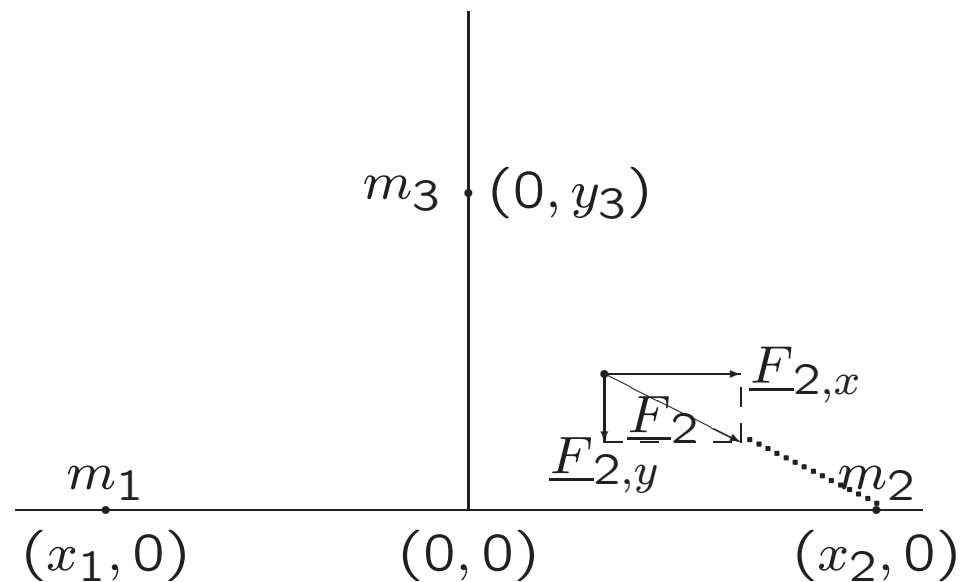


Beispiel 5.1. Gravitationskraft zwischen zwei Punktmassen m_1 und m_2 mit gegenseitigem Abstand r :

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

wobei $G = 6.67 \cdot 10^{-11} \text{Nm}^2/\text{kg}$. Gravitationsfeld wie in Abb.5.1:



Gesucht: (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.

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

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

Hieraus ergibt sich das System

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

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

△

Statt der *linearen* Integralgleichung im Beispiel 3.3 soll nun eine *nicht-lineare* Integralgleichung gelöst werden:

Gesucht ist eine Funktion $u(x) \geq 0$, die die Integralgleichung

$$u(x) + \int_0^1 \cos(xt)u(t)^3 dt = 2, \quad x \in [0, 1],$$

erfüllt. Das Problem wird, wie in Beispiel 3.3, auf dem Gitter

$$t_j = \left(j - \frac{1}{2}\right)h, \quad j = 1, \dots, n, \quad h = \frac{1}{n},$$

diskretisiert. Man erhält dann die Gleichungen (vgl.(3.15))

$$u_i + h \sum_{j=1}^n \cos(t_i t_j) u_j^3 - 2 = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n,$$

für die Unbekannten $u_i \approx u(t_i)$, $i = 1, \dots, n$.

△

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

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

Wir werden dies häufig kurz als

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

schreiben.

Der Spezialfall $n = 1$ wird oft als *skalare* Gleichung in *einer* Unbekannten bezeichnet.

5.2 Kondition des Nullstellenproblems einer skalaren Gleichung

Störungen in den Daten:

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

Sei \tilde{x}^* eine Nullstelle für die gestörte Funktion \tilde{f} :

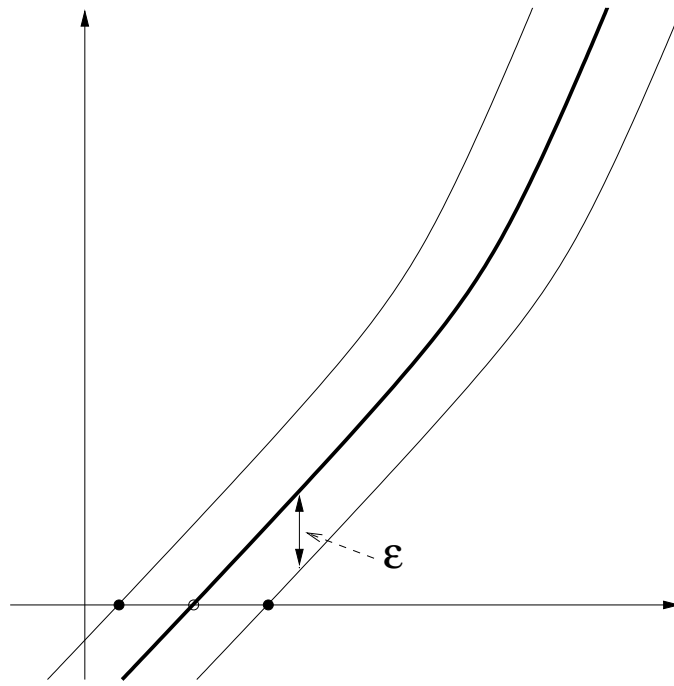
$$\tilde{f}(\tilde{x}^*) = 0.$$

Sei m die Vielfachheit der Nullstelle x^* :

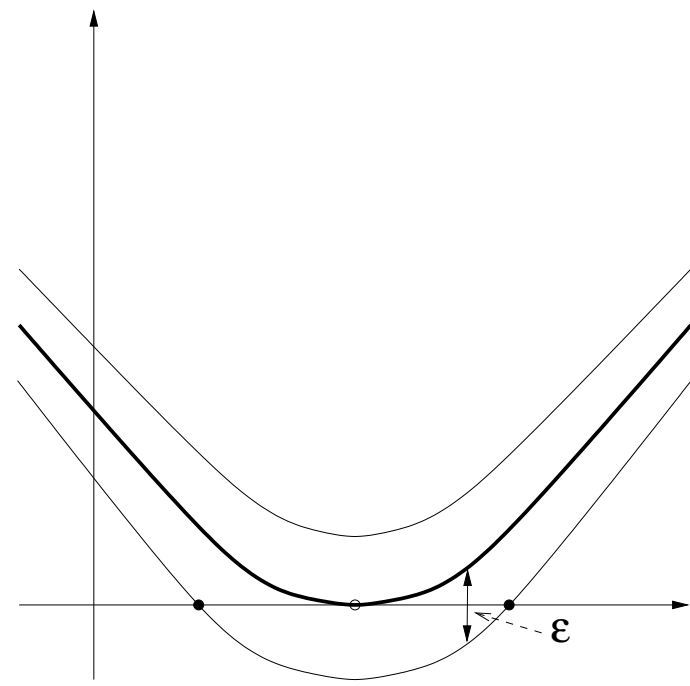
$$f(x^*) = 0, \quad f'(x^*) = 0, \quad \dots, \quad f^{(m-1)}(x^*) = 0, \quad f^{(m)}(x^*) \neq 0.$$

Es gilt:

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



einfache Nullstelle



mehrfache Nullstelle

Beispiel 5.4. $f(x) = (x - 1)^3$ hat eine dreifache Nullstelle $x^* = 1$.
 Die Nullstelle der gestörten Funktion $\tilde{f}(x) = (x - 1)^3 - \epsilon$ ist $\tilde{x}^* = 1 + \epsilon^{\frac{1}{3}}$.
 Also, z.B. für $\epsilon = 10^{-12}$:

