Mehrdimensionale Gleichungen und Iterationen

2. Vorlesung

170 004 Numerische Methoden 1

Alexander Steinicke

Montanuniversität Leoben

12.10. 2023

Wiederholung, Fragenliste

Nichtlineare Gleichungen in einer Variablen

Was ist. . .

- eine lineare (nichtlineare, polynomiale, algebraische, transzendente) Gleichung?
- eine Nullstelle? . . . mehrfache Nullstelle?
- ein Fixpunkt?

Wie geht. . .

- Intervallhalbierung?. . . Regula Falsi?
- Sekantenmethode?. . . Newton-Verfahren?
- Fixpunkt-Iteration?

Theorie

- Mehrfache Nullstellen: warum schlecht konditioniertes Problem?
- Wann, warum und wie schnell findet Intervallhalbierung garantiert eine Nullstelle?

Praxis

- Haben Sie die Aufgaben auf den letzten zwei Folien der vorigen Woche durchgerechnet?
- Diskussion Üb'Aufgabe 7 (Kepler-Gleichung)

Wiederholung, Fragenliste

Nichtlineare Gleichungen in einer Variablen

Was ist. . .	► eine lineare (nichtlineare, polynomiale, algebraische, transzendente) Gleichung? ► eine Nullstelle? . . . mehrfache Nullstelle? ► ein Fixpunkt?
Wie geht. . .	► Intervallhalbierung?. . . Regula Falsi? ► Sekantenmethode?. . . Newton-Verfahren? ► Fixpunkt-Iteration?
Theorie	► Mehrfache Nullstellen: warum schlecht konditioniertes Problem? ► Wann, warum und wie schnell findet Intervallhalbierung garantiert eine Nullstelle?
Praxis	► Haben Sie die Aufgaben auf den letzten zwei Folien der vorigen Woche durchgerechnet? ► Diskussion Üb'Aufgabe 7 (Kepler-Gleichung)

Wiederholung, Fragenliste

Nichtlineare Gleichungen in einer Variablen

Was ist. . .

- eine lineare (nichtlineare, polynomiale, algebraische, transzendente) Gleichung?
- eine Nullstelle? . . . mehrfache Nullstelle?
- ein Fixpunkt?

Wie geht. . .

- Intervallhalbierung?. . . Regula Falsi?
- Sekantenmethode?. . . Newton-Verfahren?
- Fixpunkt-Iteration?

Theorie

- Mehrfache Nullstellen: warum schlecht konditioniertes Problem?
- Wann, warum und wie schnell findet Intervallhalbierung garantiert eine Nullstelle?

Praxis

- Haben Sie die Aufgaben auf den letzten zwei Folien der vorigen Woche durchgerechnet?
- Diskussion Üb'Aufgabe 7 (Kepler-Gleichung)

Wiederholung, Fragenliste

Nichtlineare Gleichungen in einer Variablen

Was ist. . .

- eine lineare (nichtlineare, polynomiale, algebraische, transzendente) Gleichung?
- eine Nullstelle? . . . mehrfache Nullstelle?
- ein Fixpunkt?

Wie geht. . .

- Intervallhalbierung?. . . Regula Falsi?
- Sekantenmethode?. . . Newton-Verfahren?
- Fixpunkt-Iteration?

Theorie

- Mehrfache Nullstellen: warum schlecht konditioniertes Problem?
- Wann, warum und wie schnell findet Intervallhalbierung garantiert eine Nullstelle?

Praxis

- Haben Sie die Aufgaben auf den letzten zwei Folien der vorigen Woche durchgerechnet?
- Diskussion Üb'Aufgabe 7 (Kepler-Gleichung)

Mehrdimensionale Gleichungen und Iterationen

Gliederung 2. Vorlesung

Vektoren, Vektorwertige Funktionen, Iteration

Themenübersicht für diesen Abschnitt

Aufgaben im $\mathbb{R}^n$

- Vektoren, vektorwertige Funktionen
- Unbekannte zu einem Vektor zusammenfassen
- Gleichungssystem als vektorwertige Funktion schreiben
- Begriffe Nullstelle und Fixpunkt lassen sich direkt verallgemeinern
- Auch Fixpunkt-Iteration geht analog

Bei geeigneter Schreibweise ändert sich fast nichts gegenüber dem Fall einer Gleichung und Unbekannten

Beispiel: zwei Unbekannte sind gefragt

Nichtlineares Gleichungssystem mit zwei Unbekannten

$$\begin{aligned} 4x_1 - x_2 + x_1x_2 &= 1 \\ -x_1 + 6x_2 &= 2 - \log(x_1x_2) \end{aligned} \qquad \mathbf{g}(\mathbf{x}) = \mathbf{h}(\mathbf{x})$$

Nullstelle einer vektorwertigen Funktion $\mathbf{f} : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}^2$

$$\begin{aligned} 4x_1 - x_2 + x_1x_2 - 1 &= 0 \qquad & f_1(x_1, x_2) &= 0 \\ -x_1 + 6x_2 + \log(x_1x_2) - 2 &= 0 \qquad & f_2(x_1, x_2) &= 0 \end{aligned} \qquad \mathbf{f}(\mathbf{x}) = 0$$

Fixpunkt einer vektorwertigen Funktion $\mathbf{\Phi} : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}^2$

$$\begin{aligned} x_1 &= \frac{1}{4}(x_2 - x_1x_2 + 1) \\ x_2 &= \frac{1}{6}(x_1 - \log(x_1x_2) + 2) \end{aligned} \qquad \mathbf{x} = \mathbf{\Phi}(\mathbf{x})$$

im Skriptum auf S.21 durchgerechnet!

