IV. Das Newton Verfahren

<u>Ziele:</u> - nichtlineare Gleichungen numerisch lösen
- einsehen, dass es schwierig sein kann

<u>Wozu:</u> - in der Praxis auftretende nichtlineare Gleichungen sind i.A. nicht analytisch lösbar

- Implizite RK-Verfahren für steife Probleme ($\rightsquigarrow$ Kap. V)

IV.1 Skalare nichtlineare Gleichungen

<u>Problem:</u> Löse $f(x) = 0$ für $f: D = [a,b] \to \mathbb{R}$

$\rightsquigarrow$ Iterative Verfahren

$$x^{(0)} \longrightarrow x^{(1)} \longrightarrow x^{(2)} \longrightarrow \cdots \longrightarrow x^* = \lim_{k\to\infty} x^{(k)}$$

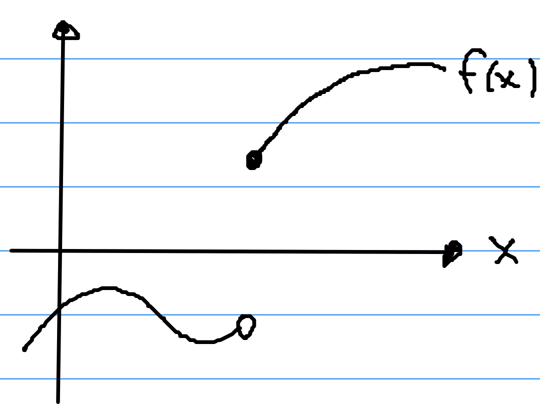
Startwert

Algorithmus

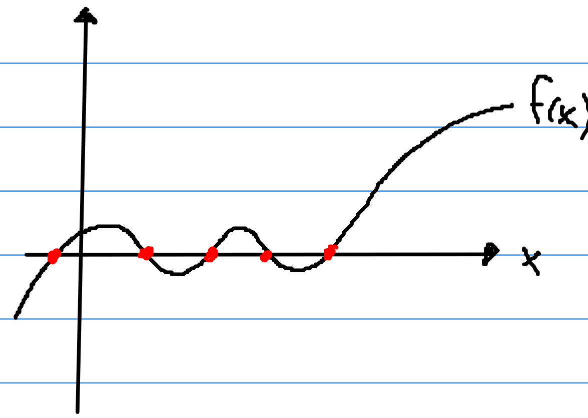
mit

$f(x^*) = 0$

Bem.: I.A. weder Existenz noch Eindeutigkeit



f nicht stetig



mehrere Lösungen

Im folgenden nehmen wir an, dass f ist stetig.

IV.1.1 Fixpunktiterationen und Grundlagen

Das Problem $f(x) = 0$ kann umgeschrieben werden zu einen sogenanten Fixpunktproblem (FPP)

$$x = \phi(x).$$

ϕ heisst Fixpunktfunktion und ein x^* welches das FPP löst, d.h. $x^* = \phi(x^*)$, heisst Fixpunkt (FP).

Ein FPP nennt man konsistent mit dem Nullstellenproblem falls gilt:

$$f(x^*) = 0 \iff x^* = \phi(x^*)$$

Def.: Ein Verfahren der Form

$$x^{(k+1)} = \phi(x^{(k)}), \quad k = 0, 1, 2, \ldots$$

heisst fixpunktiteration (FPI).

Bsp.: (1) Löse $f(x) = x \cdot e^x - 1 = 0$

(i) $x \cdot e^x - 1 = 0$

$$x \cdot e^x = 1$$

$$x = e^{-x} = \phi_1(x) \quad \text{FPP}$$

(konsistent ✓.)

(ii) $x = \phi_2(x)$ mit $\phi_2(x) = \dfrac{x^2 \cdot e^x + 1}{e^x (1+x)}$

(iii) $x = \phi_3(x)$ mit $\phi_3(x) = x + 1 - x \cdot e^x$

$\leadsto$ Slides

<u>Bem.:</u> (i) FPI nicht eindeutig

(ii) FPI können divergieren

(iii) Falls sie konvergieren, können sie dies verschieden schnell

Um die Geschwindigkeit der Konvergenz zu charakterisieren, definieren wir

<u>Def.:</u> Eine konvergente Folge $x^{(k)}$ mit Grenzwert x^* hat die <u>Konvergenzordnung</u> p, falls es eine Konstante C gibt mit

$$|x^{(k+1)} - x^*| \leq C \cdot |x^{(k)} - x^*|^p$$

für alle genügend grosse k.

Die Konstante C nennt man <u>Konvergenzrate</u>.