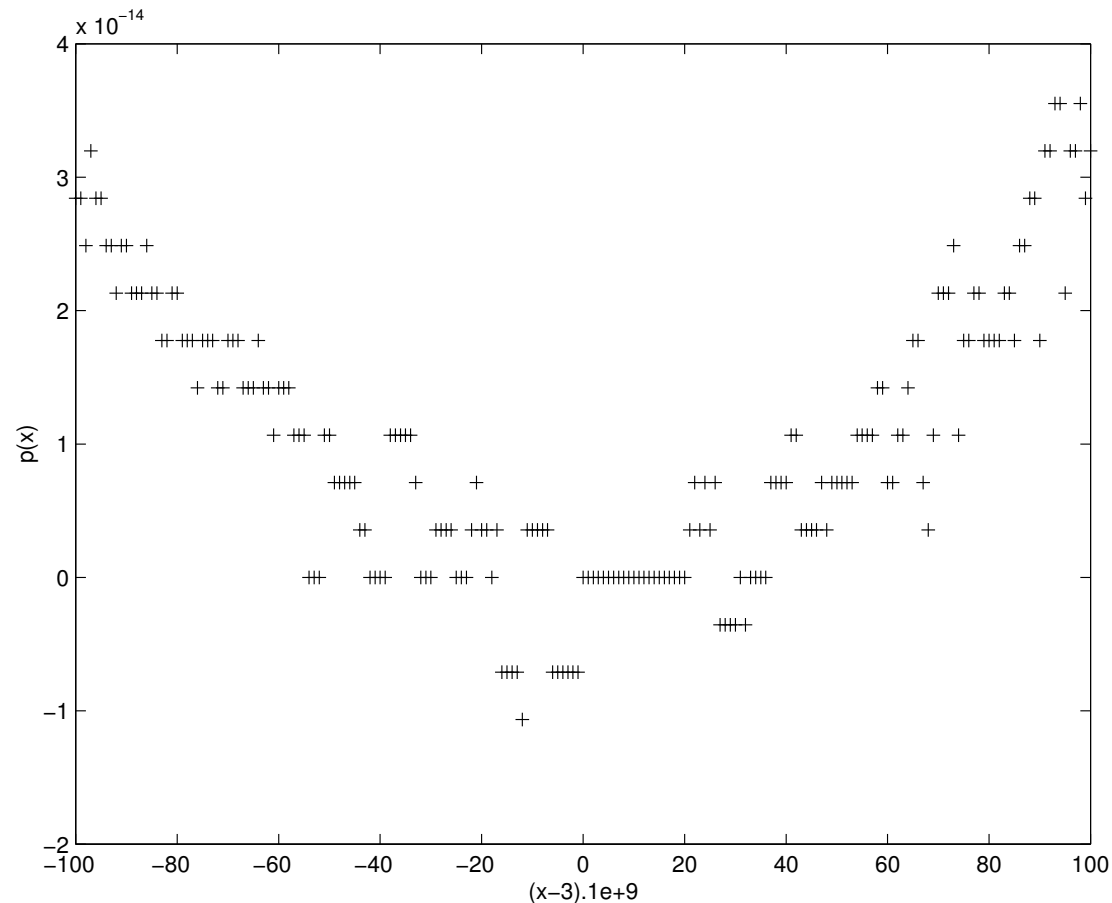
$$|f(x) - \tilde{f}(x)| = 10^{-12}, \quad |x^* - \tilde{x}^*| = 10^{-4}. \quad \triangle$$

Beispiel 5.5

Das Polynom $p(x) = x^3 - 6x^2 + 9x$ hat eine doppelte Nullstelle $x^* = 3$. Die Funktionswerte

$$p(3 + i * 10^{-9}), \quad i = -100, -99, \dots, 99, 100,$$

sind auf einer Maschine mit $\text{eps} \approx 10^{-16}$ berechnet. △



5.3 Fixpunktiteration

Bemerkung 5.6. Sei $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ gegeben und für jedes x in einer Umgebung der Nullstelle x^* sei die von x abhängige Matrix $M_x \in \mathbb{R}^{n \times n}$ invertierbar. Dann gilt

$$f(x^*) = 0 \quad \Longleftrightarrow \quad x^* = x^* - M_{x^*} f(x^*),$$

d.h., das *Nullstellenproblem* $f(x^*) = 0$ ist *äquivalent* zum *Fixpunktproblem*

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

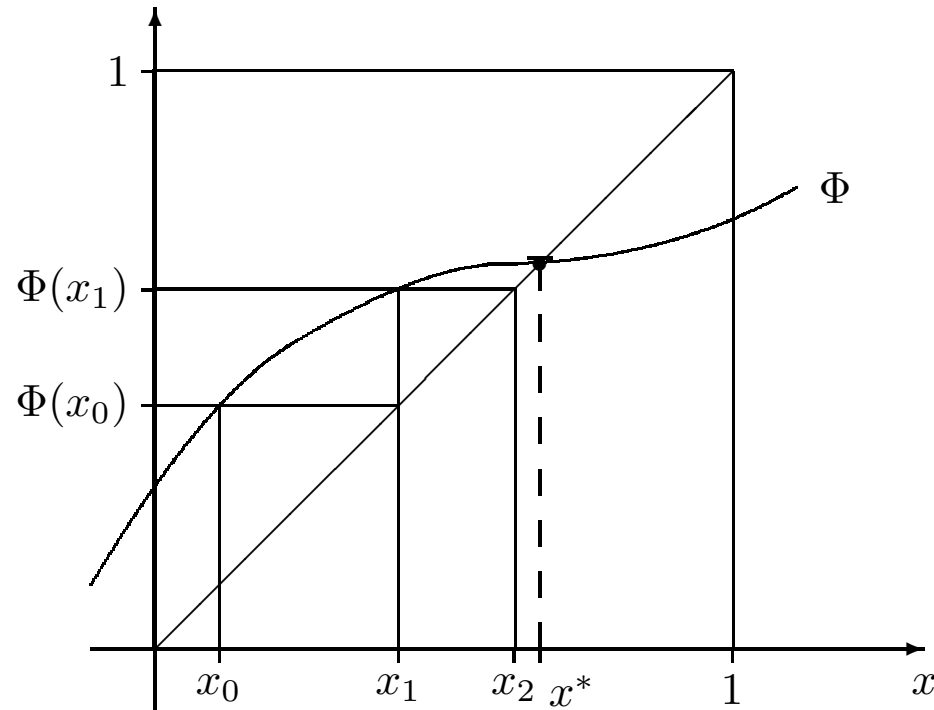
Beweis:

