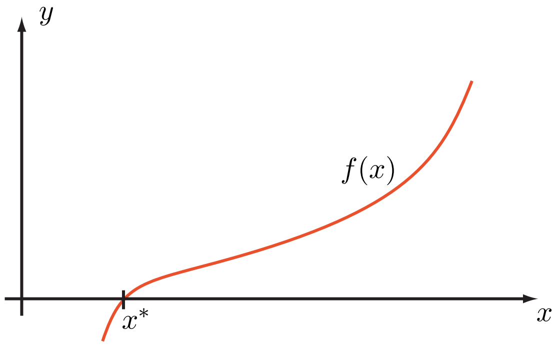
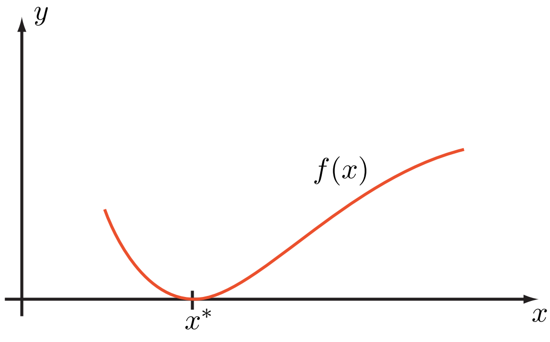
3 Nichtlineare Gleichungssysteme

3.1 Eine Gleichung in einer Unbekannten

Problemstellung: Gegeben sei die stetige Funktion $f(x)$. Gesucht ist die Lösung der Gleichung $f(x) = 0$.



a) $f'(x^*) \neq 0$



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

Für $|f'(x^*)| \ll 1$ ist das Problem schlecht konditioniert:

$$x^* = f^{-1}(0) =: H(0) \, ,$$

$$\kappa_H = \left| \frac{H'(0)}{H(0)} \right| = \left| \frac{1}{x^* \cdot f'(x^*)} \right| \; ; \tag{10}$$

denn aus

$$f^{-1}(f(z)) = z \quad | \cdot \frac{d}{dz}$$

folgt

$$(f^{-1})'(f(z)) \cdot f'(z) = 1 \, ,$$

und mit $z = x'$, $f'(x^*) \neq 0$ folgt

$$(f^{-1})'(0) = \frac{1}{f'(x^*)} = H'(0) \, .$$

Bemerkung: Man sieht aus (10), dass der Fall b) schwierig zu lösen ist. Wir betrachten im Folgenden den Fall a) und suchen dafür gute Algorithmen.

Das Newton-Verfahren

Sei $f(x)$ differenzierbar und sei eine Näherung x_0 an eine Nullstelle x^* von f gegeben.

Idee: Ersetze den Graphen von f durch die Tangente t im Punkt $P = (x_0, f(x_0))$.

Gleichung von t:

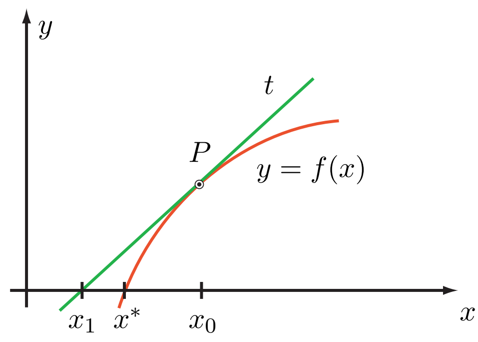
$$y = f'(x_0)(x - x_0) + f(x_0)$$

Nullstelle von t:

$$x_1 = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)} =: F(x_0) \text{ (für } f'(x_0) \neq 0)$$