Zur Schreibweise: skalare und vektorwertige Funktionen

Vektoren und vektorwertige Funktionen fett gedruckt

Reellwertige Funktionen, Skalare:	$f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$	,	$y = f(x)$
Vektorwertige Funktionen, Vektoren:	$\mathbf{f} : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$	,	$\mathbf{y} = \mathbf{f}(\mathbf{x})$

Komponenten eines Vektors $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$:

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} \quad \text{oder } \mathbf{x}^T = [x_1, x_2, \ldots, x_n]$$

Normalerweise ist mit $\mathbf{x}$ ein Spalten-, mit $\mathbf{x}^T$ ein Zeilenvektor gemeint.

Iterationsindizes sind (um sie von Vektorkomponenten zu unterscheiden) in der Regel hochgestellt, in Klammern: $\mathbf{x}^{(k)}, k = 0, 1, 2 \ldots$

Aufgabentypen im $\mathbb{R}^n$

Vergleichen Sie mit der Formulierung für $n = 1$ in der 1. VL.

Es seien $\mathbf{f}, \mathbf{g}, \mathbf{h}, \boldsymbol{\Phi}$ Funktionen $\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ und $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$

Die Problemstellung

Gesucht ist ein $\mathbf{x}$, für das gilt...

$$\begin{aligned} \mathbf{g}(\mathbf{x}) &= \mathbf{h}(\mathbf{x}), && \text{(Finden einer Lösung des Gleichungssystems)} \\ \mathbf{f}(\mathbf{x}) &= 0, && \text{(Finden einer Nullstelle der Funktion } \mathbf{f}\text{)} \\ \mathbf{x} &= \boldsymbol{\Phi}(\mathbf{x}), && \text{(Finden eines Fixpunktes der Funktion } \boldsymbol{\Phi}\text{)} \end{aligned}$$

Nullstellen und Fixpunkte im $\mathbb{R}^n$

Definition

Eine Nullstelle der Funktion $\mathbf{f} : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ ist ein Wert $\mathbf{x}$, für den gilt:

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) = 0.$$

Definition

Ein Fixpunkt der Abbildung $\boldsymbol{\Phi} : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ ist einen Wert $\mathbf{x}$, für den gilt:

$$\mathbf{x} = \boldsymbol{\Phi}(\mathbf{x}).$$

„Funktion“ oder „Abbildung“ meint in diesem Kontext dasselbe.
Bei Nullstellen schreiben wir als typischen Funktions-Namen $\mathbf{f}$, in Fixpunkt-Gleichungen heißt die Funktion meist $\boldsymbol{\Phi}$.

Fixpunkt-Iteration im $\mathbb{R}^n$

Das Grundprinzip vieler iterativer Verfahren

Gegeben

eine stetige Funktion $\mathbf{\Phi}\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ und ein Startwert $\mathbf{x}^{(0)} \in \mathbb{R}^n$.

Ergebnis

Falls konvergent, liefert die Fixpunkt-Iteration einen Fixpunkt $\mathbf{x}^\star$ von $\mathbf{\Phi}$.

Iterationsvorschrift

für $k = 0, 1, 2 \ldots$

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{\Phi}(\mathbf{x}^{(k)})$$

Viele numerische Verfahren lassen sich als Fixpunkt-Iterationen formulieren. Die Theorie der Fixpunkt-Iteration ist daher von grundlegender Bedeutung.

Gliederung 2. Vorlesung

Vektornormen: Motivation

Iterative Verfahren brauchen Abbruchbedingungen

Typische Bedingungen: Hör auf,

- wenn der Fehler klein genug ist; oder
- wenn der Funktionswert (fast) 0 ist; oder
- wenn sich Werte (fast) nicht mehr ändern.

$$|x^{(k)} - x^\star| < \epsilon, \qquad |f(x^{(k)})| < \epsilon, \qquad |x^{(k+1)} - x^{(k)}| < \epsilon$$

Wie entscheidet man, ob ein Vektor klein genug ist; oder ob zwei Vektoren sich fast nicht mehr unterscheiden?

$$\|\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^\star\| < \epsilon, \qquad \|\mathbf{f}(\mathbf{x}^{(k)})\| < \epsilon, \qquad \|\mathbf{x}^{(k+1)} - \mathbf{x}^{(k)}\| < \epsilon$$

Norm $\| \ \|$ verallgemeinert für Vektoren den Betrag $| \ |$ von Skalaren

Vektornormen: Motivation

Iterative Verfahren brauchen Abbruchbedingungen

Typische Bedingungen: Hör auf,

- wenn der Fehler klein genug ist; oder
- wenn der Funktionswert (fast) 0 ist; oder
- wenn sich Werte (fast) nicht mehr ändern.

$$|x^{(k)} - x^\star| < \epsilon, \qquad |f(x^{(k)})| < \epsilon, \qquad |x^{(k+1)} - x^{(k)}| < \epsilon$$

Wie entscheidet man, ob ein Vektor klein genug ist; oder ob zwei Vektoren sich fast nicht mehr unterscheiden?

$$\|\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^\star\| < \epsilon, \qquad \|\mathbf{f}(\mathbf{x}^{(k)})\| < \epsilon, \qquad \|\mathbf{x}^{(k+1)} - \mathbf{x}^{(k)}\| < \epsilon$$

Norm $\|\ \|$ verallgemeinert für Vektoren den Betrag $|\ |$ von Skalaren

Vektornormen

Norm $\|\ \|$ verallgemeinert Betrag $|\ |$

Eine Norm ist eine Maßzahl für die „Größe“ eines Vektors.
Für einen Vektor $\mathbf{x} = [x_1, x_2, \ldots, x_n]^T$ ist

$$\|\mathbf{x}\|_1 = \sum_{i=1}^{n} |x_i| \qquad \text{Einsnorm}$$

$$\|\mathbf{x}\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} (x_i)^2} \qquad \text{euklidische Norm, Zweinorm}$$

$$\|\mathbf{x}\|_\infty = \max_i |x_i| \qquad \text{Unendlich-Norm, Maximums-Norm}$$

In MATLAB:
$\|\mathbf{x}\|_1 =$ `norm(x,1)`, $\|\mathbf{x}\|_2 =$ `norm(x)` oder `norm(x,2)`,
$\|\mathbf{x}\|_\infty =$ `norm(x,inf)`.