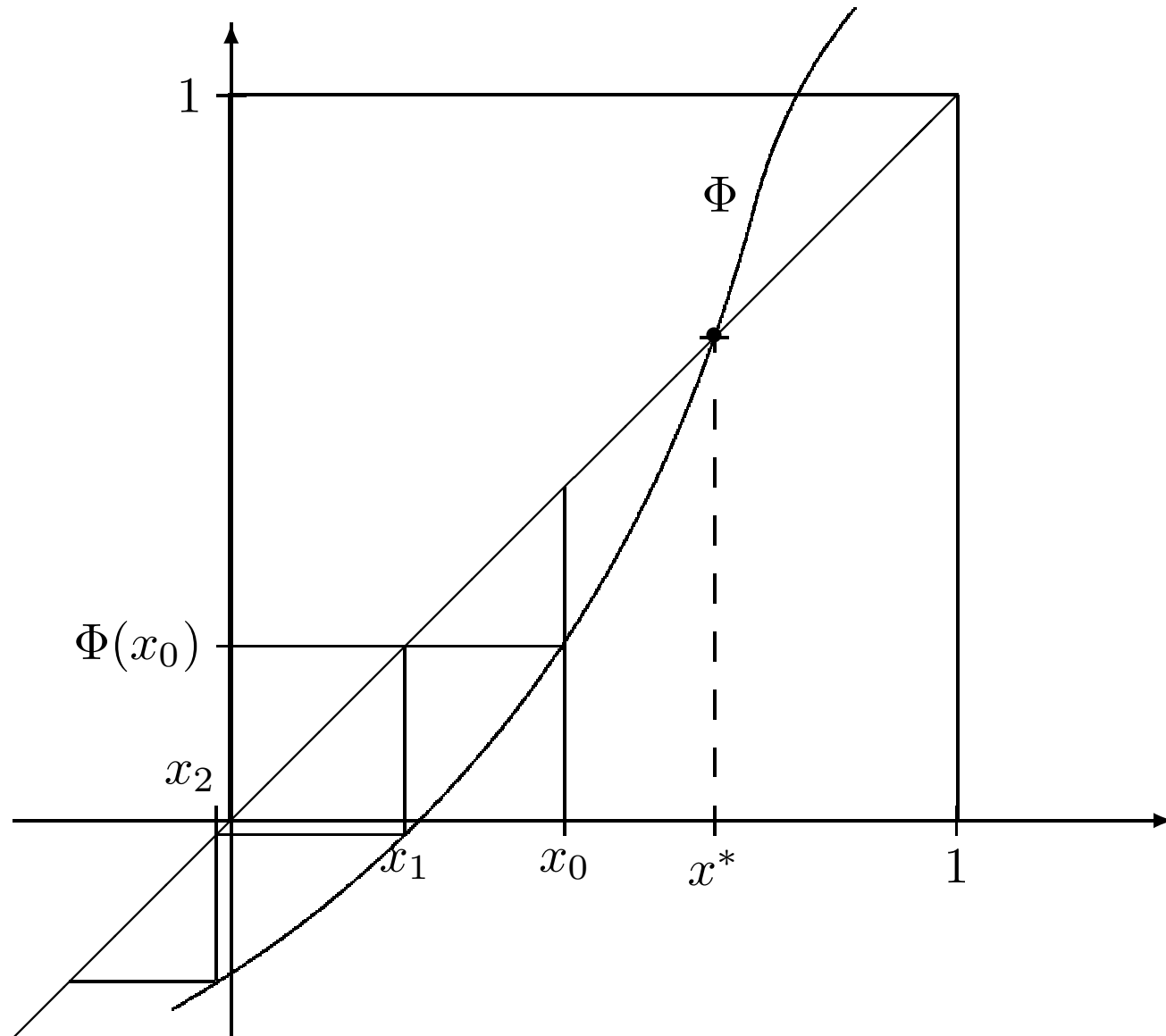
Die Behauptung folgt aus der Tatsache, daß aufgrund der Invertierbarkeit von M_x gilt $f(x^*) = 0 \quad \Longleftrightarrow \quad M_{x^*} f(x^*) = 0$. □

Fixpunktiteration:

- Wähle Startwert x_0 (in einer Umgebung von x^*),
- Bilde

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





Fall a: $|\Phi'(x^*)| < 1$. $|\Phi'(x)| < 1$ für alle x in $U_\delta := [x^* - \delta, x^* + \delta]$.

Folglich (Mittelwertsatz) für jedes $x, y \in U_\delta$ ein $\xi \in U_\delta$ mit

$$|\Phi(x) - \Phi(y)| = |\Phi'(\xi)(x - y)| \leq \max_{z \in U_\delta} |\Phi'(z)| |x - y| =: L |x - y|,$$

und $L = \max_{z \in U_\delta} |\Phi'(z)| < 1$. Also ist Φ *kontrahierend* auf U .

Für $x_0 \in U_\delta$ erhält man:

$$|x_{k+1} - x^*| = |\Phi(x_k) - \Phi(x^*)| \leq L |x_k - x^*| \leq L^{k+1} |x_0 - x^*| \quad \text{für alle } k \geq 0$$

also Konvergenz: $\lim_{k \rightarrow \infty} x_k = x^*$.

Fall b: $|\Phi'(x^*)| > 1$. Es existiert $\delta > 0$, so daß $|\Phi'(z)| > 1$ für alle $z \in U_\delta = [x^* - \delta, x^* + \delta]$. Folglich gilt

$$\begin{aligned} |x_{k+1} - x^*| &= |\Phi(x_k) - \Phi(x^*)| = |\Phi'(\xi)(x_k - x^*)| \\ &> |x_k - x^*| \quad \text{für alle } x_k \in U_\delta, \end{aligned}$$

d.h., für alle $x_k \in U_\delta$ wird der Fehler $|x_k - x^*|$ vergrößert.

Beispiel 5.7.

Sei

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

f hat eine eindeutige positive Nullstelle x^* und es gilt $x^* \in [0, 2]$.
Fixpunkt: $\Phi(x^*) = x^*$,

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

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

Die Iterationsfunktion Φ_1 ist also nicht geeignet. Für Φ_2 ergibt sich

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

und damit

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

Um das Kontraktionsargument wiederholt anwenden zu können, muß die Folge $x_{k+1} = \Phi_2(x_k), k \geq 0$, für $x_0 \in [0, 2]$ im Intervall $[0, 2]$ bleiben. Diese Bedingung ist erfüllt, falls Φ_2 eine *Selbstabbildung* auf $[0, 2]$ ist, 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. $E \subseteq X$ sei eine vollständige Teilmenge von X . Φ sei eine **Selbstabbildung** auf E , $\Phi : E \rightarrow E$.
Ferner sei Φ eine **Kontraktion** auf E

$$\|\Phi(x) - \Phi(y)\| \leq L\|x - y\| \quad \text{für alle } x, y \in E, \text{ mit } L < 1.$$

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^* .

3. A-priori-Fehlerabschätzung: $\|x_k - x^*\| \leq \frac{L^k}{1-L} \|x_1 - x_0\|$.
4. A-posteriori-Fehlerabschätzung:

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

Bemerkung 5.9.

Um eine Genauigkeit ϵ zu erreichen, genügt es k so groß wählen, daß

$$\frac{L^k}{1-L} \|x_1 - x_0\| \leq \epsilon,$$

also

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

d.h.

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

Wegen

$$\|x_k - x_{k-1}\| = \|\Phi(x_{k-1}) - \Phi(x_{k-2})\| \leq L \|x_{k-1} - x_{k-2}\| \leq L^{k-1} \|x_1 - x_0\|$$

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

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 $\|\cdot\| = |\cdot|$.

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

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

die Jacobi-Matrix von Φ an der Stelle x .

Folgerung 5.12. Sei $X = \mathbb{R}^n$, $x^* \in \mathbb{R}^n$, so daß $\Phi(x^*) = x^*$ und Φ stetig differenzierbar in einer Umgebung von x^* . Bezüglich einer Vektornorm $\|\cdot\|$ auf \mathbb{R}^n gelte für die zugehörige Matrixnorm

$$\|\Phi'(x^*)\| < 1.$$

Sei $B_\varepsilon := \{x \in \mathbb{R}^n \mid \|x - x^*\| \leq \varepsilon\}$. Für $E = B_\varepsilon$ mit $\varepsilon > 0$ hinreichend klein sind alle Voraussetzungen aus Satz 5.8 erfüllt.

Beispiel 5.13

Man zeige, 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. Man bestimme diese Lösung bis auf eine Genauigkeit 10^{-3} in der Norm $\|\cdot\|_\infty$.

Lösung: Für $x \in [0, 1]$ gilt $0 \leq \cos x \leq 1$ und $0 \leq \sin x \leq 1$. Für

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

gilt daher $\Phi : E \rightarrow E$. Ferner gilt

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

Für die Norm $\|\cdot\|_\infty$ auf \mathbb{R}^2 ergibt sich

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

Wegen Folgerung 5.11 existiert genau eine Lösung in E . Wegen (3) in Satz 5.8 genügt es, für

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

also

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

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

zu wählen.

Wir erhalten Werte, die in Tabelle 5.2 wiedergegeben sind.

In der dritten Spalte werden die Resultate der a-posteriori-Fehlerabschätzung (5.23) gezeigt.

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. \triangle

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

Definiton 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

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

Beispiel 5.15.

Dieses Beispiel verdeutlicht den großen Geschwindigkeitsunterschied zwischen Verfahren der Ordnung $p = 1$ (lineare Konvergenz) und Verfahren der Ordnung $p = 2$ (quadratische Konvergenz).

