

6 Iterationsverfahren für lineare und nichtlineare Gleichungssysteme

6.1 Nullstellen reeller Funktionen

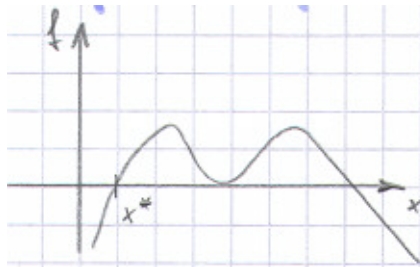
Bemerkung 6.1 (Problemstellung)

geg.: $f \in C[a, b]$

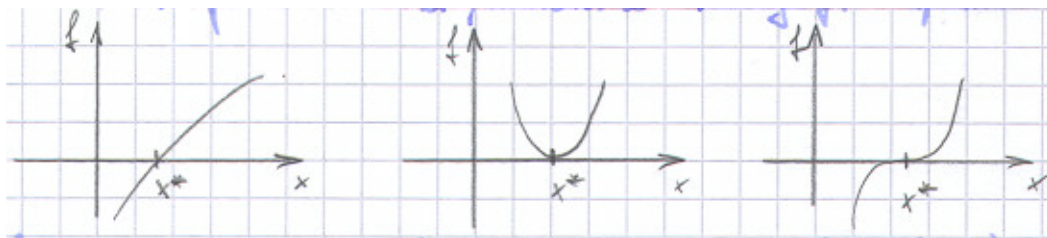
ges.: $x^* \in [a, b]$ mit $f(x^*) = 0$

Lösungstheorie

- f linear $\Rightarrow f(x) = 0$ genau dann eindeutig lösbar in \mathbb{R} , falls $f' \neq 0$.
- f nichtlinear \Rightarrow i. Allg. nur Aussagen über lokale Eindeutigkeit der Lösung



- Satz über die implizite Funktion: Ist $f(x^*) = 0$, $f \in C^1[a, b]$ und $f'(x^*) \neq 0$, so ist $y = f(x)$ in einer Umgebung von x^* eindeutig nach x auflösbar: $x = x(y)$.
- $f'(x^*) = 0 \Rightarrow$ mehrfache Nullstelle, numerische Bestimmung oft kompliziert



- $f(a) \cdot f(b) < 0 \Rightarrow$ es existiert ein x^* mit $f(x^*) = 0$ (Zwischenwertsatz)

Bemerkung 6.2 (Bisektionsverfahren)

geg.: $f \in C[a, b]$, Intervallenden a, b mit $f(a) \cdot f(b) < 0$, Abbruchschranke TOL

```
Initialisierung:  $f_a := f(a), f_b := f(b)$ .
repeat
   $c := \frac{a+b}{2}, f_c := f(c)$ 
  if  $f_a \cdot f_c < 0$  then  $b := c, f_b := f_c$ 
  else  $a := c, f_a := f_c$ 
until  $|b-a| \leq \text{TOL}$ 
Ergebnis:  $x^* \approx x_{\text{bi}} := \frac{a+b}{2}$ 
```

Konvergenz stets gesichert: Werden mindestens $1 + \log_2 \frac{b-a}{\text{TOL}}$ Iterationsschritte ausgeführt, so gilt

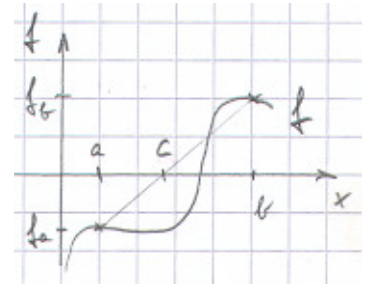
$$|x_{\text{bi}} - x^*| \leq \text{TOL}.$$

beachte Wegen der Rundungsfehler bei der Auswertung von f kann x^* außerhalb des numerisch bestimmten Intervalls $[a, b]$ liegen.

praktisch sehr robust, einfach zu implementieren, aber sehr langsame Konvergenz

Bemerkung 6.3 (Regula falsi)