Norm, formale Definition

Erinnern Sie sich an Mathematik II ?

Eine Norm im $\mathbb{R}^n$ ist eine Funktion, die jedem Vektor $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ eine nichtnegative reelle Zahl $\|\mathbf{x}\| \in \mathbb{R}_0^+$ zuordnet, wobei drei Bedingungen gelten müssen:

- Nur der Nullvektor hat Norm 0

$$\|\mathbf{x}\| = 0 \quad \Rightarrow \quad \mathbf{x} = 0$$

- Skalar α läst sich als Betrag herausheben

$$\|\alpha \cdot \mathbf{x}\| = |\alpha| \cdot \|\mathbf{x}\|$$

- Die Dreiecksungleichung

$$\|\mathbf{x} + \mathbf{y}\| \leq \|\mathbf{x}\| + \|\mathbf{y}\|$$

$\forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n, \ \forall \alpha \in \mathbb{R}$

Norm, formale Definition

Erinnern Sie sich an Mathematik II ?

Eine Norm im $\mathbb{R}^n$ ist eine Funktion, die jedem Vektor $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ eine nichtnegative reelle Zahl $\|\mathbf{x}\| \in \mathbb{R}_0^+$ zuordnet, wobei drei Bedingungen gelten müssen:

- Nur der Nullvektor hat Norm 0

$$\|\mathbf{x}\| = 0 \quad \Rightarrow \quad \mathbf{x} = 0$$

- Skalar α läst sich als Betrag herausheben

$$\|\alpha \cdot \mathbf{x}\| = |\alpha| \cdot \|\mathbf{x}\|$$

- Die Dreiecksungleichung

$$\|\mathbf{x} + \mathbf{y}\| \leq \|\mathbf{x}\| + \|\mathbf{y}\|$$

$\forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n, \; \forall \alpha \in \mathbb{R}$

Vektornormen beim Fluggepäck :-)

Ein Handgepäckstück darf maximal 55 cm × 40 cm × 23 cm groß und nicht schwerer als 8 kg sein.

$$\left\| \begin{matrix} \ell/55 \\ b/40 \\ h/23 \\ m/8 \end{matrix} \right\|_\infty \leq 1$$

Ein Gepäckstück darf maximal 158 cm (Länge + Breite + Höhe) groß sein.

$$\left\| \begin{matrix} \ell \\ b \\ h \end{matrix} \right\|_1 \leq 158$$

Norm und Distanz

Eine Norm kann auch die Distanz zwischen zwei Punkten $\mathbf{x}$ und $\mathbf{y}$ messen:

$$\operatorname{dist}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|$$

- Taxis in Manhattan messen Strecken in der 1-Norm.
  deswegen heißt 1-Norm auch Taxi- oder Manhattan-Norm
- Abstand in der Luftlinie entspricht der 2-Norm.
- Größter Unterschied in den Komponenten: ∞-Norm.

Matrixnormen

- Ein Hauptberuf von Matrizen ist, Vektoren zu multiplizieren.
- Das Ergebnis einer Matrix-Vektor-Multiplikation ist wieder ein Vektor; der ist i.allg. länger/kürzer/verdreht gegenüber Ausgangsvektor
- Eine Matrixnorm misst, wie „stark“ sie auf Vektoren wirkt.
- Eine gegebene Matrix kann Vektoren nicht beliebig stark verlängern. Es gibt für jede Matrix einen „Maximal-Verlängerungs-Faktor“

Der „Maximal-Verlängerungs-Faktor“ ist eine Matrixnorm

Matrixnormen: Beispiel

Wie stark „wirkt“ $A = \begin{pmatrix} 1 & 3 \\ 2 & 4 \end{pmatrix}$ auf verschiedene Vektoren?

Vergleichen Sie $\|\mathbf{x}\|$ mit $\|A\mathbf{x}\|$ für verschiedene $\mathbf{x}$ und verschiedene Normen.

$$\mathbf{x} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 2 \\ -1 \end{pmatrix}$$

Welcher dieser Vektoren verlängert sich am meisten

- in der 1-Norm,
- in der ∞-Norm,
- in der 2-Norm (aufwändiger zu rechnen wegen $\sqrt{\ }$)

Verschiedene Matrixnormen

Die $1-, 2-$ und ∞-Normen lassen sich von den entsprechenden Vektornormen ableiten: Sie geben für die Rechenoperation $\mathbf{y} = A \cdot \mathbf{x}$ an, um wieviel $\mathbf{y}$ gegenüber $\mathbf{x}$ maximal vergrößert wird.

$\|A\|_1$	Einsnorm: maximale Spaltenbetragssumme
$\|A\|_\infty$	Unendlich-Norm: maximale Zeilenbetragssumme

Die Zweinorm lässt sich nicht so einfach aus den Matrixelementen berechnen wie Eins- oder Unendlichnorm.