Iteration:

$$x_{k+1} = F(x_k), \quad k = 0, 1, \ldots \tag{11}$$

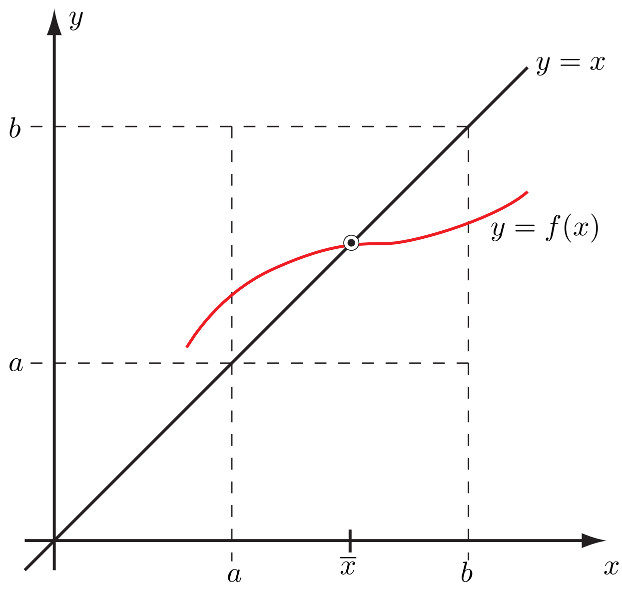


d.h. ersetze das nichtlineare Problem durch eine (unendliche) Folge von linearen Problemen. Falls die Folge der Iterierten x_k für $k \to \infty$ gegen $\overline{x}$ konvergiert, so ist $\overline{x}$ eine Lösung der sogenannten Fixpunktgleichung

$$x = F(x) \tag{12}$$

und es gilt $f(\overline{x}) = 0$.

Wir untersuchen zuerst die Existenz einer Lösung von (12) für ein beliebiges F (d.h. nicht nur für das F des Newton-Verfahrens):



Es gilt: Falls $F(x)$ stetig ist auf dem Intervall $I := [a, b]$ und falls F das Intervall I in sich abbildet, dann hat (12) mindestens eine Lösung.

Die Eindeutigkeit der Lösung wird im folgenden Satz behandelt.

Satz: (Fixpunktsatz)
Voraussetzung:

i) F bildet das Intervall $[a, b]$ in sich ab.

ii) F ist eine Kontraktion, d.h. es existiert eine positive Konstante $L < 1$, so dass

$$\left|F(x') - F(x'')\right| \leq L \left|x' - x''\right| \text{ für alle } x', x'' \in [a, b] \ .$$

Behauptung:

1. *Die Fixpunktgleichung (12) hat genau eine Lösung $\overline{x} \in [a, b]$.*

2. *Die Iteration (11) konvergiert für ein beliebiges $x_0 \in [a, b]$ gegen die Lösung $\overline{x}$ von (12).*

3. *Es gilt die Abschätzung*

$$|x_k - \overline{x}| \leq \frac{L^{k-j}}{1-L} |x_{j+1} - x_j| \ , \quad 0 \leq j \leq k-1 \ .$$

Bemerkung: Die Konstante L heisst *Lipschitz-Konstante.* Die Voraussetzung ii) ist erfüllt, falls $|F'(x)| \leq L < 1$ für alle $x \in [a, b]$.

Beweis des Fixpunktsatzes:

1. $F(x)$ ist Lipschitz-stetig, also stetig. Daraus folgt, dass $g(x) := F(x) - x$ stetig ist.

   Da $F(a) \geq a$ und $F(b) \leq b$, gilt $g(a) \geq 0$ und $g(b) \leq 0$; daraus folgt mit dem Zwischenwertsatz, dass ein $x^* \in [a, b]$ existiert mit $g(x^*) = 0$; d.h. es existiert mindestens ein Fixpunkt.

   Wir nehmen an, es gäbe ein x^{**} mit $F(x^{**}) = x^{**}$ und $x^* \neq x^{**}$. Dann gilt

   $$|x^* - x^{**}| = |F(x^*) - F(x^{**})| \leq L\,|x^* - x^{**}| < |x^* - x^{**}| \ .$$

   Dies ist ein Widerspruch, und wir haben damit bewiesen, dass genau ein Fixpunkt existiert.