Idee Bestimme wie im Bisektionsverfahren immer kleinere Intervalle, die x^* enthalten, berücksichtige bei der Wahl von c jedoch den Lösungsverlauf.



praktisch Wähle c als Nullstelle des (linearen) Interpolationspolynoms zu den Stützpunkten (a, f_a) und (b, f_b) .

geg.: $f \in C[a, b]$, Intervallenden a, b mit $f(a) \cdot f(b) < 0$, Abbruchschranke TOL

```
Initialisierung:  $f_a := f(a), f_b := f(b)$ .
repeat
   $c := \frac{af_b - bf_a}{f_b - f_a}, f_c := f(c)$ 
  if  $f_a \cdot f_c < 0$  then  $b := c, f_b := f_c$ 
  else  $a := c, f_a := f_c$ 
until  $|b-a| \leq \text{TOL}$ 
Ergebnis:  $x^* \approx x_{\text{rf}} := \frac{a+b}{2}$ 
```

Regula falsi konvergiert i. Allg. deutlich schneller als das Bisektionsverfahren.

Problem Langsame Konvergenz, wenn eines der beiden Intervallenden stets unverändert bleibt wie z. B. für $f(x) := x^{10} - 1/2$, ($x \in [0, 1]$).

Alternative Bleibt eines der beiden Intervallenden a bzw. b über mehr als einen Iterationsschritt unverändert, so ersetze $f_a := \frac{1}{2}f_a$ bzw. $f_b := \frac{1}{2}f_b$.

Bemerkung 6.4 (Sekantenverfahren)

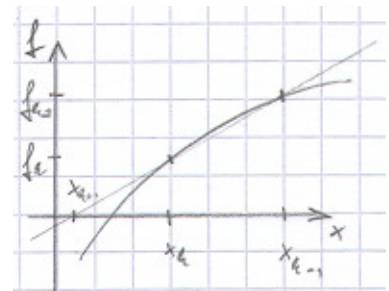
Verzichtet man auf eine Einschließung der Nullstelle x^* , so ergibt sich ausgehend von $(x_{k-1}, f(x_{k-1}))$, $(x_k, f(x_k))$ in der Regel eine wesentlich bessere Näherung für f :

Betrachte das (lineare) Interpolationspolynom

$$f(x) \approx f_k(x) := f_{k-1} + \frac{x - x_{k-1}}{x_k - x_{k-1}} (f_k - f_{k-1})$$

und bestimme aus $f_k(x) \stackrel{!}{=} 0$ die neue Näherung

$$x_{k+1} := x_k - f_k \frac{x_k - x_{k-1}}{f_k - f_{k-1}}, \quad f_{k+1} := f(x_{k+1}).$$



Konvergenzordnung des Sekantenverfahrens $q := (1 + \sqrt{5})/2$, d. h.

$$0 \leq \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{|x_{k+1} - x^*|}{|x_k - x^*|^q} < \infty$$

praktisch Schnelle Konvergenz für gute Startwerte, jedoch Gefahr der Divergenz für schlechte Startwerte

Verallgemeinerung Inverse Interpolation.

Hinzunahme weiterer Stützpunkte $(x_i, f(x_i))$, Bestimmung des Interpolationspolynoms $\pi(y)$ zu den Stützstellen $y = f_k, f_{k-1}, f_{k-2}, \dots$ und Stützwerten $\pi = x_k, x_{k-1}, x_{k-2}, \dots$ und Wahl von c als $c := \pi(0)$.