Für $p = 1$ muss $0 < C < 1$.

Insbesondere, Konvergenzordnung $p = \begin{Bmatrix} 1 \\ 2 \end{Bmatrix}$ nennt man $\begin{Bmatrix} \text{linear} \\ \text{quadratisch} \end{Bmatrix}$.

08.05.17

Bem.: für hinreichende Bedingungen zur Konvergenz einer FPI gibt es den Banach'schen Fixpunktsatz (⇝ Analysis, Numerik Bücher) (Leider oft in der Praxis nicht direkt anwendbar...)

Häufig ist es hilfreich, z.B. um ein Programm zu verifizieren, die Konstanten C und p in numerischen Experimenten zu messen.
Dazu definiert man den Fehler in der k-ten Iteration

$$\varepsilon^{(k)} = | x^{(k)} - x^* |$$

Dann können wir schreiben

$$\varepsilon^{(k)} = C \cdot \left(\varepsilon^{(k-1)}\right)^p$$
$$\varepsilon^{(k+1)} = C \cdot \left(\varepsilon^{(k)}\right)^p$$

(log nehmen ...)

Dies kann man einfach für C & p lösen zu

$$p = \frac{\log(\varepsilon^{(k+1)}) - \log(\varepsilon^{(k)})}{\log(\varepsilon^{(k)}) - \log(\varepsilon^{(k-1)})}$$

$$C = \frac{\varepsilon^{(k+1)}}{(\varepsilon^{(k)})^p} = \frac{\varepsilon^{(k)}}{(\varepsilon^{(k-1)})^p}$$

Bsp.: (2) C & p für Bsp. (1) $\rightsquigarrow$ Slides

Problem: Wie $\varepsilon^{(k)} = |x^{(k)} - x^*|$ berechnen?

?

Dies bringt uns zur praktischen Frage:

Wann bricht man die Iteration ab?

Mögliche Abbruchkriterien (ABK):

(i) $|x^{(k)} - x^{(k-1)}| \leq \text{atol}$ (ABK1)

(ii) $|x^{(k)} - x^{(k-1)}| \leq \text{rtol} \cdot |x^{(k)}|$ (ABK2)

(iii) $|x^{(k)} - x^{(k-1)}| \leq \text{atol} + \text{rtol} \cdot |x^{(k)}|$ (ABK3)

(iv) $|f(x^{(k)})| \leq \text{ftol}$ (ABK4)

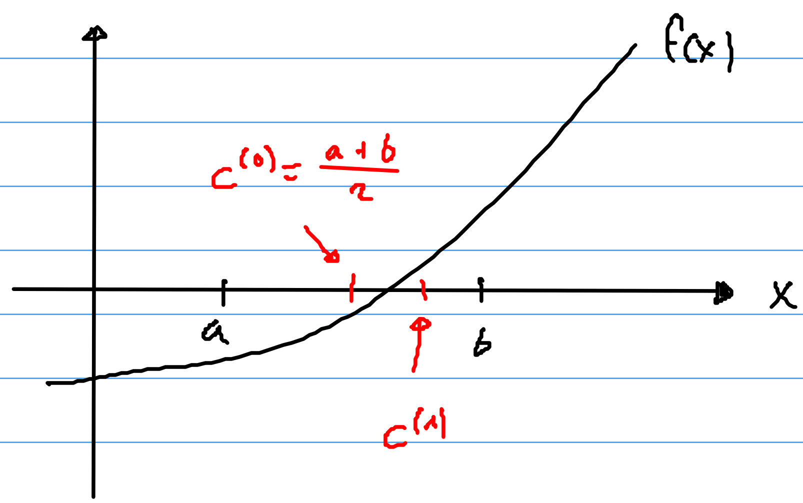
IV.1.2 Bisektions-Verfahren

Annahme: Wir kennen a und b mit

$$f(a) < 0 \quad \text{und} \quad f(b)$$

D.h. Nullstelle ist eingeschlossen!

Idee: Halbiere das Intervall $[a, b]$ und behalte die Hälfte welche auch obige Annahme erfüllt ...