2. Mit $x_0 \in [a, b]$ folgt $x_k = F(x_{k-1}) \in [a, b], \ k = 1, 2, \ldots$ Es gilt

   $$\begin{aligned} |x^* - x_k| &= |F(x^*) - F(x_{k-1})| \leq L\,|x^* - x_{k-1}| \\ &\leq L^2 \cdot |x^* - x_{k-2}| \leq \ldots \leq L^k |x^* - x_0| \ . \end{aligned}$$

   Da $L < 1$ folgt dass $L^k \to 0, \ k \to \infty$.

3. Aus der Abschätzung

$$|x_{k+1} - x_k| \quad = \quad |F(x_k) - F(x_{k-1})| \leq L|x_k - x_{k-1}| \leq \ldots \leq L^k |x_1 - x_0|$$

folgt

$$\begin{aligned} |x_{k+\ell} - x_k| &\leq \sum_{i=1}^{\ell} |x_{k+i} - x_{k+i-1}| \leq \sum_{i=1}^{\ell} L^{k+i-1} |x_1 - x_0| \\ &\leq L^k |x_1 - x_0| \sum_{i=1}^{\ell} L^{i-1} \end{aligned}$$

Da $\sum_{i=1}^{\ell} L^{i-1} \leq \frac{1-L^\ell}{1-L}$ (geometrische Reihe), erhalten wir daraus dass

$$|x_{k+\ell} - x_k| \leq \frac{L^{k-j}}{1-L} \left(\frac{1-L^\ell}{1-L} \right) |x_{j+1} - x_j| \; , \quad 0 \leq j < k \; ,$$

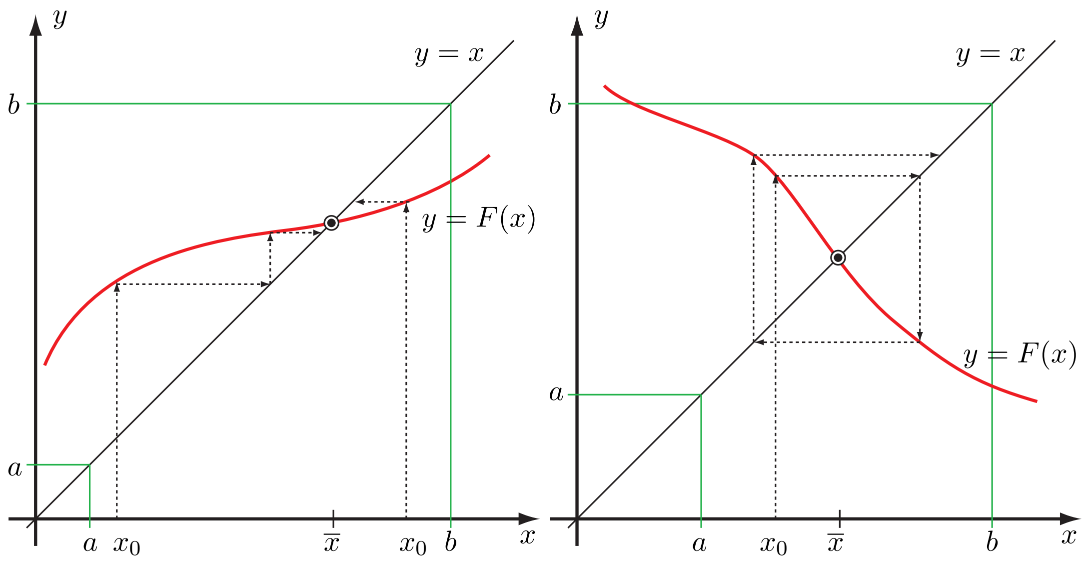
und damit für $\ell \to \infty$ die Behauptung. □

Bemerkung: Die Aussage 3. im Satz für $j = 0$ heisst *a-priori-Abschätzung*

$$|\overline{x} - x_k| \leq \frac{L^k}{1-L} |x_1 - x_0| \; ,$$

und diejenige für $j = k - 1$ heisst *a-posteriori-Abschätzung*

$$|\overline{x} - x_k| \leq \frac{L}{1-L} |x_k - x_{k-1}| \; .$$



anziehender Fixpunkt — abstossender Fixpunkt

Wir kommen zurück zum *Newton-Verfahren*, d.h. zum speziellen F des Newton-Verfahrens.

