	0.00000	2.00000	1.00000	2.00000	-1.00000
1	1.00000	2.00000	1.50000	1.00000	8.89062
2	1.00000	1.50000	1.25000	0.50000	1.56470
3	1.00000	1.25000	1.12500	0.25000	-0.09771
4	1.12500	1.25000	1.18750	0.12500	0.61665
5	1.12500	1.18750	1.15625	0.06250	0.23327
6	1.12500	1.15625	1.14062	0.03125	0.06158
7	1.12500	1.14062	1.13281	0.01562	-0.01958
8	1.13281	1.14062	1.13672	0.00781	0.02062
9	1.13281	1.13672	1.13477	0.00391	0.00043
10	1.13281	1.13477	1.13379	0.00195	-0.00960

Newton-Verfahren

Ziel: Konstruiere Φ so, dass die Fixpunktiteration $x_{k+1} = \Phi(x_k)$ möglichst schnell konvergiert.

Ansatz:

- ▶ Setze $\Phi(x) = x - M_x f(x)$, wobei hier $M_x = g(x)$ (skalar).
- ▶ Wähle $g(x)$ so, dass $\Phi'(x^*) = 0$.

Es gilt: $\Phi'(x^*) = 0 \iff g(x^*) = \frac{1}{f'(x^*)},$

und daraus folgt $\Phi(x) := x - \frac{f(x)}{f'(x)}.$

Newton-Verfahren

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}, \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

Newton-Verfahren

- ▶ Geometrische Herleitung des Newton-Verfahrens: **N5.7**
- ▶ Anwendung des Newton-Verfahrens: **N5.8**
- ▶ Geometrische Interpretation gibt Aufschluß über das Konvergenzverhalten. Außerdem gilt der folgende

Satz 5.22.

Sei f zweimal stetig differenzierbar in einer Umgebung $U = (a, b)$ von x^* , und es gelte $f(x^*) = 0$, $f'(x^*) \neq 0$.

Dann gilt für $x_k \in U$ und $x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}$:

$$x_{k+1} - x^* = \frac{1}{2} \frac{f''(\xi_k)}{f'(x_k)} (x_k - x^*)^2, \quad \xi_k \in U,$$

also ist das Newton-Verfahren lokal quadratisch konvergent.

Beispiel 5.23.

Bestimmen Sie die Nullstelle $x^* \in [0, 2]$ der Funktion $f(x) = x^6 - x - 1$ mit Hilfe des Newton-Verfahrens (vgl. Beispiel 5.7 & 5.21).

Newton-Iteration $x_{k+1} = x_k - \frac{x_k^6 - x_k - 1}{6x_k^5 - 1}$ liefert die
Resultate:

k	$x_0 = 0.5$	$x_0 = 2$	$x_{k+1} - x_k$
0	0.5000000000000000	2.0000000000000000	-3.19e-01
1	-1.32692307692308	1.68062827225131	-2.50e-01
2	-1.10165080870249	1.43073898823906	-1.76e-01
3	-0.92567640260338	1.25497095610944	-9.34e-02
4	-0.81641531662254	1.16153843277331	-2.52e-02
5	-0.78098515830640	1.13635327417051	-1.62e-03
6	-0.77810656986872	1.13473052834363	-6.39e-06
7	-0.77808959926268	1.13472413850022	-9.87e-11
8	-0.77808959867860	1.13472413840152	0.00e+00
9	-0.77808959867860	1.13472413840152	-

Beispiel 5.24.

Man berechne \sqrt{a} für ein $a > 0$ mit Hilfe des Newton-Verfahrens.

Ansatz: Die Wurzel von a , \sqrt{a} , ist Lösung von

$$f(x) := x^2 - a = 0.$$

Das Newton-Verfahren ergibt in diesem Fall $x_{k+1} = \frac{1}{2}(x_k + \frac{a}{x_k})$

und liefert die Resultate:

k	x_k	$x_{k+1} - x_k$	$\sqrt{2} - x_k$
0	100.00000000000000	-5.00e+01	-9.86e+01
1	50.01000000000000	-2.50e+01	-4.86e+01
2	25.02499600079984	-1.25e+01	-2.36e+01
3	12.55245804674590	-6.20e+00	-1.11e+01
4	6.35589469493114	-3.02e+00	-4.94e+00
5	3.33528160928043	-1.37e+00	-1.92e+00
6	1.96746556223115	-4.75e-01	-5.53e-01
7	1.49200088968972	-7.58e-02	-7.78e-02
8	1.41624133202894	-2.03e-03	-2.03e-03
9	1.41421501405005	-1.45e-06	-1.45e-06
10	1.41421356237384	-	-7.45e-13