Sei $\|x_0 - x^*\| = 0.2$, $p = 1$, $c = \frac{1}{2}$, $e_k := \|x_k - x^*\|$.

Dann gilt:

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

Für $c = 3$ und $p = 2$ gilt:

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

△

Sei $x^* \in \mathbb{R}^n$ gegeben (z.B. die Nullstelle einer Funktion).

Ein *iteratives Verfahren* zur Bestimmung von x^* 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.

Bemerkung 5.16. Sei $x_{k+1} = \Phi(x_k)$, $k = 0, 1, \dots$, eine konvergente Fixpunktiteration mit Fixpunkt x^* . Aus

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

folgt, daß im Normalfall, wenn $0 \neq \|\Phi'(x^*)\| < 1$ gilt, die Fixpunktiteration die Konvergenzordnung 1 hat. Quadratische Konvergenz hat man, wenn $\Phi'(x^*) = 0$ gilt. △

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

Sei

$$e_k := x^* - x_k, \quad A_k := \frac{x_k - x_{k-1}}{x_{k-1} - x_{k-2}}$$

Lemma 5.17. Sei $\{x_k\}_{k=0}^{\infty}$ eine konvergente Folge mit Grenzwert x^* .
Aus

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{e_{k+1}}{e_k} = A \in (-1, 1), \quad A \neq 0,$$

folgt, daß die Konvergenzordnung der Folge $\{x_k\}_{k=0}^{\infty}$ genau 1 ist und daß

$$\lim_{k \rightarrow \infty} A_k = A, \quad \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\frac{A_k}{1 - A_k}(x_k - x_{k-1})}{e_k} = 1.$$

Wenn die Folge die Konvergenzordnung $p > 1$ hat, gilt

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{x_{k+1} - x_k}{e_k} = 1.$$

Aus den Resultaten in Lemma 5.17 ergeben sich einfache a-posteriori-Fehlerschätzungen (für k hinreichend groß):

$$p = 1 \quad : \quad x^* - x_k \approx \frac{A_k}{1 - A_k} (x_k - x_{k-1}),$$

wobei $A_k = \frac{x_k - x_{k-1}}{x_{k-1} - x_{k-2}}$ etwa konstant sein sollte.

$$p > 1 \quad : \quad x^* - x_k \approx x_{k+1} - x_k.$$

Beachte: für $p = 1$ (lineare Konvergenz) ist

$$|x_k - x_{k-1}| \quad \text{oder} \quad |x_{k+1} - x_k|$$

im allgemeinen *keine* sinnvolle Schätzung der Größe des Fehlers $|x^* - x_k|$.

5.18. Beispiel

Für die Fixpunktiteration $x_{k+1} = \Phi_2(x_k)$ aus Beispiel 5.7 sind einige Resultate in Tabelle 5.3 zusammengestellt:

k	$x_0 = 0.5, x_{k+1} = \Phi_2(x_k)$	$A_k = \frac{x_k - x_{k-1}}{x_{k-1} - x_{k-2}}$	$\frac{A_k}{1 - A_k}(x_k - x_{k-1})$	$x^* - x_k$
0	0.500000000000	—	—	6.35e-01
1	1.069913193934	—	—	6.48e-02
2	1.128908359044	0.1035161	6.81e-03	5.82e-03
3	1.134208317737	0.0898372	5.23e-04	5.16e-04
4	1.134678435924	0.0887022	4.58e-05	4.57e-05
5	1.134720089466	0.0886023	4.05e-06	4.05e-06
6	1.134723779696	0.0885934	3.59e-07	3.59e-07
7	1.134724106623	0.0885926	3.18e-08	3.18e-08
8	1.134724135586	0.0885926	2.82e-09	2.82e-09
9	1.134724138152	0.0885926	2.49e-10	2.49e-10
10	1.134724138379	0.0885925	2.21e-11	2.21e-11

Lemma 5.19. Sei $\{x_k\}_{k=0}^{\infty}$ eine konvergente Folge in \mathbb{R}^n mit Grenzwert x^* und Konvergenzordnung $p > 1$. Dann gilt

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\|x_{k+1} - x_k\|}{\|e_k\|} = 1 .$$

Aus diesem Resultat ergibt sich folgende Fehlerschätzung für den Fall $p > 1$:

$$p > 1 : \quad \|x_k - x^*\| \approx \|x_{k+1} - x_k\|, \quad \text{für } k \text{ genügend groß .}$$

Es sei bemerkt, daß im skalaren Fall (5.37) der Fehler e_k und im vektoriellen Fall die Größe des Fehlers, $\|e_k\|$, geschätzt wird.

5.5 Berechnung von Nullstellen von skalaren Gleichungen

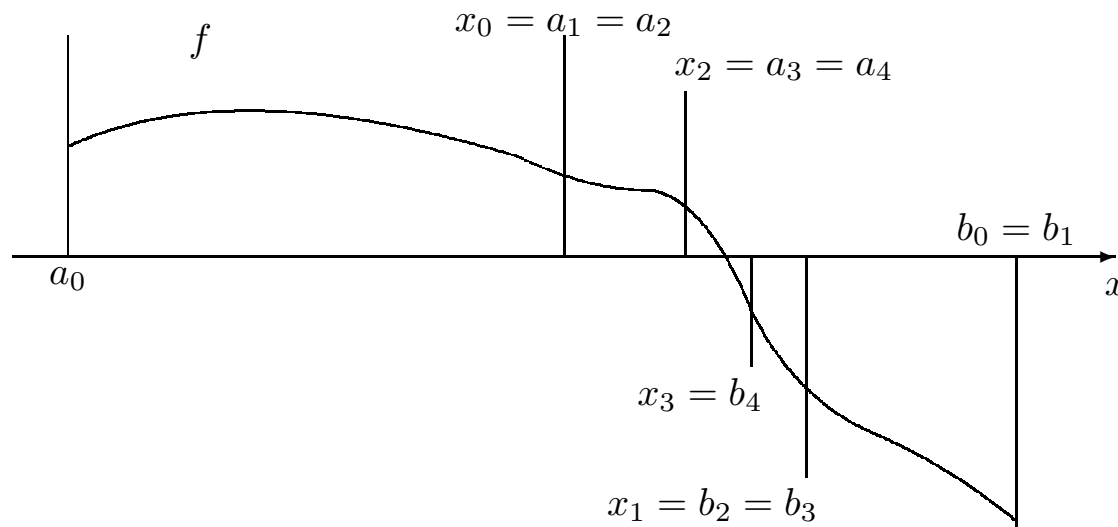
5.5.1 Bisektion

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

$$\begin{aligned} a_{k+1} &= a_k, & b_{k+1} &= x_k & \text{falls } f(x_k)f(a_k) &\leq 0 \\ a_{k+1} &= x_k, & b_{k+1} &= b_k & \text{sonst.} \end{aligned}$$



Beispiel 5.21.

Nullstellenaufgabe aus Beispiel 5.7:

Gesucht wird die Nullstelle $x^* \in [0, 2]$ der Funktion $f(x) = x^6 - x - 1$.

Die Bisektion mit $a_0 = 0$, $b_0 = 2$ 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

5.5.2 Das Newton-Verfahren

Die Iterationsfunktion Φ soll so konstruiert werden, daß

$$x_{k+1} = \Phi(x_k)$$

möglichst schnell konvergiert. *Ansatz:*

$$\Phi(x) = x - g(x)f(x).$$

Es gilt

$$\Phi'(x^*) = 0 \iff g(x^*) = \frac{1}{f'(x^*)}.$$

Deshalb

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

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

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.

Aufgabe: Bestimmung der Nullstelle $x^* \in [0, 2]$ der Funktion $f(x) = x^6 - x - 1$.