Folgerung: Für x_0 genügend nahe bei der Nullstelle x^* konvergiert das Newton-Verfahren gegen x^*, falls $f'(x) \neq 0$ ist.

Beweis: Für das Newton-Verfahren gilt:

$$\begin{aligned} F(x) &= x - \frac{f(x)}{f'(x)} \\ F'(x) &= 1 - \frac{f'(x)}{f'(x)} + \frac{f(x)}{f'(x)^2} f''(x) = \frac{f(x)}{f'(x)^2} f''(x) \; . \end{aligned}$$

Das heisst, dass für a, b mit $[a, b] \ni x^*$ und $|b - a|$ klein genug die Voraussetzungen i), ii) des Fixpunktsatzes erfüllt sind. □

Bemerkung: Da $F'(x^*) = 0$, konvergiert das Newton-Verfahren *schnell.*

Wir wollen die *Konvergenz des Newton-Verfahrens* genauer anschauen. Sei $e_k := x_k - x^*$ der Fehler der k-ten Iterierten.

Definition: Falls

$$e_{k+1} \cong C \cdot [e_k]^p$$

heisst p die *Konvergenzordnung* des Iterations-Verfahrens.

Für das Newtonverfahren **gilt:**

$$e_{j+1} \cong \frac{f''(x^*)}{2f'(x^*)} {e_j}^2$$

d.h. für $f'(x^*) \neq 0$ konvergiert es mindestens *quadratisch*: bei jedem Schritt wird die Anzahl richtiger Stellen ungefähr verdoppelt.

Beweis: Die Taylorentwicklung von $f(x)$ um x_k ergibt für $x = x^*$

$$0 = f(x^*) = f(x_k + (x^* - x_k)) = f(x_k) + f'(x_k)(x^* - x_k) + \frac{f''(\xi)}{2!}(x^* - x_k)^2 \; .$$

Ausserdem gilt nach dem Newton-Verfahren, dass $0 = f(x_k) + f'(x_k)(x_{k+1} - x_k)$. Subtrahiert man die erste Gleichung von der zweiten, so erhält man

$$x_{k+1} - x^* = \frac{f''(\xi)}{2f'(x_k)}(x^* - x_k)^2 \; .$$

□

Algorithmus: (Newton Verfahren)

$$x_0;\ RTOL,\ ATOL$$

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

Abbruchkriterium:

$$|x_{k+1} - x_k| \leq |x_{k+1}| \cdot RTOL + ATOL$$

Beispiel: $f(x) = \sin x$

$$\begin{aligned} x_0 &= 4 \\ x_1 &= 2.842178718 \\ x_2 &= \underline{3.1}50872940 \\ x_3 &= \underline{3.141592}387 \\ x_4 &= \underline{3.141592654} \end{aligned}$$

Unterstrichen sind die jeweils korrekten Stellen.

Nachteile des Newton-Verfahrens:

- lokales Verfahren
- die Ableitung $f'(x)$ muss bekannt sein

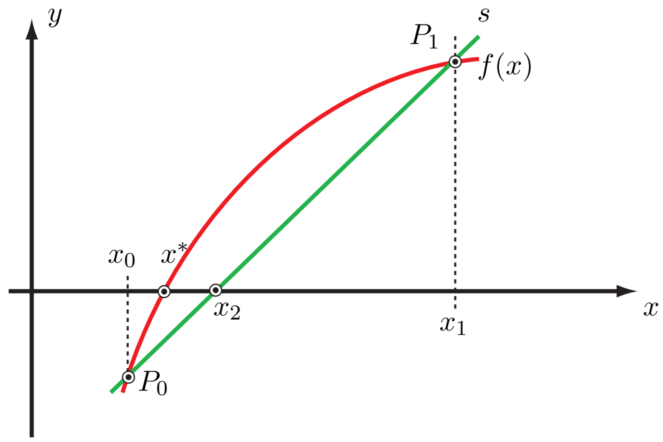
Vorteil:

- schnelle Konvergenz

Bemerkung: Die Fixpunktiteration (12) ist auch ein Verfahren zum Bestimmen der Lösung von $f(x) = 0$ (z.B. $F(x) = x - f(x)$, falls $|F'(x^*)| < 1$). Die Konvergenzordnung ist aber nur 1 (lineare Konvergenz), da $|x_k - x^*| = |F(x_{k-1}) - F(x^*)| \leq L|x_{k-1} - x^*|$.

Die Sekantenmethode

Seien zwei Näherungen x_0, x_1 für eine Nullstelle x^* von f gegeben.
Idee: Ersetze die Tangente t durch die Sekante s durch die Punkte $P_0 = (x_0, f(x_0))$ und $P_1 = (x_1, f(x_1))$.



Gleichung von s:

$$y = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}(x - x_1) + f(x_1)$$

Nullstelle von s:

$$x_2 = x_1 - \frac{x_1 - x_0}{f(x_1) - f(x_0)} f(x_1) = \frac{x_0 f(x_1) - x_1 f(x_0)}{f(x_1) - f(x_0)}$$

Algorithmus: (Sekantenmethode)

$$x_0,\ x_1;\ RTOL,\ ATOL$$

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

Abbruchkriterium:

$$|x_{k+1} - x_k| \le |x_{k+1}| \cdot RTOL + ATOL$$

Beispiel: $f(x) = \sin x$

$$\begin{array}{lcl} x_0 & = & 2 \\ x_1 & = & 4 \\ x_2 & = & \underline{3.}091528083 \\ x_3 & = & \underline{3.14}7874957 \\ x_4 & = & \underline{3.14159}0358 \\ x_5 & = & \underline{3.141592654} = x_6 \end{array}$$

Es gilt: Für x_0, x_1 genügend nahe bei x^* konvergiert die Sekantenmethode, und zwar mit Konvergenzordnung $\cong 1.6$, falls $f'(x^*) \neq 0$.

Nachteile der Sekantenmethode:

- lokales Verfahren
- nicht ganz so schnelle Konvergenz wie beim Newton-Verfahren

Vorteil:

- weniger aufwendig als das Newton-Verfahren

Das Bisektionsverfahren

Sei $f(x)$ stetig im Intervall $I = [a, b]$ und $f(a) \cdot f(b) < 0$. Aus dem Zwischenwertsatz folgt, dass $f(x)$ in I mindestens eine Nullstelle besitzt. *Ziel:* Einschachtelung einer solchen Nullstelle.

Algorithmus: (Bisektionsverfahren)

$$a_o,\ b_0;\ x_0 := \frac{[a_0 + b_0]}{2};\ RTOL,\ ATOL$$

Für $k = 0, 1, 2, \ldots$

i) Falls $f(x_k) = 0$, ist x_k Nullstelle: Abbruch!

ii) Falls $f(a_k) \cdot f(x_k) < 0$, definiere

$$a_{k+1} = a_k,\ b_{k+1} = x_k\ ,$$

sonst definiere

$$a_{k+1} = x_k,\ b_{k+1} = b_k\ ;$$

setze

$$x_{k+1} = \frac{[a_{k+1} + b_{k+1}]}{2}\ .$$

Abbruchkriterium:

$$|x_{k+1} - x_k| \leq |x_{k+1}|\, RTOL + ATOL$$

Das Bisektionsverfahren ergibt eine Folge von Intervallen $I_k = [a_k, b_k]$ mit $I_0 \supset I_1 \supset I_2 \supset \ldots$, wobei **gilt**:

- die Länge von $I_{k+1} = \frac{1}{2} \cdot$ Länge von I_k
- allen Intervallen gemeinsam ist genau ein x^*
- x^* ist eine Nullstelle von f