Bemerkung 6.5 (Newtonverfahren)

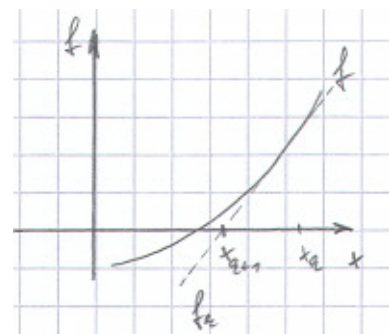
geg.: $f \in C^1[a, b]$

Linearisierung von f in x_k :

$$f(x) \approx f_k(x) := f(x_k) + f'(x_k)(x - x_k)$$

Bestimmung von x_{k+1} als Nullstelle von $f_k(x)$:

$$x_{k+1} := x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}$$

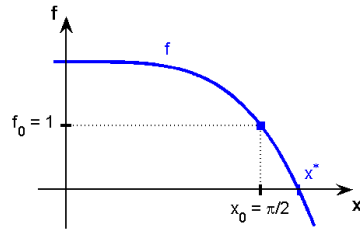


Beispiel 6.6: Newtonverfahren

gesucht

Kleinste positive Lösung von

$$f(x) = \cos x \cosh x + 1 = 0$$



Newtonverfahren

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}, \quad \text{Startwert } x_0 := \frac{\pi}{2}$$

k	x_k	$f(x_k)$	$f'(x_k)$	$ x_k - x^* $
0	1.570796326794897	1.0000E+00	-2.5092	3.0431E-01
1	1.969333142133283	-4.1751E-01	-4.7298	9.4229E-02
2	1.881060554590512	-2.4757E-02	-4.1744	5.9565E-03
3	1.875129963043149	-1.0716E-04	-4.1383	2.5894E-05
4	1.875104069204172	-2.0368E-09	-4.1381	4.9221E-10
5	1.875104068711961	2.2204E-16	-4.1381	< 1.0E-16
6	1.875104068711961			



Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, NWF III, Institut für Mathematik
Martin Arnold: Grundkurs Numerische Mathematik (WiS 2007/08)

Abbildung 6.1: Quadratische Konvergenz des Newtonverfahrens.

Quadratisch konvergent für einfache Nullstellen, d. h.

$$0 \leq \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{|x_{k+1} - x^*|}{|x_k - x^*|^2} < \infty,$$

linear konvergent für mehrfache Nullstellen.

Beispiel 6.6 (Newtonverfahren)

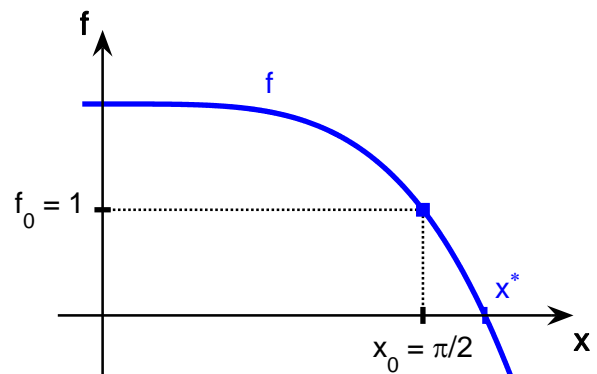
Berechnung der kleinsten positiven Lösung von $f(x) = \cos x \cosh x + 1 = 0$.

Newtonverfahren

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}$$

mit Startwert $x_0 := \pi/2$ und

$$f'(x) = \cos x \sinh x - \sin x \cosh x.$$



k	x_k	$f(x_k)$	$f'(x_k)$	$ x_k - x^* $
0	1.570796326794897	1.0000 _E + 00	-2.5092	3.0431 _E - 01
1	1.969333142133283	-4.1751 _E - 01	-4.7298	9.4229 _E - 02
2	1.881060554590512	-2.4757 _E - 02	-4.1744	5.9565 _E - 03
3	1.875129963043149	-1.0716 _E - 04	-4.1383	2.5894 _E - 05
4	1.875104069204172	-2.0368 _E - 09	-4.1381	4.9221 _E - 10
5	1.875104068711961	2.2204 _E - 16	-4.1381	< 1.0 _E - 16
6	1.875104068711961			

Ergebnis Folge (x_k) konvergiert quadratisch gegen $x^* = 1.875104068711961 \dots$

6.2 Das Newtonverfahren

Bemerkung 6.7 (Newton–Raphson–Verfahren)

geg.: $F : D \rightarrow \mathbb{R}^n$ mit $D \subset \mathbb{R}^n$, F stetig differenzierbar
Anfangsnäherung $x_0 \in D$

ges.: $x^* \in D$ mit $F(x^*) = 0$

Algorithmus

Schritt 0 $k := 0$.