Das Newton-Verfahren ergibt in diesem Fall

$$x_{k+1} = x_k - \frac{x_k^6 - x_k - 1}{6x_k^5 - 1}.$$

Einige 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 $a > 0$. \sqrt{a} ist Lösung von

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

Das Newton-Verfahren ergibt in diesem Fall

$$x_{k+1} = \frac{1}{2} \left(x_k + \frac{a}{x_k} \right).$$

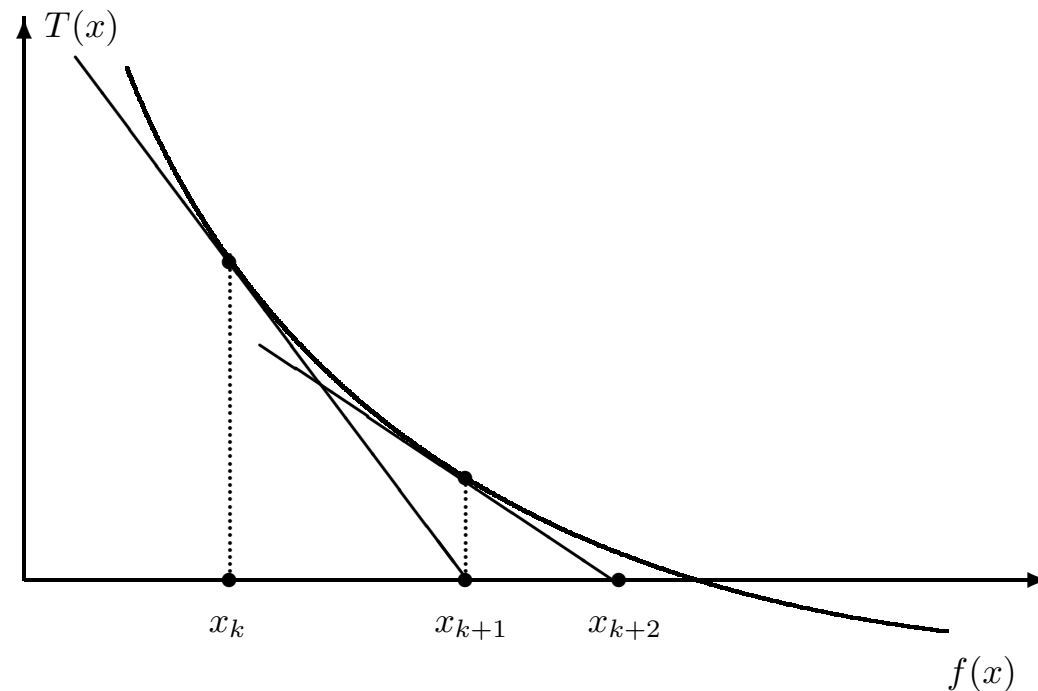
k	x_k	$x_{k+1} - x_k$	$\sqrt{2} - x_k$
0	100.00000000000000	-5.00e+01	-9.86e+01
1	50.01000000000000	-2.50e+01	-4.86e+01
2	25.02499600079984	-1.25e+01	-2.36e+01
3	12.55245804674590	-6.20e+00	-1.11e+01
4	6.35589469493114	-3.02e+00	-4.94e+00
5	3.33528160928043	-1.37e+00	-1.92e+00
6	1.96746556223115	-4.75e-01	-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

$$f(x) = f(x_k) + (x - x_k)f'(x_k) + \frac{1}{2}(x - x_k)^2 f''(\xi_k)$$

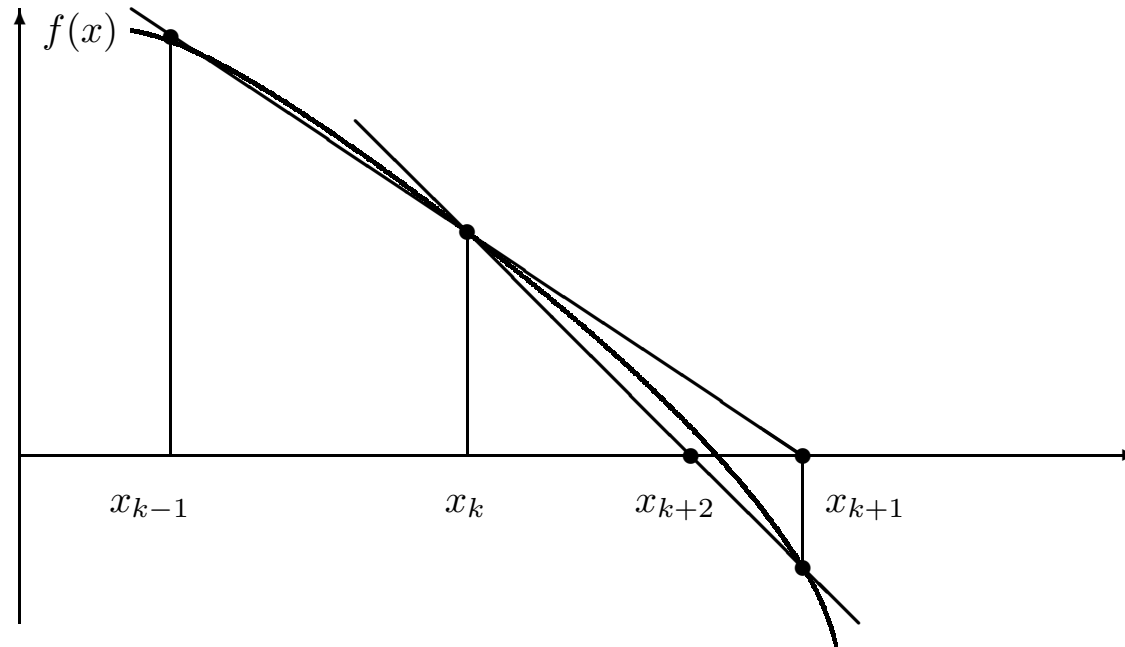
Tangente:

$$T(x) = f(x_k) + (x - x_k)f'(x_k).$$

$$T(x_{k+1}) = 0 \quad \Leftrightarrow \quad x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}.$$



Sekanten-Verfahren



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

Konvergenzordnung:

$$p \approx 1.6$$

Beispiel 5.26. Für $f(x) = x^6 - x - 1 = 0$ liefert die Sekanten-Methode:

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.

5.6 Das Newton-Verfahren für Systeme

Aufgabe:

$$f(x) = 0$$

wobei $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ (für $n > 1$) eine zweimal stetig differenzierbare vektorwertige Funktion ist.

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

Taylorentwicklung:

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

$$f'(x) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1(x)}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial f_1(x)}{\partial x_n} \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial f_n(x)}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial f_n(x)}{\partial x_n} \end{pmatrix} \quad (\text{Jacobimatrix}).$$

Kompakt:

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

Linearisierung:

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

Hieraus erhält man

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

Algorithmus 5.28 (Newton-Iteration)

Gegeben: Startwert x^0 .

Für $k = 0, 1, 2, \dots$:

- Berechne $f(x^k), f'(x^k)$
- Löse das lineare Gleichungssystem in s^k

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

- Setze (Newton-Korrektur)

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

Beispiel 5.29

$$\begin{aligned}f_1(x_1, x_2) &= 6x_1 - \cos x_1 - 2x_2 = 0, \\f_2(x_1, x_2) &= 8x_2 - x_1x_2^2 - \sin x_1 = 0.\end{aligned}$$

Man erhält

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

Für den Startwert $x^0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ ergibt sich $f(x^0) = \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix}$ und

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

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

zu lösen. Man erhält

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

△

Satz 5.31. Sei $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ offen und konvex, $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^n$ stetig differenzierbar mit $\det f'(x) \neq 0$ für alle $x \in \Omega$. Sei β , so daß

$$\|(f'(x))^{-1}\| \leq \beta \quad \text{für alle } x \in \Omega.$$

Ferner sei $f'(x)$ auf Ω Lipschitz-stetig mit einer Konstanten γ :

$$\|f'(x) - f'(y)\| \leq \gamma \|x - y\|, \quad x, y \in \Omega.$$

Weiterhin existiere eine Lösung x^* von $f(x) = 0$ in Ω . 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^* :

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

Beispiel 5.33.