Folgerung:

$$|x_k - x^*| \le \frac{1}{2^{k+1}}(b_0 - a_0) \ .$$

Beispiel: $f(x) = \sin x$; $a_0 = 2$, $b_0 = 4$

$$\begin{array}{lll@{\qquad}lll}
x_0 & = & \underline{3} & x_8 & = & \underline{3.14}453124 \\
x_1 & = & \underline{3}.5 & x_9 & = & \underline{3.14}2578125 \\
x_2 & = & \underline{3}.25 & x_{10} & = & \underline{3.141}601563 \\
x_3 & = & \underline{3.1}25 & x_{11} & = & \underline{3.141}113282 \\
x_4 & = & \underline{3.1}875 & x_{12} & = & \underline{3.141}357423 \\
x_5 & = & \underline{3.1}5625 & x_{13} & = & \underline{3.141}479493 \\
x_6 & = & \underline{3.14}0625 & x_{14} & = & \underline{3.1415}40528 \\
x_7 & = & \underline{3.14}84375 & & &
\end{array}$$

$$|x_{14} - x^*| \cong 5.2126 \cdot 10^{-5} < \frac{1}{2^{15}} \cdot 2 \cong 6.1 \cdot 10^{-5}$$

Es gilt: Das Bisektionsverfahren konvergiert immer für $f'(x^*) \neq 0$, aber nur linear, d.h. für grosse j ist

$$e_{j+1} \cong q \cdot e_j, \ |q| < 1 \ ;$$

die Konvergenzordnung ist also 1.

Vorteil des Bisektionsverfahrens:

- globales Verfahren

Nachteil:

- langsame Konvergenz

Kombination von Bisektion mit lokalem Verfahren

Zuerst Bisektion, dann Newton-Verfahren oder Sekantenmethode.

Bemerkungen:

- Die Konvergenz eines solchen kombinierten Verfahrens ist allerdings nicht garantiert.
- Ein solches Verfahren kann aber robust implementiert werden, d.h. es liefert eine Nullstelle von f oder führt zu einem wohl definierten Abbruch.

3.2 Nichtlineare Gleichungssysteme

Gegeben sei $f(x) = 0$ mit

$$x = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^n, \; f(x) = \begin{pmatrix} f_1(x_1, \ldots, x_n) \\ \vdots \\ f_n(x_1, \ldots, x_n) \end{pmatrix} .$$

Die *Jacobi-Matrix* ist wie folgt definiert:

$$J(x) = \frac{\partial f}{\partial x} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \vdots & & & \\ \frac{\partial f_n}{\partial x_1} & \frac{\partial f_n}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_n}{\partial x_n} \end{pmatrix} .$$

Analog zum eindimensionalen Fall linearisieren wir $f(x)$ an der Stelle x^0:

$$f(x) = f(x^0 + (x - x^0)) \cong f(x^0) + J(x^0)(x - x^0) =: f_L(x) .$$

Nullstelle von f_L:

$$x^1 = x^0 - J(x^0)^{-1} f(x^0) .$$

Das Newton-Verfahren

Fixpunkt-Iteration mit $F(x) = x - J(x)^{-1} f(x)$:

$$x^{k+1} = F(x^k), \; k = 0, 1, \ldots$$

Falls $x = x^*$ die Fixpunktgleichung erfüllt: $x^* = F(x^*)$, folgt x^* ist eine Nullstelle von $f: \; f(x^*) = 0$; und es gilt $F'(x^*) = 0$, denn

$$J\,F = J\,x - f \text{ impiziert für } x = x^* : \; J' \underbrace{F}_{=x^*} + JF' = J'x^* + J - J$$

und daraus folgt

$$F'(x^*) = 0, \text{ falls } \det\, J \neq 0 .$$

Es gilt: Das Newton-Verfahren ist immer lokal konvergent (falls $\det(J(x^*)) \neq 0$); es konvergiert quadratisch. Die lokale Konvergenz folgt aus dem Banachschen Fixpunktsatz.