MATLAB: $\|A\|_1 =$ `norm(A,1)`, $\|A\|_2 =$ `norm(A)`, $\|A\|_\infty =$ `norm(A,Inf)`.

Matrixnorm, Definition

Kurzfassung: Eine Matrixnorm ist eine Norm

Matrizen lassen sich addieren und mit Skalaren multiplizieren. In diesem Sinn verhalten sie sich genauso wie Vektoren des $\mathbb{R}^n$.

Alles, was sich wie ein Vektor verhält, ist ein „Vektor“: Die $m \times n$-Matrizen bilden einen Vektorraum. Der Begriff „Norm“ wird genau so definiert wie die Norm von Vektoren des $\mathbb{R}^n$.

Eine Norm im $\mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^n$ ist eine Funktion, die jeder $m \times n$-Matrix A eine nichtnegative reelle Zahl $\|A\| \in \mathbb{R}_0^+$ zuordnet, wobei gilt:

- Nur die Nullmatrix hat Norm 0: $\|A\| = 0 \quad \Rightarrow \quad A = 0$
- Skalar α läst sich als Betrag herausheben: $\|\alpha \cdot A\| = |\alpha| \cdot \|A\|$
- Die Dreiecksungleichung $\|A + B\| \leq \|A\| + \|B\|$

Rechenregeln

für die 1-, 2- oder ∞- Norm

Zusätzlich zu den Norm-Axiomen

$$\|A\| = 0 \quad \Rightarrow \quad A = O$$
$$\|\alpha \cdot A\| = |\alpha| \cdot \|A\|$$
$$\|A + B\| \leq \|A\| + \|B\|$$

gelten für die 1-, 2- oder ∞- Norm auch

$$\|A \cdot B\| \leq \|A\| \cdot \|B\|$$

$$\|A \cdot \mathbf{x}\| \leq \|A\| \cdot \|\mathbf{x}\|$$

Vergleiche Absolutbetrag: $|a \cdot b| = |a| \cdot |b|$

Rechenregeln

für die 1-, 2- oder ∞- Norm

Zusätzlich zu den Norm-Axiomen

$$\|A\| = 0 \quad \Rightarrow \quad A = O$$
$$\|\alpha \cdot A\| = |\alpha| \cdot \|A\|$$
$$\|A + B\| \leq \|A\| + \|B\|$$

gelten für die 1-, 2- oder ∞- Norm auch

$$\|A \cdot B\| \leq \|A\| \cdot \|B\|$$

$$\|A \cdot \mathbf{x}\| \leq \|A\| \cdot \|\mathbf{x}\|$$

Vergleiche Absolutbetrag: $|a \cdot b| = |a| \cdot |b|$

Frobeniusnorm

. . . noch eine weitere Norm

Die Frobenius-Norm $\|A\|_F$ wird so ähnlich berechnet wie die Vektor-Zweinorm: *Quadrieren, summieren, Wurzel ziehen*

Frobenius-Norm: $$\|A\|_F = \sqrt{\sum a_{ij}^2}$$

Die Frobeniusnorm lässt sich leichter berechnen als die Matrix-Zweinorm und dient zu deren Abschätzung:

$$\|A\|_2 \leq \|A\|_F$$

Auch für $\|A\|_F$ gelten neben den Norm-Axiome noch die Rechenregeln $\|A \cdot B\|_F \leq \|A\|_F \cdot \|B\|_F$ und $\|A \cdot \mathbf{x}\|_2 \leq \|A\|_F \|\mathbf{x}\|_2$

MATLAB: $\|A\|_F = \texttt{norm(A,'fro')}$.

Frobeniusnorm

. . . noch eine weitere Norm

Die Frobenius-Norm $\|A\|_F$ wird so ähnlich berechnet wie die Vektor-Zweinorm: *Quadrieren, summieren, Wurzel ziehen*

$$\text{Frobenius-Norm:} \qquad \|A\|_F = \sqrt{\sum a_{ij}^2}$$

Die Frobeniusnorm lässt sich leichter berechnen als die Matrix-Zweinorm und dient zu deren Abschätzung:

$$\|A\|_2 \leq \|A\|_F$$

Auch für $\|A\|_F$ gelten neben den Norm-Axiome noch die Rechenregeln $\|A \cdot B\|_F \leq \|A\|_F \cdot \|B\|_F$ und $\|A \cdot \mathbf{x}\|_2 \leq \|A\|_F \|\mathbf{x}\|_2$

MATLAB: $\|A\|_F =$ `norm(A,'fro')`.

Matrixnormen (das Kleingedruckte)

Was hier dasteht, ist nicht wichtig,
wenn 's nicht dastünd', wär's nicht richtig.

Die lockere Erklärung „Matrixnorm ist maximaler Verlängerungsfaktor“ ist mathematisch korrekt für 1-, 2- und ∞-Norm, wenn Vektorlängen in den jeweiligen Normen gemessen werden.

Die Frobeniusnorm gibt nur eine obere Schranke für den Verlängerungsfaktor, wenn Vektorlängen in der 2-Norm gemessen werden.

Auch die Vorschrift $\|A\| = \max_{i,j} |a_{ij}|$ erfüllt die drei Bedingungen einer Norm, ist aber nicht immer eine obere Schranke für den Verlängerungsfaktor.