Schritt 1 Berechne $J := F_x(x_k)$ und LU–Zerlegung von J .

Schritt 2 Berechne $F := F(x_k)$.

Schritt 3 Berechne p_k mit $Jp_k = -F$ mittels Vorwärts- und Rückwärtssubstitution.

Schritt 4 $x_{k+1} := x_k + p_k$, $k := k + 1$
if Konvergenz then stop
else goto Schritt 1

x_{k+1} ist Nullstelle der linearisierten Funktion $F_k(x) := F(x_k) + F_x(x_k)(x - x_k) \approx F(x)$.

praktisch Berechne Ableitungen $F_x(x_k)$ analytisch unter Verwendung mathematischer Hilfsprogramme (Maple, Mathematica) oder numerisch mittels Differenzenquotienten, vgl. Beispiel 5.7.

Vereinfachtes Newtonverfahren Vermeide die häufige Neuberechnung und LU–Zerlegung der Jacobimatrix, indem J über mehrere Iterationsschritte konstant gehalten wird.

? Auswirkungen auf das Konvergenzverhalten und auf die Konvergenzgeschwindigkeit

? Kriterium für die Neuberechnung der Jacobimatrix

Beispiel 6.8: Vereinfachtes Newtonverfahren

gesucht Kleinste positive Lösung von $f(x) = \cos x \cosh x + 1 = 0$.

Vereinfachtes Newtonverfahren
$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_0)}$$

Startwert $x_0 = 2.0$: (x_k) konvergiert linear mit $\alpha \approx 0.16$.

k	x_k	$f(x_k)$	$f'(x_k)$	$ x_k - x^* $
0	2.000000000000000	-5.6563E-01	-4.9303	1.2490E-01
1	1.885274674997890	-4.2402E-02		1.0171E-02
2	1.876674249774155	-6.5051E-03		1.5702E-03
3	1.875354824372530	-1.0379E-03		2.5076E-04
4	1.875144317977280	-1.6656E-04		4.0249E-05
5	1.875110534418510	-2.6756E-05		6.4657E-06
6	1.875105107508024	-4.2987E-06		1.0388E-06
7	1.875104235610924	-6.9065E-07		1.6690E-07
8	1.875104095527000	-1.1096E-07		2.6815E-08
9	1.875104073020237	-1.7828E-08		4.3083E-09
10	1.875104069404156	-2.8644E-09		6.9220E-10



Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, NWF III, Institut für Mathematik
Martin Arnold: Grundkurs Numerische Mathematik (WiS 2007/08)

Abbildung 6.2: Lineare Konvergenz des vereinfachten Newtonverfahrens, einmalige Auswertung der Ableitung $f'(x_k)$, Startwert $x_0 = 2.0$.

Beispiel 6.8: Vereinfachtes Newtonverfahren (II)

gesucht Kleinste positive Lösung von $f(x) = \cos x \cosh x + 1 = 0$.

Vereinfachtes Newtonverfahren
$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_0)}$$

Startwert $x_0 = \pi/2$: (x_k) konvergiert linear mit $\alpha \approx 0.65$.

k	x_k	$f(x_k)$	$f'(x_k)$	$ x_k - x^* $
0	1.570796326794897	1.0000E+00	-2.5092	3.0431E-01
1	1.969333142133283	-4.1751E-01		9.4229E-02
2	1.802938787863725	2.8309E-01		7.2165E-02
3	1.915761753759818	-1.7332E-01		4.0658E-02
4	1.846688134029678	1.1515E-01		2.8416E-02
5	1.892580923809663	-7.3253E-02		1.7477E-02
6	1.863386753854851	4.8072E-02		1.1717E-02
7	1.882545193155160	-3.0961E-02		7.4411E-03
8	1.870206143078939	2.0195E-02		4.8979E-03
9	1.878254787141379	-1.3068E-02		3.1507E-03
10	1.873046598671781	8.5012E-03		2.0575E-03



Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, NWF III, Institut für Mathematik
Martin Arnold: Grundkurs Numerische Mathematik (WiS 2007/08)

Abbildung 6.3: Lineare Konvergenz des vereinfachten Newtonverfahrens, einmalige Auswertung der Ableitung $f'(x_k)$, Startwert $x_0 = \pi/2$.