Beispiel 5.2. Für $n = 60$ ergibt sich das Gleichungssystem

$$f_i(x_1, x_2, \dots, x_{60}) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, 60,$$

wobei

$$f_i(x_1, x_2, \dots, x_{60}) = x_i + \frac{1}{60} \sum_{j=1}^{60} \cos\left(\frac{\left(i - \frac{1}{2}\right)\left(j - \frac{1}{2}\right)}{3600}\right) x_j^3 - 2.$$

$$(f'(x))_{i,j} = \frac{\partial f_i(x)}{\partial x_j} = \begin{cases} 1 + \frac{1}{20} \cos\left(\frac{\left(i - \frac{1}{2}\right)^2}{3600}\right) x_i^2 & \text{für } i = j \\ \frac{1}{20} \cos\left(\frac{\left(i - \frac{1}{2}\right)\left(j - \frac{1}{2}\right)}{3600}\right) x_j^2 & \text{für } i \neq j. \end{cases}$$

In jedem Iterationsschritt des Newton-Verfahrens werden

- die Jacobi-Matrix $f'(x^k)$ und der Funktionswert $f(x^k)$ berechnet,
- das lineare Gleichungssystem $f'(x^k)s^k = -f(x^k)$ gelöst,
- $x^{k+1} = x^k + s^k$ berechnet.

Ergebnisse für den Startwert $x^0 = (2, 2, \dots, 2)^T$:

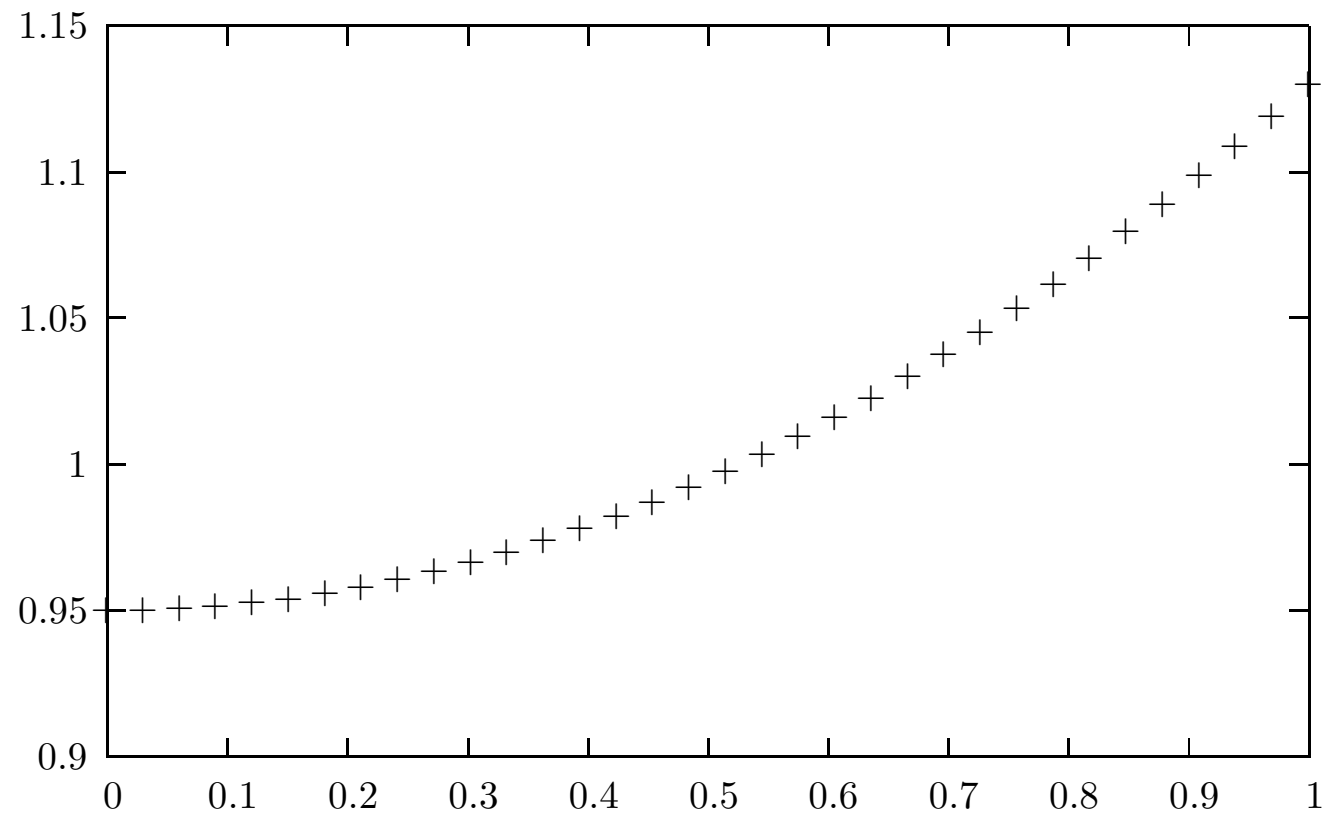
k	$\ f(x^k)\ _2$	$\ x^{k+1} - x^k\ _2$
0	5.87e+01	4.75e+00
1	1.50e+01	2.31e+00
2	2.52e+00	5.78e-01
3	1.31e-01	3.32e-02
4	4.10e-04	1.05e-04
5	4.09e-09	1.05e-09
6	2.51e-15	—

Die dritte Spalte zeigt die Fehlerschätzung (5.40).

Es gilt

$$x_i^6 \approx u(t_i) = u\left(\frac{i - \frac{1}{2}}{60}\right), \quad i = 1, 2, \dots, 60.$$

Diese Näherung der Funktion $u(x)$, $x \in [0, 1]$, ist in folgender Abbildung dargestellt:



Das vereinfachte Newton-Verfahren

- Aufstellen der Jacobi-Matrix im ersten Schritt $f'(x^0)$.
- Statt $f'(x^k)$ in (5.55) verwende $f'(x^0)$, d.h.,

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

für $k = 0, 1, 2, \dots$

Dadurch geht allerdings die quadratische Konvergenz verloren. In der Praxis verwendet man daher eine Mischform, wobei man f' nach etwa 3 bis 5 Schritten erneuert.

Einträge der Jacobi-Matrix:

$$\frac{\partial f_i(x^k)}{\partial x_j}$$

Annäherung durch *numerische* Differentiation:

$$\frac{\partial f_i(x)}{\partial x_j} \approx \frac{f_i(x + he^j) - f_i(x)}{h}, \quad e^j = (0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0)^T,$$

Allgemein wird ein zu großes h die Genauigkeit der Approximation von $f'(x^k)$ und damit ebenfalls die Konvergenz der Newton-Iteration beeinträchtigen. Ein zu kleines h birgt hingegen die Gefahr der Auslöschung.

Beispiel 5.34.