Satz: (Banachscher Fixpunktsatz)
Voraussetzung:

i) F bildet ein abgeschlossenes Gebiet $D \subset \mathbb{R}^n$ in sich ab.

ii) F ist eine Kontraktion, d.h. es existiert eine positive Konstante $L < 1$ und eine Norm $||.||$, so dass für alle $x^a, x^b \in D$ gilt:

$$\|F(x^a) - F(x^b)\| \leq L \, \|x^a - x^b\| \, .$$

Behauptung:

1. Es existiert genau ein Fixpunkt $x^* \in D$.
2. Die Iteration $x^{k+1} = F(x^k), \; k = 0, 1, 2, \ldots$, konvergiert für alle Startwerte $x^0 \in D$ gegen x^*.
3. Es gelten die Abschätzungen

$$\|x^k - x^*\| \leq \frac{L^k}{1-L} \|x^1 - x^0\| \text{ (a priori)}$$
$$\|x^k - x^*\| \leq \frac{L}{1-L} \|x^k - x^{k-1}\| \text{ (a posteriori)}$$

Bemerkung: Eine hinreichende Bedingung dafür, dass F eine Kontraktion in D darstellt, ist $||F'(x)|| \leq L < 1$ für alle $x \in D$.

Algorithmus: (Newton-Verfahren)

$$x_0; \; TOL$$

Für $k = 0, 1, \ldots$ löse das lineare Gleichungssystem

$$J(x^k)\Delta^k = -f(x^k)$$

nach Δ^k auf (LR-Zerlegung);
definiere

$$x^{k+1} := x^k - \Delta^k$$

Abbruchkriterium:

$$\|\Delta^k\| \leq \|x^{k+1}\| \, TOL + TOL$$

Probleme des Newton-Verfahrens:

- Finden eines guten Startvektors x^0.
- Berechnen der Jacobi-Matrix J in jedem Schritt (Differenzenquotienten, numerisches Differenzieren).

Beispiel:

$$\begin{array}{rcrcrcl} x_1 & + & 2x_2 & - & 3 & = & 0 \\ 4x_1 & + & {x_2}^2 & - & 5 & = & 0 \end{array}$$

Man erhält

$$J = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 4 & 2x_2 \end{pmatrix}, \ \det J = 2x_2 - 8 \neq 0 \text{ für } x_2 \neq 4 \ .$$

Wähle

$$x_0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} ;$$

das lineare Gleichungssystem

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 4 & 0 \end{pmatrix} \Delta^0 = \begin{pmatrix} 3 \\ 5 \end{pmatrix} \text{ besitzt die Lösung } \Delta^0 = \begin{pmatrix} \frac{5}{4} \\ \frac{7}{8} \end{pmatrix} ;$$

dies ergibt

$$x^1 = \Delta^0;$$

im nächsten Schritt erhält man

$$\Delta^1 = \begin{pmatrix} -\frac{49}{200} \\ \frac{49}{200} \end{pmatrix}, \ x^2 = \begin{pmatrix} 1.005 \\ 0.9975 \end{pmatrix} ;$$

usw.
Es ist leicht einzusehen, dass x^k gegen

$$x^* = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

strebt.
Es existiert eine zweite Lösung $x^* = \binom{-11}{7}$; man erhält sie beispielsweise mit $x^0 = \binom{50}{50}$.

Bemerkungen:

- Der Aufwand des Newton-Verfahrens pro Schritt ist gross, nämlich $O(\frac{n^3}{3})$.
- Eine mögliche Verbesserung stellt das *Quasi-Newton-Verfahren* dar, bei dem man in jedem Schritt die gleiche Jacobi-Matrix $J = J(x^0)$ nimmt:
  - $1\times$ Erstellen von J
  - $1\times$ LR-Zerlegung
  - Aufwand pro Schritt $O(n^2)$

  Nachteil: nur lineare Konvergenz.