Beispiel 6.8: Vereinfachtes Newtonverfahren (III)

gesucht Kleinste positive Lösung von $f(x) = \cos x \cosh x + 1 = 0$.

Vereinfachtes Newtonverfahren

mit Neuberechnung von $f'(x_k)$ in jedem fünften Iterationsschritt

Deutlich besseres Konvergenzverhalten: $\alpha \approx 0.025$ für $k \geq 5$

k	x_k	$f(x_k)$	$f'(x_k)$	$ x_k - x^* $
0	1.570796326794897	1.0000E+00	-2.5092	3.0431E-01
1	1.969333142133283	-4.1751E-01		9.4229E-02
2	1.802938787863725	2.8309E-01		7.2165E-02
3	1.915761753759818	-1.7332E-01		4.0658E-02
4	1.846688134029678	1.1515E-01		2.8416E-02
5	1.892580923809663	-7.3253E-02	-4.2450	1.7477E-02
6	1.875324505147979	-9.1234E-04		2.2044E-04
7	1.875109582992217	-2.2819E-05		5.5143E-06
8	1.875104207501406	-5.7433E-07		1.3879E-07
9	1.875104072205700	-1.4458E-08		3.4937E-09
10	1.875104068799909	-3.6394E-10	-4.1381	8.7948E-11



Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, NWF III, Institut für Mathematik
Martin Arnold: Grundkurs Numerische Mathematik (WiS 2007/08)

Abbildung 6.4: Lineare Konvergenz des vereinfachten Newtonverfahrens, Auswertung der Ableitung $f'(x_k)$ in jedem fünften Iterationsschritt, Startwert $x_0 = \pi/2$.

Beispiel 6.8 (Vereinfachtes Newtonverfahren)

Betrachte zur Funktion $f(x)$ aus Beispiel 6.6 das vereinfachte Newtonverfahren

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}$$

Startwert $x_0 = 2.0$ (x_k) konvergiert linear mit $\alpha \approx 0.16$: $|x_{k+1} - x^*| \approx 0.16|x_k - x^*|$.

k	x_k	$f(x_k)$	$f'(x_k)$	$ x_k - x^* $
0	2.000000000000000	-5.6563E-01	-4.9303	1.2490E-01
1	1.885274674997890	-4.2402E-02		1.0171E-02
2	1.876674249774155	-6.5051E-03		1.5702E-03
3	1.875354824372530	-1.0379E-03		2.5076E-04
4	1.875144317977280	-1.6656E-04		4.0249E-05
5	1.875110534418510	-2.6756E-05		6.4657E-06
6	1.875105107508024	-4.2987E-06		1.0388E-06
7	1.875104235610924	-6.9065E-07		1.6690E-07
8	1.875104095527000	-1.1096E-07		2.6815E-08
9	1.875104073020237	-1.7828E-08		4.3083E-09
10	1.875104069404156	-2.8644E-09		6.9220E-10

Startwert $x_0 = \pi/2$ (x_k) konvergiert linear mit $\alpha \approx 0.65$: $|x_{k+1} - x^*| \approx 0.65|x_k - x^*|$.