Gliederung 2. Vorlesung

Wichtige Themen zur Fixpunkt-Iteration

- Konvergenzordnung: wie rasch konvergiert eine Iteration
- Was ist eine kontrahierende Abbildung
- Wann konvergiert Fixpunktiteration
  - anschaulich erklärt
  - mathematisch exakte Konvergenzbedingung
- Was bedeutet „lokale Konvergenz“
- Anschauliche Bedeutung von $|\Phi'| < 1$

Konvergenzordnung

Angenommen, eine Iteration $\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{\Phi}(\mathbf{x}^{(k)})$ für $k = 0, 1, 2\ldots$ konvergiert zu $\mathbf{x}^\star$, und die Fehlerschranke $\epsilon^{(k)}$ schätzt den Fehler:

$$\|\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^\star\| \le \epsilon^{(k)} \ .$$

Neue Fehlerschranke mindestens um Faktor C kleiner als...

- ...alte Fehlerschranke: lineare Konvergenz (wenn $C < 1$), also

$$\epsilon^{(k+1)} \le C\,\epsilon^{(k)}$$

- ...das Quadrat des alten Fehlers: quadratische Konvergenz; typisch für Newton-Verfahren.

$$\epsilon^{(k+1)} \le C(\epsilon^{(k)})^2$$

- ...(allgemein) die p-te Potenz des alten Fehlers, $p \ge 1$: Konvergenz p-ter Ordnung. Bei Sekanten-Verfahren ist $p \approx 1.61$.

$$\epsilon^{(k+1)} \le C(\epsilon^{(k)})^p$$

Konvergenzordnung

Angenommen, eine Iteration $\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{\Phi}(\mathbf{x}^{(k)})$ für $k = 0, 1, 2 \ldots$ konvergiert zu $\mathbf{x}^\star$, und die Fehlerschranke $\epsilon^{(k)}$ schätzt den Fehler:

$$\|\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^\star\| \leq \epsilon^{(k)} \ .$$

Neue Fehlerschranke mindestens um Faktor C kleiner als...

- ...alte Fehlerschranke: lineare Konvergenz (wenn $C < 1$), also

$$\epsilon^{(k+1)} \leq C\,\epsilon^{(k)}$$

- ...das Quadrat des alten Fehlers: quadratische Konvergenz; typisch für Newton-Verfahren.

$$\epsilon^{(k+1)} \leq C(\epsilon^{(k)})^2$$

- ...(allgemein) die p-te Potenz des alten Fehlers, $p \geq 1$: Konvergenz p-ter Ordnung. Bei Sekanten-Verfahren ist $p \approx 1.61$.

$$\epsilon^{(k+1)} \leq C(\epsilon^{(k)})^p$$

Konvergenzordnung

Angenommen, eine Iteration $\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{\Phi}(\mathbf{x}^{(k)})$ für $k = 0, 1, 2 \ldots$ konvergiert zu $\mathbf{x}^\star$, und die Fehlerschranke $\epsilon^{(k)}$ schätzt den Fehler:

$$\|\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^\star\| \leq \epsilon^{(k)} \ .$$

Neue Fehlerschranke mindestens um Faktor C kleiner als...

- ...alte Fehlerschranke: lineare Konvergenz (wenn $C < 1$), also

$$\epsilon^{(k+1)} \leq C\,\epsilon^{(k)}$$

- ...das Quadrat des alten Fehlers: quadratische Konvergenz; typisch für Newton-Verfahren.

$$\epsilon^{(k+1)} \leq C(\epsilon^{(k)})^2$$

- ...(allgemein) die p-te Potenz des alten Fehlers, $p \geq 1$: Konvergenz p-ter Ordnung. Bei Sekanten-Verfahren ist $p \approx 1.61$.

$$\epsilon^{(k+1)} \leq C(\epsilon^{(k)})^p$$

Konvergenzordnung

Angenommen, eine Iteration $\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{\Phi}(\mathbf{x}^{(k)})$ für $k = 0, 1, 2 \ldots$ konvergiert zu $\mathbf{x}^\star$, und die Fehlerschranke $\epsilon^{(k)}$ schätzt den Fehler:

$$\|\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^\star\| \leq \epsilon^{(k)} \ .$$

Neue Fehlerschranke mindestens um Faktor C kleiner als...

- ...alte Fehlerschranke: lineare Konvergenz (wenn $C < 1$), also

$$\epsilon^{(k+1)} \leq C\,\epsilon^{(k)}$$

- ...das Quadrat des alten Fehlers: quadratische Konvergenz; typisch für Newton-Verfahren.

$$\epsilon^{(k+1)} \leq C(\epsilon^{(k)})^2$$

- ...(allgemein) die p-te Potenz des alten Fehlers, $p \geq 1$: Konvergenz p-ter Ordnung. Bei Sekanten-Verfahren ist $p \approx 1.61$.

$$\epsilon^{(k+1)} \leq C(\epsilon^{(k)})^p$$

Konvergenzordnung

gibt an, wie rasch die Genauigkeit zunimmt

Faustregeln

- Lineare Konvergenz braucht eine fixe Anzahl von Schritten pro gültiger Stelle. Je kleiner C, desto rascher nimmt Genauigkeit zu.
- Quadratische Konvergenz verdoppelt pro Schritt (ungefähr, hängt auch von C ab) die Zahl der korrekten Dezimalstellen. Beispiel:

$$\begin{aligned} \text{Fehler } \epsilon^{(k)} < 10^{-3} &\Rightarrow \epsilon^{(k+1)} < C \cdot (10^{-3})^2 = C \cdot 10^{-6} \\ \epsilon^{(k)} < 10^{-6} &\Rightarrow \epsilon^{(k+1)} < C \cdot (10^{-6})^2 = C \cdot 10^{-12} \end{aligned}$$

- Sekanten-Regel: etwa 60% mehr korrekte Stellen pro Schritt.

Die Faustregeln für Newton- und Sekantenverfahren gelten nur bei genügend kleinen Fehlern; umso besser, je mehr Stellen bereits korrekt sind.