Newton-Verfahren Demos

Konvergenzverhalten des Newton-Verfahrens: **D:MV** und **D:SC**

- ▶ Divergenz
- ▶ Oszillation in der Nähe lokaler Minima
- ▶ Überspringen von Nullstellen
- ▶ Endlose Iteration

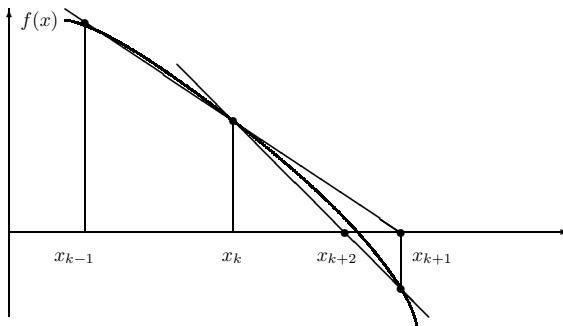
Merke:

- ▶ Quadratische Konvergenz nur lokal
- ▶ Guter Startwert ist wichtig

Sekanten-Verfahren

Idee:

- ▶ Ersetzen der Tangente $T(x)$ im Newton-Verfahren durch eine Sekante
- ▶ Nullstelle der Sekante ergibt neue Annäherung



Sekanten-Verfahren

Sekanten-Verfahren

D:SC

$$\begin{aligned}x_{k+1} &= \frac{x_{k-1}f(x_k) - x_kf(x_{k-1})}{f(x_k) - f(x_{k-1})} \\&= x_k - f(x_k) \left(\frac{x_k - x_{k-1}}{f(x_k) - f(x_{k-1})} \right)\end{aligned}$$

Vorteile gegenüber Newton-Verfahren

- ▶ Berechnung der Ableitung $f'(x)$ wird vermieden.
- ▶ Effizienter, wenn Auswertung von $f'(x)$ und $f(x)$ etwa gleich teuer.

Nachteile gegenüber Newton-Verfahren

- ▶ Konvergenzordnung lokal $p \approx 1.6$.
- ▶ Verfahren benötigt zwei Startwerte.

Beispiel 5.26.

Bestimmen Sie die Nullstelle $x^* \in [0, 2]$ der Funktion $f(x) = x^6 - x - 1$ mit Hilfe des Sekanten-Verfahrens (vgl. Beispiel 5.7, 5.21 & 5.23).

k	x_k	$x_{k+1} - x_k$
0	2.0000000000000000	-1.00e+00
1	1.0000000000000000	1.61e-02
2	1.01612903225806	1.74e-01
3	1.19057776867664	-7.29e-02
4	1.11765583094155	1.49e-02
5	1.13253155021613	2.29e-03
6	1.13481680800485	-9.32e-05
7	1.13472364594870	4.92e-07
8	1.13472413829122	1.10e-10
9	1.13472413840152	—

Die Werte in der dritten Spalte ergeben eine Fehlerabschätzung.

Newton-Verfahren für Systeme

Aufgabe

Sei $f = (f_1, \dots, f_n)^T : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ (für $n > 1$) eine zweimal stetig differenzierbare vektorwertige Funktion. Bestimme $x^* = (x_1^*, \dots, x_n^*)^T \in \mathbb{R}^n$, so dass

$$f(x^*) = 0$$

erfüllt ist.

- Notation: Wir bezeichnen die Lösung am Iterationsschritt k mit

$$x^k = (x_1^k, \dots, x_n^k)^T \in \mathbb{R}^n.$$

- Zur Erinnerung: Taylorentwicklung (für $i = 1, 2, \dots, n$)

$$f_i(x) = f_i(x^k) + \sum_{j=1}^n \frac{\partial f_i(x^k)}{\partial x_j} (x_j - x_j^k) + \mathcal{O}(\|x - x^k\|_2^2).$$

Das Newton-Verfahren für Systeme

- Taylorentwicklung kompakt

$$f(x) = f(x^k) + f'(x^k)(x - x^k) + \mathcal{O}(\|x - x^k\|_2^2)$$

wobei die Jacobimatrix gegeben ist durch

$$f'(x) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1(x)}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f_1(x)}{\partial x_n} \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial f_n(x)}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f_n(x)}{\partial x_n} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{n \times n}$$

- Für die Nullstelle x^{k+1} der linearen Näherung von f in x^k folgt (vgl. Tangente)

$$0 = f(x^k) + f'(x^k)(x^{k+1} - x^k),$$

und hieraus erhält man

$$x^{k+1} = x^k - (f'(x^k))^{-1} f(x^k).$$

Das Newton-Verfahren für Systeme

Algorithmus 5.28 (Newton-Iteration)

Gegeben: Startwert x^0 .