k	x_k	$f(x_k)$	$f'(x_k)$	$ x_k - x^* $
0	1.570796326794897	1.0000 _E + 00	-2.5092	3.0431 _E - 01
1	1.969333142133283	-4.1751 _E - 01		9.4229 _E - 02
2	1.802938787863725	2.8309 _E - 01		7.2165 _E - 02
3	1.915761753759818	-1.7332 _E - 01		4.0658 _E - 02
4	1.846688134029678	1.1515 _E - 01		2.8416 _E - 02
5	1.892580923809663	-7.3253 _E - 02		1.7477 _E - 02
6	1.863386753854851	4.8072 _E - 02		1.1717 _E - 02
7	1.882545193155160	-3.0961 _E - 02		7.4411 _E - 03
8	1.870206143078939	2.0195 _E - 02		4.8979 _E - 03
9	1.878254787141379	-1.3068 _E - 02		3.1507 _E - 03
10	1.873046598671781	8.5012 _E - 03		2.0575 _E - 03

Startwert $x_0 = \pi/2$, Neuberechnung von $f'(x_k)$ in jedem 5. Iterationsschritt
 Deutliche Verbesserung des Konvergenzverhaltens: $\alpha \approx 0.025$ für $k \geq 5$.

k	x_k	$f(x_k)$	$f'(x_k)$	$ x_k - x^* $
0	1.570796326794897	1.0000 _E + 00	-2.5092	3.0431 _E - 01
1	1.969333142133283	-4.1751 _E - 01		9.4229 _E - 02
2	1.802938787863725	2.8309 _E - 01		7.2165 _E - 02
3	1.915761753759818	-1.7332 _E - 01		4.0658 _E - 02
4	1.846688134029678	1.1515 _E - 01		2.8416 _E - 02
5	1.892580923809663	-7.3253 _E - 02	-4.2450	1.7477 _E - 02
6	1.875324505147979	-9.1234 _E - 04		2.2044 _E - 04
7	1.875109582992217	-2.2819 _E - 05		5.5143 _E - 06
8	1.875104207501406	-5.7433 _E - 07		1.3879 _E - 07
9	1.875104072205700	-1.4458 _E - 08		3.4937 _E - 09
10	1.875104068799909	-3.6394 _E - 10	-4.1381	8.7948 _E - 11

Lemma 6.9 (Kontrahierende Abbildungen)

Sei $D \subset \mathbb{R}^n$ eine konvexe offene Menge und $\Phi : \bar{D} \rightarrow \mathbb{R}^n$ stetig differenzierbar. Existiert $\bar{\alpha} := \sup_{x \in \bar{D}} \|\Phi_x(x)\|$ und ist $\bar{\alpha} < 1$, so ist Φ kontrahierend, d. h., es gibt ein $\alpha \in [0, 1)$ so, dass

$$\|\Phi(y) - \Phi(x)\| \leq \alpha \|y - x\|, \quad (x, y \in \bar{D}).$$

Beweis Für $\varphi(\vartheta) := \Phi(x + \vartheta(y - x))$, ($\vartheta \in [0, 1]$) ist

$$\varphi'(\vartheta) = \Phi_x(x + \vartheta(y - x)) \cdot (y - x)$$

und

$$\varphi(1) - \varphi(0) = \int_0^1 \varphi'(\vartheta) \, d\vartheta,$$

also

$$\|\Phi(y) - \Phi(x)\| \leq \int_0^1 \|\Phi_x(x + \vartheta(y - x))\| \cdot \|y - x\| \, d\vartheta \leq \bar{\alpha} \|y - x\|. \quad \blacksquare$$

Satz 6.10 (Banachscher Fixpunktsatz)

Sei $E \subset \mathbb{R}^n$ kompakt und $\Phi : E \rightarrow E$ kontrahierend. Dann gilt:

a) Φ hat genau einen Fixpunkt x^* in E : $\Phi(x^*) = x^*$.

b) Für jeden Startwert $x_0 \in E$ konvergiert die Fixpunktiteration $x_{k+1} = \Phi(x_k)$ gegen x^* und es gilt:

$$(i) \quad \|x_k - x^*\| \leq \frac{\alpha^k}{1 - \alpha} \|x_1 - x_0\|,$$

$$(ii) \quad \|x_{k+1} - x^*\| \leq \frac{\alpha}{1 - \alpha} \|x_{k+1} - x_k\|.$$