Konvergenzordnung

Definition

Ein Iterationsverfahren

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

mit Iterationsfunktion $\mathbf{\Phi} : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$, Fixpunkt $\mathbf{x}^\star \in \mathbb{R}^n$ und Fehlerschranken $||\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^\star|| \leq \epsilon^k$ heißt lokal konvergent von (mindestens) p-ter Ordnung ($p \geq 1$), wenn für alle Startwerte $\mathbf{x}^{(0)}$, die genügend nahe an $\mathbf{x}^\star$ liegen, gilt

$$\epsilon^{(k+1)} \leq C \left[\epsilon^{(k)}\right]^p$$

und $C < 1$, falls $p = 1$.

Kontrahierende Abbildung $\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$

Bildpunkte liegen näher beisammen als Originalpunkte

Definition

Die Funktion $\mathbf{\Phi} : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ heißt eine kontrahierende Abbildung, wenn für alle Punkte $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$ die Bildpunkte $\mathbf{\Phi}(\mathbf{x}), \mathbf{\Phi}(\mathbf{y})$ näher beisammen liegen:

$$\|\mathbf{\Phi}(\mathbf{x}) - \mathbf{\Phi}(\mathbf{y})\| \leq C\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\| \ , \quad C < 1$$

(man müsste noch dazu sagen, welche Norm man verwendet – man kann jene wählen, mit der man am einfachsten rechnet)

Verallgemeinerung: $\mathbf{\Phi}$ kann auch nur in einem Teilbereich $B \subset \mathbb{R}^n$ kontrahierend wirken.

Kontrahierende Abbildung $\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$

Bildpunkte liegen näher beisammen als Originalpunkte

Definition

Die Funktion $\mathbf{\Phi} : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ heißt eine kontrahierende Abbildung, wenn für alle Punkte $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$ die Bildpunkte $\mathbf{\Phi}(\mathbf{x}), \mathbf{\Phi}(\mathbf{y})$ näher beisammen liegen:

$$\|\mathbf{\Phi}(\mathbf{x}) - \mathbf{\Phi}(\mathbf{y})\| \leq C\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\| \,, \quad C < 1$$

(man müsste noch dazu sagen, welche Norm man verwendet – man kann jene wählen, mit der man am einfachsten rechnet)

Verallgemeinerung: $\mathbf{\Phi}$ kann auch nur in einem Teilbereich $B \subset \mathbb{R}^n$ kontrahierend wirken.

Fixpunkt-Iteration konvergiert für kontrahierende Abbildungen

Beweis-Idee

- Unterschiedliche Punkte liegen nach Anwendung von $\mathbf{\Phi}$ näher beisammen
- Startwert und Fixpunkt liegen nach Anwendung von $\mathbf{\Phi}$ näher beisammen
- Fortgesetzte Anwendung bringt Werte immer näher zum Fixpunkt

Fixpunkt-Iteration konvergiert für kontrahierende Abbildungen

Die Funktion $\mathbf{\Phi} : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ besitze einen Fixpunkt $\mathbf{x}^\star$.

Sei ferner B ein Bereich um den Fixpunkt $\mathbf{x}^\star$ in der Form $B = \{\mathbf{x} : \|\mathbf{x}^\star - \mathbf{x}\| < r\}$, sodass $\mathbf{\Phi}$ in B eine kontrahierende Abbildung ist. Es gilt also

$$\|\mathbf{\Phi}(\mathbf{x}) - \mathbf{\Phi}(\mathbf{y})\| \leq C\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\| \ , \quad C < 1$$

für alle $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in B$.

Dann konvergiert die Fixpunkt-Iteration $\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{\Phi}(\mathbf{x}^{(k)})$ mindestens linear gegen $\mathbf{x}^\star$ für alle $\mathbf{x}^{(0)} \in B$.

Bemerkungen

Die Formulierung des Satzes auf der vorigen Folie setzt die Existenz eines Fixpunktes voraus. Dadurch wird der Konvergenz-Beweis kurz und schmerzlos.

Eine etwas allgemeinere Formulierung und ein technisch aufwändigerer Beweis zeigen, dass aus der Kontraktions-Eigenschaft auch schon die Existenz und Eindeutigkeit eines Fixpunktes folgen. Das ist der berühmte Fixpunktsatz von Banach.

Einfache Konvergenzbedingung für $\phi\colon \mathbb{R} \to \mathbb{R}$

Eine direkte Folgerung aus dem Konvergenz-Satz für kontrahierende Abbildungen

Das Fixpunktverfahren konvergiert lokal, falls $|\phi'(x^\star)| < 1$.

Genauer:
Ist $\phi(x)$ in einer Umgebung des Fixpunktes $x^\star$ stetig differenzierbar und $|\phi'(x^\star)| < 1$, so konvergiert die Fixpunkt-Iteration

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

mindestens linear mit $C \approx |\phi'(x^\star)|$ gegen $x^\star$ für alle $x^{(0)}$ in der Nähe des Fixpunktes.

Der Fehler nimmt $\approx$ um den Faktor C pro Iteration ab

Interpretation der Bedingung $|\phi'(x^\star)| < 1$.

- Locker gesagt: Fixpunkt-Iteration konvergiert,
  wenn $\phi(x)$ in einer Umgebung „nicht besonders stark“ von x abhängt.
- Ableitung ϕ' misst, wie stark sich $\phi(x)$ ändert, wenn sich x ändert.
- Der Konvergenzsatz quantifiziert, „wie stark“ ϕ von x abhängen darf, damit Iteration konvergiert.
- Bedingung $|\phi'(x^\star)| < 1$ bedeutet: ϕ ist kontrahierende Abbildung (zumindest in einer Umgebung von $x^\star$)

Achtung:

Wahl des Anfangspunkt ist wichtig! Ist im Interval $[x^*, x]$ die Ableitung teilweise $|\phi'|$ größer als eins, muss das Verfahren nicht konvergieren!

