Vorlesung Numerische Mathematik 1

Kapitel 5: Numerische Lösung **nichtlinearer** Gleichungssysteme

20. November 2017

Zürcher Hochschule
für Angewandte Wissenschaften

Gliederung des Kapitels

- In Kapitel 3 haben wir Verfahren kennengelernt, die Nullstellen nichtlinearer Funktionen mit einer Veränderlichen zu bestimmen, also die Gleichung $f(x_0) = 0$ zu lösen für ein nichtlineares $f : \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}$.
- In Kapitel 4 behandelten wir dann den Fall von Systemen von n linearen Gleichungen für n Unbekannte, was man als Nullstellenbestimmung einer linearen Funktion $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}^n$ auffassen kann.
- In diesem Kapitel geht es nun um die Verallgemeinerung bzw. Anwendung der in Kap. 3 und 4 kennengelernten Verfahren auf Systeme von nichtlinearen Gleichungen, also um die Nullstellenbestimmung von nichtlinearen Funktionen $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}^n$.

Lernziele

- Sie kennen die Definition einer Funktion mit mehreren Variablen und wissen, wie diese grafisch dargestellt werden kann.
- Sie können die partiellen Ableitungen erster Ordnung einer Funktion mit mehreren Variablen definieren und berechnen.
- Sie kennen die Definition der Jacobi-Matrix und können diese für eine gegebene Funktion berechnen. Sie können damit Funktionen linearisieren.
- Sie können die in diesem Kapitel vorgestellten Algorithmen auf nichtlineare Gleichungssysteme anwenden und implementieren.
- Sie können die Unterschiede zwischen den Algorithmen erklären.

Einleitendes Beispiel

Vorbemerkung

- Zur historischen Entwicklung der Theorie nichtlinearer Gleichungssysteme ist in der Literatur wenig zu finden.
- Einer der Gründe mag sein, dass nichtlineare Gleichungssysteme im Gegensatz zu linearen Gleichungssystemen wesentlich komplexer sein können und Aussagen über die Lösbarkeit oder Konvergenz i.d.R. stark vom spezifischen Problem abhängig sind.
- Allgemeine Aussagen der Art, wie sie für lineare Gleichungssystemen möglich sind, sind für nichtlineare Gleichungssysteme also wesentlich schwieriger.
- Nichtlineare Gleichungssysteme treten fast automatisch bei der Beschreibung und Lösung realer (häufig zeitabhängiger) Prozesse in Natur und Technik auf, die i.d.R. in Form von nichtlinearen Differentialgleichungen beschrieben werden (z.B. Ausbreitung elektromagnetischer Wellen im dreidimensionalen Raum).

Einleitendes Beispiel

- Als einführendes Beispiel betrachten wir ein einfaches System mit zwei nichtlinearen Gleichungen und zwei Variablen (aus [6]):

$$\begin{aligned} f_1(x_1,x_2) &= x_1^2+x_2-11=0 \\ f_2(x_1,x_2) &= x_1+x_2^2-7=0 \end{aligned}$$

Gesucht sind die Lösungen des Gleichungssystems. Diese lassen sich interpretieren als die Nullstellen der Funktion $\boldsymbol{f}:\mathbb{R}^2 \longrightarrow \mathbb{R}^2$ gemäss

$$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}) = \begin{pmatrix} f_1(x_1,x_2) \\ f_2(x_1,x_2) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1^2+x_2-11 \\ x_1+x_2^2-7 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Einleitendes Beispiel

- Offensichtlich lässt sich ein solches System nicht in der Form $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$ darstellen, wie wir es von linearen Gleichungssystemen her kennen.
- Geometrisch lassen sich die Lösungen in diesem Beispiel bestimmen, indem wir die durch $f_1(x_1, x_2) = 0$ und $f_2(x_1, x_2) = 0$ implizit definierten Kurven in ein (x_1, x_2)-Koordinatensystem einzeichnen und die Schnittpunkte bestimmen, wie auf der folgenden Slide dargestellt.
- Dabei lautet die explizite Darstellung der Kurven

$$\begin{aligned} x_2 &= -x_1^2 + 11 \\ x_2 &= \sqrt{-x_1 + 7} \end{aligned}$$

und die Schnittpunkte sind

$$\bar{\boldsymbol{x}}_1 = \begin{pmatrix} 3 \\ 2 \end{pmatrix}, \bar{\boldsymbol{x}}_2 = \begin{pmatrix} -2.8 \\ 3.2 \end{pmatrix}, \bar{\boldsymbol{x}}_3 = \begin{pmatrix} -3.8 \\ -3.3 \end{pmatrix}, \bar{\boldsymbol{x}}_4 = \begin{pmatrix} 3.4 \\ -1.7 \end{pmatrix}$$

Einleitendes Beispiel

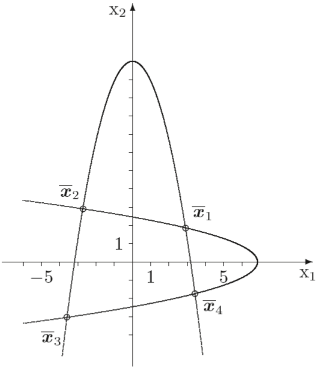


Abbildung: Grafische Darstellung der durch $f_1(x_1, x_2) = 0$ und $f_2(x_1, x_2) = 0$ implizit definierten Kurven sowie ihre Schnittpunkten (aus [6]).