Bem.: (i) Sehr einfach und robust (benötigt nur f)

(ii) A priori Fehlerschätzer $\varepsilon^{(k)} = \dfrac{b-a}{2^{k+1}}$

(iii) Langsame Konvergenz (linear)

(iv) Nicht direkt anwendbar auf Systeme

IV.1.3 Newton-Verfahren

Idee: Linearisiere f

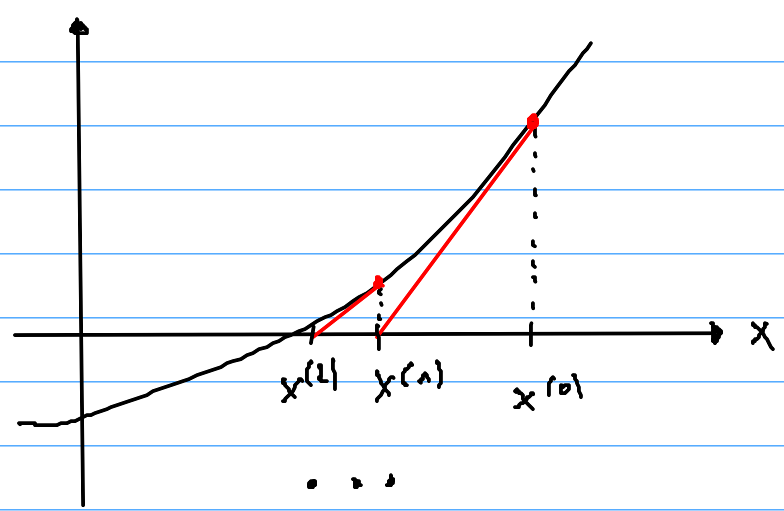
Taylor-Entwicklung von f an der k-ten Iteration $x^{(k)}$:

$$f(x) = \underbrace{f(x^{(k)}) + f'(x^{(k)})\cdot(x - x^{(k)})}_{\tilde{f}(x) \overset{!}{=} 0 \rightsquigarrow x^{(k+1)}} + \dots$$

$$\rightsquigarrow \tilde{f}(x^{(k+1)}) = f(x^{(k)}) + f'(x^{(k)})\cdot(x^{(k+1)} - x^{(k)}) \overset{!}{=} 0$$

$$\rightsquigarrow \quad x^{(k+1)} = x^{(k)} - \frac{f(x^{(k)})}{f'(x^{(k)})}$$

Graphisch:



<u>Bem.:</u> (i) Benötigt f'

(ii) Quadratische Konvergenz $(p=2)$ wenn nahe genug (an einer Nullstelle)

(iii) Kann schief gehen (Wann?)

(iv) Verallgemeinerung für Systeme

IV.2 Nichtlineare Gleichungssysteme

Problem: Geg. reelle vektorwertige Funktion $f: D \subset \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$, löse

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

Kurz-Schreibweise für

$$\left.\begin{aligned} f_1(x_1, \dots, x_n) &= 0 \\ f_2(x_1, \dots, x_n) &= 0 \\ &\vdots \\ f_n(x_1, \dots, x_n) &= 0 \end{aligned}\right\} \quad \vec{f}(\vec{x}) = 0$$

Bsp.: (3) $n = 2$, $D = [0,2]^2 \subset \mathbb{R}^2$

$$f_1(x_1, x_2) = x_1^2 + x_2 - 2 = 0$$
$$f_2(x_1, x_2) = x_2 \cdot e^{x_1} - 2 = 0$$

$\rightsquigarrow$ Höhenlinien (Slides)

Die FPI verallgemeinert sich auf

$$\vec{x}^{(k+1)} = \vec{\phi}(\vec{x}^{(k)})$$

IV.2.1 Das Newton Verfahren

Idee: Linearisiere $\vec{f}$

Taylor-Entwicklung von $\vec{f}$ an der k-ten Iteration

Jacobi-Matrix $D\vec{f}(\vec{x}) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_n}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f_n}{\partial x_n} \end{pmatrix}(\vec{x})$

$$\vec{f}(\vec{x}) = \underbrace{\vec{f}(\vec{x}^{(k)}) + D\vec{f}(\vec{x}^{(k)})(\vec{x} - \vec{x}^{(k)})} + \dots$$

$$\tilde{\vec{f}} = \vec{f}(\vec{x}^{(k)}) + D\vec{f}(\vec{x}^{(k)})(\vec{x} - \vec{x}^{(k)}) \overset{!}{=} 0$$

$$\rightsquigarrow \quad \vec{x}^{(k+1)} = \vec{x}^{(k)} - D\vec{f}(\vec{x}^{(k)})^{-1}\, \vec{f}(\vec{x}^{(k)})$$

Inverse der Jacobi-Matrix

Inverse NIE explizit berechnen!!! $\rightsquigarrow$ Übungen

Bsp.: (4) Newton's Verfahren auf Bsp. (3)

$\leadsto$ Slides

Bem.: (i) Benötigt Jacobi-Matrix

(ii) Quadratische Konvergenz ($p=2$) wenn nahe genug (an einer Nullstelle)

(iii) Kann schief gehen (Wann?)