Beispiel: $\phi(x) = \frac{9}{4}x(1-x)$

Zwei Fixpunkte: $x_1^\star = 0, x_2^\star = \frac{5}{9}$.
Einsetzen der Fixpunkte in $\phi'(x) = \frac{9}{4}(1-2x)$ liefert

$$|\phi'(0)| = \frac{9}{4} > 1 \qquad \left|\phi'\left(\frac{5}{9}\right)\right| = \frac{1}{4} < 1$$

Folgerungen:

- Für Startwerte in der Nähe von $x_2^\star = \frac{5}{9}$ konvergiert die Fixpunkt-Iteration.
- $\phi(x)$ ändert sich dort nur etwa $1/4$ so stark, wenn sich x-Werte ändern.
- Ein Fehler im Eingabewert bewirkt einen $\approx 1/4$ so großen Fehler im Resultat.
- Wiederholtes Einsetzen macht den Fehler immer kleiner

Fixpunkt-Iteration konvergiert für $\|D_\phi\| < 1$

Die Matrix der partiellen Ableitungen

$$D_\phi = \begin{bmatrix} \dfrac{\partial \phi_1}{\partial x_1} & \dfrac{\partial \phi_1}{\partial x_2} & \cdots & \dfrac{\partial \phi_1}{\partial x_n} \\ \dfrac{\partial \phi_2}{\partial x_1} & \dfrac{\partial \phi_2}{\partial x_2} & \cdots & \dfrac{\partial \phi_2}{\partial x_n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \dfrac{\partial \phi_n}{\partial x_1} & \dfrac{\partial \phi_n}{\partial x_2} & \cdots & \dfrac{\partial \phi_n}{\partial x_n} \end{bmatrix}$$

heißt die Jacobi-Matrix der Abbildung $\mathbf{\Phi} : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$. Ist in einem Fixpunkt von $\mathbf{\Phi}$ die Norm[1] $\|D_\phi\| < 1$, dann konvergiert die Fixpunkt-Iteration für Startwerte in einer Umgebung des Fixpunktes.

[1] 1-, 2-, ∞- oder F-Norm

Jacobi-Matrix D_f verallgemeinert Ableitung f'

Um welches Δf ändern sich die Funktionswerte, wenn sich die x-Werte um Δx ändern?

Ableitung misst Änderung Funktionswerte im Verhältnis zu Änderung Eingabewerte

Ableitung f' einer Funktion $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$

$$\Delta f = f' \cdot \Delta x \quad (+\text{Terme höherer Ordnung in } \Delta x)$$

Mehrdimensionale Verallgemeinerung:

Matrix D_f der part. Ableitungen von $\mathbf{f} : \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}^n$

Zusammenhang Input-Änderungs-Vektor $\Delta\mathbf{x} \to$ Änderungs-Vektor $\Delta\mathbf{f}$.

$$\Delta\mathbf{f} = D_f \cdot \Delta\mathbf{x} \quad (+\text{Terme höherer Ordnung in } \|\Delta\mathbf{x}\|)$$

Jacobi-Matrix D_f verallgemeinert Ableitung f'

Um welches Δf ändern sich die Funktionswerte, wenn sich die x-Werte um Δx ändern?

Ableitung misst Änderung Funktionswerte im Verhältnis zu Änderung Eingabewerte

Ableitung f' einer Funktion $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$

$$\Delta f = f' \cdot \Delta x \quad (+\text{Terme höherer Ordnung in } \Delta x)$$

Mehrdimensionale Verallgemeinerung:

Matrix D_f der part. Ableitungen von $\mathbf{f} : \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}^n$

Zusammenhang Input-Änderungs-Vektor $\Delta\mathbf{x} \to$ Änderungs-Vektor $\Delta\mathbf{f}$.

$$\Delta\mathbf{f} = D_f \cdot \Delta\mathbf{x} \quad (+\text{Terme höherer Ordnung in } \|\Delta\mathbf{x}\|)$$

Beispiel im Skriptum

Seite 21

Die Funktion $\mathbf{\Phi}$ ist hier ein Vektor aus zwei reellwertigen Funktionen ϕ_1 und ϕ_2, der Vektor $\mathbf{x}$ hat zwei Komponenten x_1 und x_2.

$$\mathbf{\Phi}(\mathbf{x}) = \left[\begin{array}{c} \phi_1(x_1, x_2) \\ \phi_2(x_1, x_2) \end{array} \right] = \left[\begin{array}{c} \frac{1}{4}(x_2 - x_1 x_2 + 1) \\ \frac{1}{6}(x_1 - \log(x_1 x_2) + 2) \end{array} \right]$$

$$D_\phi = \begin{bmatrix} \frac{-x_2}{4} & \frac{1-x_1}{4} \\ \frac{1-\frac{1}{x_1}}{6} & \frac{-1}{6\,x_2} \end{bmatrix}$$

$$\text{Ausgewertet für } \mathbf{x} = \begin{bmatrix} 0,35 \\ 0,64 \end{bmatrix} (\approx \text{ Fixpunkt}) \; D_\phi = \begin{bmatrix} -0,160 & 0,163 \\ -0,310 & -0,260 \end{bmatrix}$$

$\|D_\phi\|_1 = 0,4695 \quad \|D_\phi\|_2 = 0,4051 \quad \|D_\phi\|_\infty = 0,5699 \quad \|D_\phi\|_F = 0,4644$

Gliederung 2. Vorlesung

Newton-Verfahren für nichtlineare Systeme

Gegeben: eine differenzierbare Funktion $\mathbf{f} : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$, ein Startwert $\mathbf{x}^{(0)}$.
Gesucht: eine Nullstelle von $\mathbf{f}$.