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

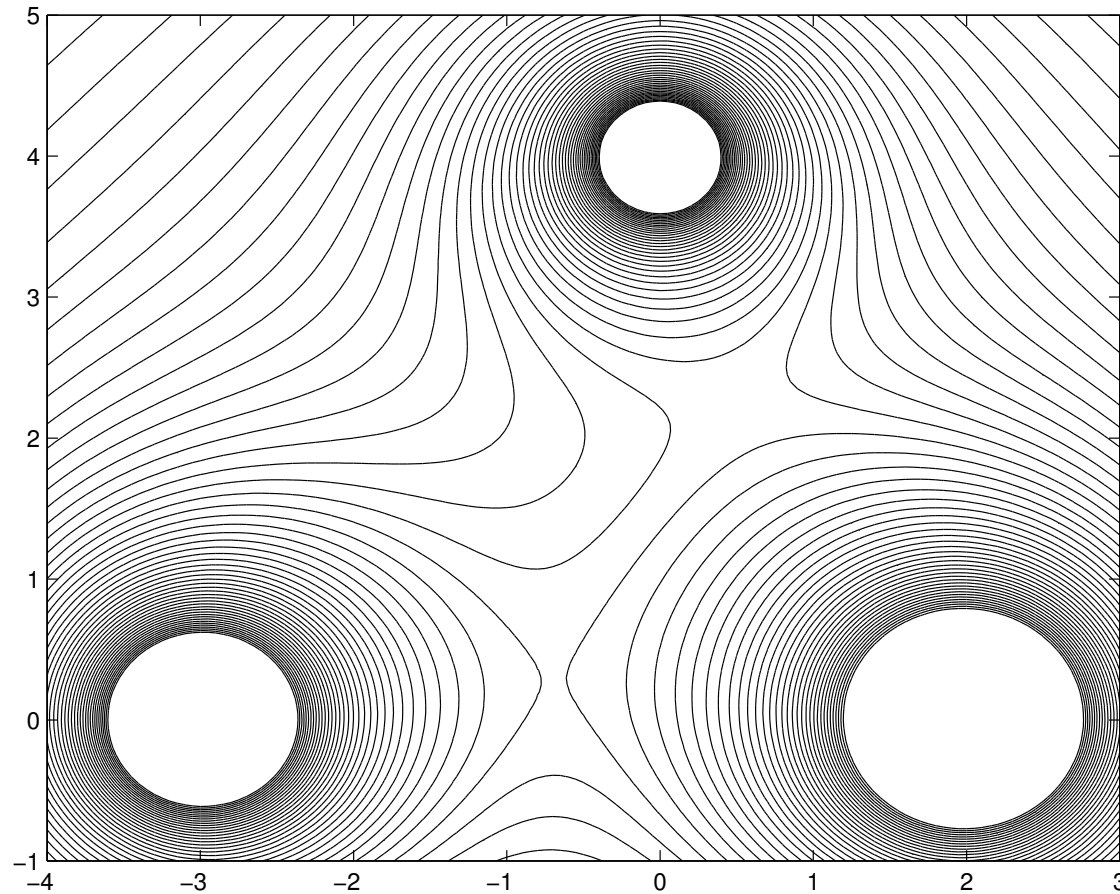
$$f_2(x, y) = \sum_{i=1}^3 \frac{m_i(y_i - y)}{((x_i - x)^2 + (y_i - y)^2)^{3/2}} = 0$$

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

Für f_1, f_2 gilt

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

Also ist (x^*, y^*) Lösung des Systems genau dann, wenn (x^*, y^*) ein lokales Minimum, lokales Maximum oder ein Sattelpunkt des Potentials U ist.



Aus diesem Bild erkennt man, daß U zwei Sattelpunkte und keine lokalen Maxima oder Minima hat. Das System hat also genau zwei Lösungen.

Anhand der Graphik kann man geeignete Startwerte wählen.

Ergebnisse der Newton Methode:

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	-

Dabei wird durch einen Problemparameter oder durch einen künstlich eingeführten Parameter μ aus einem System von nichtlinearen Gleichungen eine Familie von Problemen

$$F(x, \mu) = 0$$

definiert. Etwa im Falle von Beispiel 5.2 kann man z.B. die Familie

$$u_i + h \sum_{j=1}^n \cos(t_i t_j) u_j^\mu - 2 = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n,$$

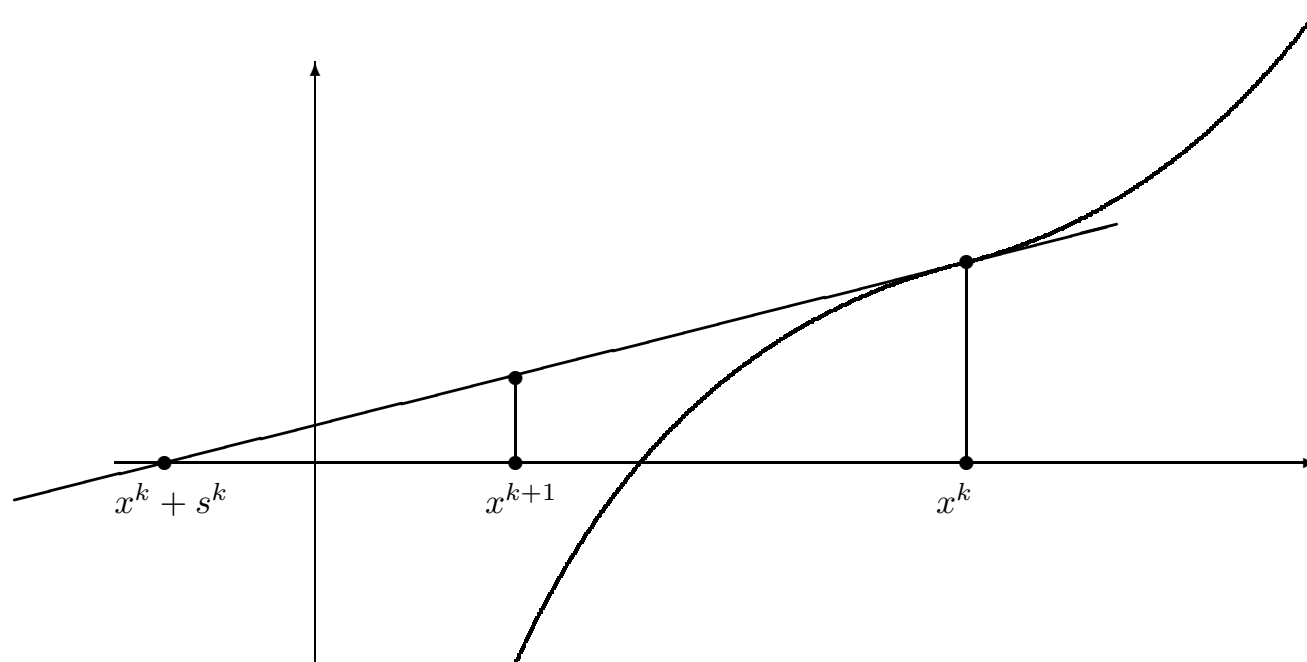
mit $1 \leq \mu \leq 3$, definieren. Für $\mu_0 = 1$ ist dieses Problem *linear*, und man hat keine Schwierigkeiten bezüglich der Wahl des Startwerts. Die berechnete Lösung u_{μ_0} kann dann als Startwert für ein „benachbartes“ Problem mit $\mu_1 > \mu_0$ verwendet werden, usw.