Für $k = 0, 1, 2, \dots$:

1. Berechne $f(x^k), f'(x^k)$
2. Löse das lineare Gleichungssystem in s^k
$$f'(x^k)s^k = -f(x^k).$$
3. Setze (Newton-Korrektur)

$$x^{k+1} = x^k + s^k$$

Beachte:

- ▶ Schritt 2 erfordert die Lösung eines $n \times n$ linearen Gleichungssystems \Rightarrow LR-Zerlegung.
- ▶ Die Inverse von $f'(x^k)$ wird nicht explizit berechnet.

Beispiel 5.29

Gegeben sei das nichtlineare Gleichungssystem

$$f_1(x_1, x_2) = 6x_1 - \cos x_1 - 2x_2 = 0$$

$$f_2(x_1, x_2) = 8x_2 - x_1x_2^2 - \sin x_1 = 0$$

Führen Sie einen Schritt des Newton-Verfahrens ausgehend vom Startwert $x^0 = (0, 0)^T$ durch.

- Berechnung der Jacobi-Matrix

$$f'(x) = \begin{pmatrix} 6 + \sin x_1 & -2 \\ -x_2^2 - \cos x_1 & 8 - 2x_1x_2 \end{pmatrix}.$$

- Berechnung von $f(x^0)$ und $f'(x^0)$

$$f(x^0) = \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad f'(x^0) = \begin{pmatrix} 6 & -2 \\ -1 & 8 \end{pmatrix}.$$

Beispiel 5.29

Gegeben sei das nichtlineare Gleichungssystem

$$f_1(x_1, x_2) = 6x_1 - \cos x_1 - 2x_2 = 0$$

$$f_2(x_1, x_2) = 8x_2 - x_1x_2^2 - \sin x_1 = 0$$

Führen Sie einen Schritt des Newton-Verfahrens ausgehend vom Startwert $x^0 = (0, 0)^T$ durch.

- Berechnung der Newton-Korrektur s^0 aus

$$\begin{pmatrix} 6 & -2 \\ -1 & 8 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} s_1^0 \\ s_2^0 \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix} \Rightarrow s^0 = \frac{1}{46} \begin{pmatrix} 8 \\ 1 \end{pmatrix}$$

- Berechnung von x^1 ergibt schließlich

$$x^1 = x^0 + s^0 = \frac{1}{46} \begin{pmatrix} 8 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Satz 5.31.

Annahmen:

- ▶ Gebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ offen und konvex
- ▶ Funktion $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^n$ stetig differenzierbar
- ▶ Jacobi-Matrix $f'(x) \in \mathbb{R}^{n \times n}$
 - ▶ invertierbar
$$\det(f'(x)) \neq 0, \quad \text{für alle } x \in \Omega$$
 - ▶ die Inverse beschränkt durch eine Konstante β
$$\|(f'(x))^{-1}\| \leq \beta \quad \text{für alle } x \in \Omega.$$
 - ▶ Lipschitz-stetig auf Ω mit einer Konstanten γ
$$\|f'(x) - f'(y)\| \leq \gamma \|x - y\|, \quad x, y \in \Omega.$$
- ▶ Es existiere eine Lösung x^* von $f(x) = 0$ in Ω .

Satz 5.31.

Der Startwert x^0 erfülle

$$x^0 \in K_\omega(x^*) := \{x \in \mathbb{R}^n \mid \|x^* - x\| < \omega\}$$

mit ω hinreichend klein, so dass $K_\omega(x^*) \subset \Omega$ und

$$\omega \leq \frac{2}{\beta\gamma}.$$

Dann bleibt die durch das Newton-Verfahren definierte Folge $\{x^k\}_{k=0}^\infty$ innerhalb von $K_\omega(x^*)$ und konvergiert **quadratisch** gegen x^* :

$$\|x^{k+1} - x^*\| \leq \frac{\beta\gamma}{2} \|x^k - x^*\|^2, \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