Iterationsvorschrift

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + \Delta\mathbf{x}^{(k)}$$

$$\text{mit} \quad \Delta\mathbf{x}^{(k)} \quad \text{als Lösung von} \quad D_f(\mathbf{x}^{(k)})\Delta\mathbf{x}^{(k)} = -\mathbf{f}(\mathbf{x}^{(k)})$$

Quadratische Konvergenz bei Startwerten nahe einfachen Nullstellen.

Siehe Abschnitt 2.5 im Skript!

Beispiel:

Skript Seite 26

Gesucht ist eine Nullstelle von $\mathbf{f}$ in der Nähe eines Startwertes $\mathbf{x}^{(0)}$.
Die Funktion $\mathbf{f}$ und die Jacobi-Matrix D_f sind hier

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} 4x - y + xy - 1 \\ -x + 6y + \log(xy) - 2 \end{bmatrix}, \qquad D_f = \begin{bmatrix} 4 + y & -1 + x \\ -1 + \frac{1}{x} & 6 + \frac{1}{y} \end{bmatrix}.$$

Newton-Verfahren: Varianten

Gedämpftes Newton-Verfahren

reduziert den Korrekturvektor um einen Faktor $\omega < 1$.

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + \omega \Delta \mathbf{x}^{(k)}$$

Verlässlichere Konvergenz bei schlechten Startwerten – aber nur linear.

Vereinfachtes Newton-Verfahren

wertet die Jacobi-Matrix nicht für jeden Schritt erneut aus. Schnellere Rechnung, aber nur lineare Konvergenz.

Die Lösung des Systems $D_f(\mathbf{x}^{(k)})\Delta\mathbf{x}^{(k)} = -\mathbf{f}(\mathbf{x}^{(k)})$ ist rechenaufwändig. Sobald Näherung einigermaßen brauchbar: Speichere D_f und behalte sie für die restlichen Schritte bei.

(Über Rechenaufwand und effizientes Lösen linearer Gleichungssysteme werden wir in den nächsten Einheiten sprechen. . .)

Muster-Prüfungsaufgabe

Gegeben sei das nichtlineare Gleichungssystem

$$\begin{aligned} -\frac{x^3}{48} + y^2 x + 2 &= 0 \\ x^3 - x + y^3 - y - 1 &= 0 \end{aligned}$$

1. Wie lautet die Jacobi-Matrix für das gegebene Gleichungssystem?
2. Ausgehend von der Näherungslösung $x^{(0)} = 0;\; y^{(0)} = 1$ bestimme man mit Hilfe des Newton-Raphson Verfahrens $x^{(2)}$ und $y^{(2)}$! (Wenn Sie korrekt rechnen, lassen sich auftretende lineare Gleichungssysteme „einfach“ lösen)
3. Verwenden Sie nun für den Schritt 2 das vereinfachte Newton-Verfahren.

Lösung nichtlinearer Gleichungssysteme: Übersicht der Methoden

- Fixpunkt-Iteration: Allgemeine Formulierung; kein Rezept, um günstiges $\mathbf{\Phi}$ zu finden.
- Newton-Raphson: Standard-Verfahren. Varianten:
  - gedämpft: langsamere, aber verlässlichere Konvergenz.
  - fixe Jacobi-Matrix: lin. Konvergenz, weniger Rechenaufwand
  - genäherte Jacobi-Matrix: wenn exakte Ableitungen nicht verfügbar sind, Näherung durch Differenzenquotienten.
- MATLAB Optimization Toolbox: `fsolve` löst nichtlineare Gleichungssysteme — mehrdimensionale Verallgemeinerung von `fzero`.

Gliederung 2. Vorlesung

Ein Prüfungsbeispiel

Die Funktion

$$\phi(x) = \frac{18 - 30\,x + 23\,x^2 - 4\,x^3}{9}$$

hat Fixpunkte für $x = 3/4, 2$ und 3.
Überprüfen Sie mithilfe der Konvergenzsätze für die verschiedenen Fixpunkte: Konvergiert die Fixpunkt-Iteration $x^{(k+1)} = \phi(x^{(k)})$, und wenn ja, mit welcher Konvergenzordnung?

Prüfungsbeispiel

Gegeben sei die Funktion

$$\phi(x) = ax(1-x) \qquad \text{für ein } a \neq 0$$

1. Zeigen Sie: $x = 0$ und $x = (a-1)/a$ sind Fixpunkte von ϕ.
2. In welchem Bereich muss a liegen, damit eine Fixpunkt-Iteration lokal zu $x = 0$ konvergiert?
3. In welchem Bereich muss a liegen, damit eine Fixpunkt-Iteration lokal nach
   $x = (a-1)/a$ konvergiert?
4. Für welchen Wert von a folgt lokal quadratische Konvergenz zum Fixpunkt $x = (a-1)/a$?

Prüfungsbeispiel

Gegeben sei die Funktion $f(x) = x^3 - 1$.

1. Wie lautet die reelle Nullstelle von f?
2. Zeigen Sie: Das Newton-Verfahren zur Nullstellenbestimmung führt auf die Iterationsvorschrift

$$x = \frac{1}{3\,x^2} + \frac{2\,x}{3}$$

3. Leiten Sie die Konvergenzordnung dieser Iteration her.