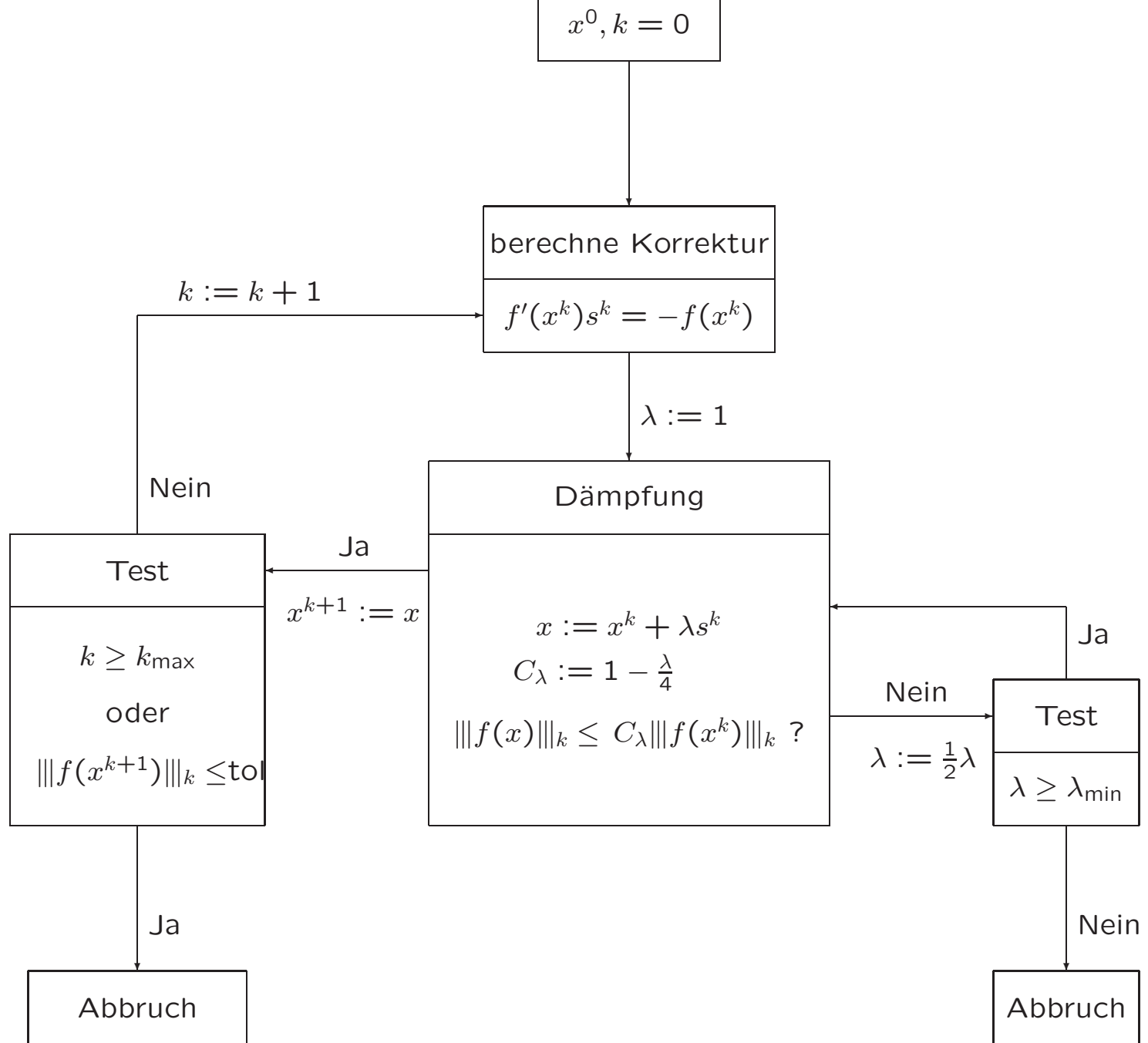
Das gedämpfte Newton-Verfahren

Man setzt

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

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





5.7. Berechnung von Nullstellen von Polynomen

Sei P_n ein Polynom: $P_n(x) = \sum_{j=0}^n a_j x^j$, $a_n \neq 0$.

Deflation

Ist eine Nullstelle z von P_n bekannt, so kann man den linearen Faktor $(x - z)$ abspalten. Aus

$$P_n(x) = (x - z)P_{n-1}(x) + R, \quad P_{n-1}(x) = \sum_{j=0}^{n-1} b_j x^j, \quad R \in \mathbb{R},$$

folgt durch Koeffizientenvergleich:

$$\begin{aligned} a_n &= b_{n-1}, \\ a_{n-1} &= b_{n-2} - zb_{n-1}, \\ a_{n-2} &= b_{n-3} - zb_{n-2}, \\ &\vdots \\ a_1 &= b_0 - zb_1, \\ a_0 &= R - zb_0. \end{aligned}$$

Die Bairstow-Methode

Mit der Bairstow-Methode kann bei der Bestimmung von komplexen Nullstellen eines reellen Polynoms *das Rechnen mit komplexen Zahlen vermieden werden*.

Sei $a_n = 1$. Ist $z_1 = u_1 + i v_1$ ($u_1, v_1 \in \mathbb{R}$) eine komplexe Nullstelle, dann ist auch $\bar{z}_1 = u_1 - i v_1$ eine Nullstelle von P_n . Das Produkt

$$(x - z_1)(x - \bar{z}_1) = x^2 - 2u_1x + u_1^2 + v_1^2$$

ist ein *quadratischer* Teiler von P_n mit *reellen* Koeffizienten.

Faktorisierung von P_n mit einem quadratischen Polynom:

für gegebenes $r, s \in \mathbb{R}$ und

$$P_n(x) = x^n + a_{n-1}x^{n-1} + \dots + a_0 \quad (n \geq 2), \quad q_{r,s}(x) = x^2 - rx - s ,$$

will man $P_{n-2}(x) = x^{n-2} + b_{n-3}x^{n-3} + \dots + b_0$ und $A, B \in \mathbb{R}$ bestimmen, so daß gilt

$$P_n(x) = q_{r,s}(x)P_{n-2}(x) + Ax + B \quad \text{für alle } x \in \mathbb{R} .$$

Durch Koeffizientenvergleich ergibt sich folgende Methode:

Algorithmus 5.39 (Polynomdivision eines quadratischen Faktors)

Eingabe: Koeffizienten a_0, \dots, a_{n-1} des Polynoms P_n ($a_n = 1$)
und $r, s \in \mathbb{R}$.

$$b_{n-3} = a_{n-1} + r;$$

$$b_{n-4} = a_{n-2} + rb_{n-3} + s;$$

$$\text{Für } j = n - 5, \dots, 0 : \quad b_j = a_{j+2} + rb_{j+1} + sb_{j+2};$$

$$A = a_1 + rb_0 + sb_1;$$

$$B = a_0 + sb_0;$$

Offensichtlich hängen P_{n-2} , A und B von r und s ab, und $q_{r,s}$ teilt genau dann P_n , wenn $A = B = 0$ gilt. Die Aufgabe, solche r und s zu finden, kann man als 2×2 -Nullstellenproblem

$$\begin{cases} A(r, s) = 0 \\ B(r, s) = 0 \end{cases}$$

interpretieren.

Hierauf läßt sich das Newton-Verfahren anwenden:

$$\begin{pmatrix} r^{k+1} \\ s^{k+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r^k \\ s^k \end{pmatrix} - \left(\begin{array}{cc} \frac{\partial A}{\partial r} & \frac{\partial A}{\partial s} \\ \frac{\partial B}{\partial r} & \frac{\partial B}{\partial s} \end{array} \right)_{|(r^k, s^k)}^{-1} \begin{pmatrix} A(r^k, s^k) \\ B(r^k, s^k) \end{pmatrix}$$

Zur Bestimmung der partiellen:

Lemma 5.40. Sei $n \geq 4$ und $P_n(x), q_{r,s}(x)$ wie oben mit $r, s \in \mathbb{R}$ beliebig. Seien $P_{n-2} \in \Pi_{n-2}$, $P_{n-4} \in \Pi_{n-4}$ und A, B, \hat{A}, \hat{B} so daß

$$\begin{aligned} P_n(x) &= q_{r,s}(x)P_{n-2}(x) + Ax + B \\ P_{n-2}(x) &= q_{r,s}(x)P_{n-4}(x) + \hat{A}x + \hat{B} \end{aligned}$$

Dann gilt:

$$\frac{\partial A}{\partial s} = \hat{A}, \quad \frac{\partial B}{\partial s} = \hat{B}, \quad \frac{\partial A}{\partial r} = r\hat{A} + \hat{B}, \quad \frac{\partial B}{\partial r} = s\hat{A} .$$

Für den Fall $n \leq 3$ kann man sofort explizite Formeln für $A(r, s)$ und $B(r, s)$ herleiten.