Hinweise zur praktischen Durchführung

1. Das vereinfachte Newton-Verfahren

Problem: Jeder Schritt erfordert Aufstellen und Lösung des $n \times n$ linearen Gleichungssystems

$$f'(x^k)s^k = -f(x^k).$$

Ansatz:

- ▶ Aufstellen der Jacobi-Matrix im ersten Schritt $f'(x^0)$.
- ▶ Statt $f'(x^k)$ verwende $f'(x^0)$ zur Bestimmung der Newton-Korrektur, d.h.

$$f'(x^0)s^k = -f(x^k), \quad x^{k+1} = x^k + s^k, \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

- ▶ LR-Berechnung effizient (“mehrere rechte Seiten”)
- ▶ **Beachte:**
 - ▶ quadratische Konvergenz geht verloren
 - ▶ evtl. neue Berechnung von f' nach ca. 3-5 Schritten

Hinweise zur praktischen Durchführung

2. Auswertung der Jacobi-Matrix

Problem: Einträge der Jacobi-Matrix, $\frac{\partial f_i(x^k)}{\partial x_j}$, nicht oder nur schwer in geschlossener Form berechenbar.

Ansatz:

- Annäherung durch *numerische* Differentiation

$$\frac{\partial f_i(x)}{\partial x_j} \approx \frac{f_i(x + h e^j) - f_i(x)}{h},$$

wobei e^j der j -te Einheitsvektor ist.

- Wahl von h : (siehe "Interpolation")
 - zu groß verringert Genauigkeit der Approximation und damit Konvergenz
 - zu klein birgt Gefahr der Auslöschung
- **Siehe auch:** Quasi-Newton-Verfahren (BFGS)

Hinweise zur praktischen Durchführung

3. Homotopieverfahren

Problem: Bestimmung eines “guten” Startwerts.

Ansatz:

- ▶ Benütze Problemparameter oder künstlich eingeführten Parameter zur Definition einer Familie von Problemen $F(x, \mu) = 0$, so dass F für ein μ einfach lösbar ist.
- ▶ Beispiel: Nichtlineare Diffusion

$$u_t = \operatorname{div}(k(u) \nabla u)$$

mit Wärmeleitfähigkeit $k(u) = c_1 + c_2 u$.

1. Lineares Problem für $c_2 = 0$
2. Setze $c_2 = c_2 + \Delta c$ (klein) und nehme lineare Lösung als Startwert für nichtlineares Problem.
3. Iteriere bis Newton konvergiert, gehe zu 2.

Hinweise zur praktischen Durchführung

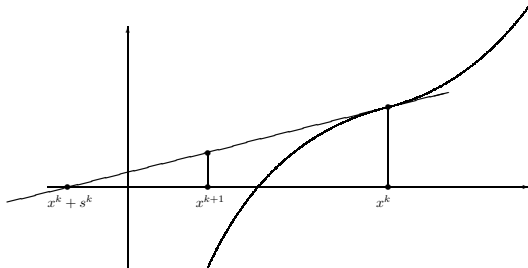
4. Gedämpftes Newton-Verfahren

Problem: Divergenz bei schlechtem Startwert

Ansatz: Man setzt

$$x^{k+1} = x^k + \lambda s^k$$

für ein passendes $\lambda = \lambda_k$, $0 < \lambda \leq 1$.

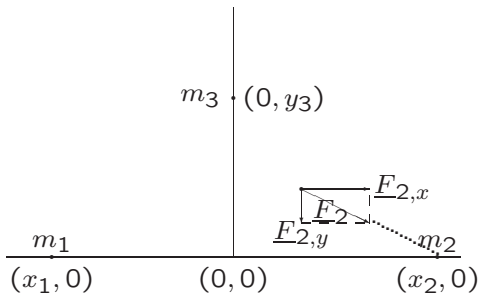


Mehr zu Newton beim Thema “Optimierung” ...

Beispiel 5.1 & 5.34

4. Wahl des Startwerts

Bestimme den Punkt (x, y) , so dass für eine Punktmasse m an der Stelle (x, y) die Gravitationskräfte \underline{F}_i zwischen m und m_i im Gleichgewicht sind.



Beispiel 5.1 & 5.34

- ▶ Gravitationskraft zwischen zwei Punktmassen m_1 und m_2 mit gegenseitigem Abstand r :

$$F = G \frac{m_1 m_2}{r^2},$$

wobei $G = 6.67 \cdot 10^{-11} \text{Nm}^2/\text{kg}$.