Beweis Wegen $\Phi : E \rightarrow E$ folgt mittels vollständiger Induktion $x_k \in E$ und

$$\|x_{k+1} - x_k\| = \|\Phi(x_k) - \Phi(x_{k-1})\| \leq \alpha \|x_k - x_{k-1}\| \leq \dots \leq \alpha^k \|x_1 - x_0\|, \quad (k \geq 0).$$

Aus der Dreiecksungleichung folgt

$$\begin{aligned} \|x_{k+m} - x_k\| &= \|x_{k+m} - x_{k+m-1} + x_{k+m-1} - x_{k+m-2} + x_{k+m-2} - \dots - x_k\| \\ &\leq \|x_{k+m} - x_{k+m-1}\| + \|x_{k+m-1} - x_{k+m-2}\| + \dots + \|x_{k+1} - x_k\| \\ &\leq (\alpha^{k+m-1} + \alpha^{k+m-2} + \dots + \alpha^k) \|x_1 - x_0\| \\ &\leq \alpha^k \sum_{i=0}^{\infty} \alpha^i \cdot \|x_1 - x_0\| = \frac{\alpha^k}{1 - \alpha} \|x_1 - x_0\|, \end{aligned}$$

also ist $(x_k)_k$ eine Cauchy-Folge, denn wählt man zu vorgegebenem $\varepsilon > 0$ ein k_0 mit

$$\frac{\alpha^{k_0}}{1 - \alpha} \|x_1 - x_0\| \leq \varepsilon,$$

so gilt für alle $k \geq k_0$ und alle $m \geq 0$ die Abschätzung $\|x_{k+m} - x_k\| \leq \varepsilon$. Als Cauchy-Folge im Kompaktum E hat $(x_k)_k$ einen Häufungspunkt $x^* = \lim_{k \rightarrow \infty} x_k \in E$ mit

$$\|x^* - x_k\| = \lim_{m \rightarrow \infty} \|x_{k+m} - x_k\| \leq \frac{\alpha^k}{1 - \alpha} \|x_1 - x_0\|.$$

Dieser Häufungspunkt ist Fixpunkt von Φ , denn

$$\begin{aligned} \|x^* - \Phi(x^*)\| &= \|x^* - x_{k+1} + \Phi(x_k) - \Phi(x^*)\| \\ &\leq \|x^* - x_{k+1}\| + \|\Phi(x_k) - \Phi(x^*)\| \leq \|x^* - x_{k+1}\| + \alpha \|x_k - x^*\| \rightarrow 0. \end{aligned}$$

Der Fixpunkt ist eindeutig bestimmt, denn aus $x_1^* = \Phi(x_1^*)$ und $x_2^* = \Phi(x_2^*)$ folgt

$$\|x_2^* - x_1^*\| = \|\Phi(x_2^*) - \Phi(x_1^*)\| \leq \alpha \|x_2^* - x_1^*\|,$$

also $\underbrace{(1 - \alpha)}_{>0} \|x_2^* - x_1^*\| \leq 0$ und $x_2^* = x_1^*$.

Zum Beweis von (ii) verwendet man

$$\begin{aligned}\|x_{k+1+m} - x_{k+m}\| &= \|\Phi(x_{k+m}) - \Phi(x_{k+m-1})\| \\ &\leq \alpha \|x_{k+m} - x_{k+m-1}\| \leq \dots \leq \alpha^m \|x_{k+1} - x_k\|, \quad (m \geq 1),\end{aligned}$$

um wie oben unter Verwendung der Dreiecksungleichung die Abschätzung

$$\|x_{k+1+m} - x_{k+1}\| \leq (\alpha^m + \alpha^{m-1} + \dots + \alpha) \|x_{k+1} - x_k\| \leq \frac{\alpha}{1 - \alpha} \|x_{k+1} - x_k\|, \quad (m \geq 1),$$

zu zeigen, aus der die Behauptung durch Grenzübergang $m \rightarrow \infty$ folgt. ■