- ▶ Hilfsgrößen

$$r_i := \sqrt{(x - x_i)^2 + (y - y_i)^2},$$

$$F_i := G \frac{m_i m}{r_i^2},$$

$$F_{i,x} := \frac{F_i(x_i - x)}{r_i}, \quad F_{i,y} := \frac{F_i(y_i - y)}{r_i}, \quad i = 1, 2, 3.$$

- ▶ Gleichgewichtsbedingungen

$$F_{1,x} + F_{2,x} + F_{3,x} = 0, \quad F_{1,y} + F_{2,y} + F_{3,y} = 0.$$

Beispiel 5.1 & 5.34

- Hieraus ergibt sich das nichtlineare Gleichungssystem

$$f_1(x, y) = \sum_{i=1}^3 \frac{m_i(x_i - x)}{((x - x_i)^2 + (y - y_i)^2)^{3/2}} = 0$$

$$f_2(x, y) = \sum_{i=1}^3 \frac{m_i(y_i - y)}{((x - x_i)^2 + (y - y_i)^2)^{3/2}} = 0$$

- Für f_1, f_2 gilt

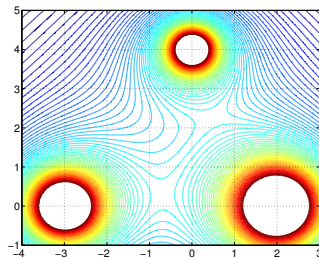
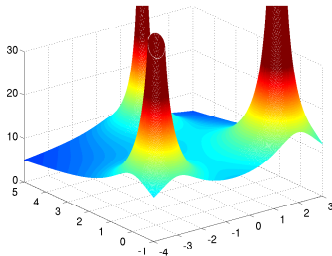
$$\begin{pmatrix} f_1(x, y) \\ f_2(x, y) \end{pmatrix} = \nabla U(x, y),$$

wobei das Potential U gegeben ist durch

$$U(x, y) := \sum_{i=1}^3 \frac{m_i}{((x_i - x)^2 + (y_i - y)^2)^{1/2}}$$

Beispiel 5.1 & 5.34

- Wahl des Startwerts: (x^*, y^*) ist genau dann Lösung des Systems, wenn (x^*, y^*) ein lokales Minimum, lokales Maximum oder ein Sattelpunkt des Potentials U ist.
- Das Potential U hat zwei Sattelpunkte und keine lokalen Maxima oder Minima hat. Das System hat also genau zwei Lösungen.



Beispiel 5.1 & 5.34

- ▶ Anhand der Graphik kann man geeignete Startwerte wählen.
- ▶ Ergebnisse des Newton-Verfahrens:

k	x^k	y^k	$\ f(x^k, y^k)\ _2$	$\ (x^k, y^k) - (x^{k+1}, y^{k+1})\ _2$
0	-0.8000000000000000	0.2000000000000000	3.25e-01	1.31e-01
1	-0.697601435074387	0.281666888630281	1.03e-02	4.45e-03
2	-0.694138545697644	0.284468076535443	1.09e-05	4.09e-06
3	-0.694134676058600	0.284469396792393	9.67e-12	4.57e-12
4	-0.694134676055255	0.284469396789285	2.02e-16	-

k	x^k	y^k	$\ f(x^k, y^k)\ _2$	$\ (x^k, y^k) - (x^{k+1}, y^{k+1})\ _2$
0	0.5000000000000000	2.2000000000000000	1.87e-01	6.32e-02
1	0.4803549525148845	2.260066598359946	4.51e-03	2.27e-03
2	0.4825811382211886	2.259618040348963	4.01e-06	1.75e-06
3	0.4825819025667199	2.259619618799409	3.13e-12	1.59e-12
4	0.4825819025657873	2.259619618798127	3.33e-16	-

Zusammenfassung

Wie finden wir ein geeignetes iteratives Verfahren?

- ▶ skalare Gleichungen
- ▶ Gleichungssysteme: Newton-Verfahren

N5.9

Unter welchen Bedingungen konvergiert das Verfahren?

- ▶ Banachscher Fixpunktsatz

Wie schnell konvergiert das Verfahren?

- ▶ Konvergenzordnung: $1 \leq p \leq 2$ abh. vom Verfahren

N5.9

Ist die gewünschte Genauigkeit erreicht?

- ▶ A-priori und a-posteriori Fehlerabschätzung, wobei
a-posteriori Schranke < a-priori Schranke