Funktionen mit mehreren Variablen

Funktionen mit mehreren Variablen

- Wie wir bei diesem einführenden Beispiel gesehen haben, ist für die numerische Lösung von nichtlinearen Gleichungssystemen das Verständnis von Funktionen mit mehreren Variablen unabdingbar.
- Deshalb wollen wir die wichtigsten Begriffe, insbesondere denjenigen der partiellen Ableitung, in diesem Abschnitt nochmals in Erinnerung rufen bzw. neu einführen, sofern nötig

Definition

Die Definition für Funktionen

$$\begin{aligned} f : \mathbb{R} &\longrightarrow \mathbb{R} \\ x &\mapsto y = f(x) \end{aligned}$$

mit der abhängigen Variablen y und der unabhängigen Variablen x kennen wir bereits aus der Analysis und erweitern Sie analog auf Funktionen mit mehreren Variablen:

Definition

Definition 5.1: Funktionen mit mehreren Variablen

- Unter einer Funktion mit n unabhängigen Variablen $x_1,\dots,x_n$ und einer abhängigen Variablen y versteht man eine Vorschrift, die jedem geordneten Zahlentupel $(x_1,x_2,\dots,x_n)$ aus einer Definitionsmenge $D\subset\mathbb{R}^n$ genau ein Element y aus einer Wertemenge $W\subset\mathbb{R}$ zuordnet. Symbolische Schreibweise:

$$\begin{aligned} f:\ D\subset\mathbb{R}^n &\longrightarrow W\subset\mathbb{R}\\ (x_1,x_2,\dots,x_n) &\mapsto y=f(x_1,x_2,\dots,x_n)\end{aligned}$$

- Da das Ergebnis $y\in\mathbb{R}$ ein Skalar (eine Zahl) ist, redet man auch von einer **skalarwertigen** Funktion.

Definition

Bemerkungen:

- Die obige Definition lässt sich einfach erweitern auf beliebige **vektorwertige** Funktionen, die nicht einen Skalar, sondern einen Vektor als Wert zurückgeben:

$$\boldsymbol{f} : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}^m,$$

mit

$$\boldsymbol{f}(x_1, \ldots, x_n) = \begin{pmatrix} y_1 = f_1(x_1, x_2, \ldots, x_n) \\ y_2 = f_2(x_1, x_2, \ldots, x_n) \\ \vdots \\ y_m = f_m(x_1, x_2, \ldots, x_n) \end{pmatrix},$$

wobei die m Komponenten $f_i : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ $(i = 1, \ldots, m)$ von f wieder skalarwertige Funktionen sind, entsprechend Def. 5.1.

Definition

Bemerkungen:

- Wie bei einem Vektor $\boldsymbol{x}$ stellen wir zur besseren Unterscheidbarkeit vektorwertige Funktionen $\boldsymbol{f}$ fett gedruckt dar, im Gegensatz zu einem Skalar x und einer skalarwertigen Funktion f.
- Wir werden uns bei der Lösung nichtlinearer Gleichungssysteme auf vektorwertige Funktionen $\boldsymbol{f} : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}^n$ konzentrieren.

Numerik 1, Kapitel 5

Einleitendes Beispiel

Funktionen mit mehreren Variablen

Definition

Darstellungsformen

Partielle Ableitungen

Linearisierung

Problemstellung

Newton--Verfahren

Quadratisch--konvergentes Newton--Verfahren

Vereinfachtes Newton--Verfahren

Gedämpftes Newton--Verfahren

- Addition und Multiplikation:
  Wir können die Addition (bzw. Subtraktion) und die Multiplikation (bzw. Division) auffassen als skalarwertige Funktionen $f : \mathbb{R}^2 \longrightarrow \mathbb{R}$ mit

$$\begin{aligned} f(x,y) &= x+y \\ g(x,y) &= x/y \end{aligned}$$

- Ohmsches Gesetz:
  - Die an einem ohmschen Widerstand R abfallende Spannung U hängt vom Widerstand R und der Stromstärke I gemäss dem ohmschen Gesetz $U = R \cdot I$ ab.
  - Also haben wir für die abhängige Variable $U = f(R, I) = RI$ die skalarwertige Funktion $f : \mathbb{R}^2 \longrightarrow \mathbb{R}$ mit den unabhängigen Variablen R und I. Häufig schreibt man auch direkt

$$U = U(R, I) = R \cdot I$$

und bringt dadurch die Abhängigkeit der Variable U von den unabhängigen Variablen R und I zum Ausdruck, wie wir es auch bereits vom eindimensionalen Fall kennen, z.B. $y = y(x)$.

Definition
Beispiele 5.1

- Reihenschaltung von Widerständen:
  Bei der Reihenschaltung von n ohmschen Widerständen $R_1, R_2, ..., R_n$ ergibt sich der Gesamtwiderstand R gemäss

$$R = R(R_1, R_2, ..., R_n) = R_1 + R_2 + ... + R_n$$

- Vektorwertige Funktionen:
  Im einleitenden Beispiel in Kap. 5.1 haben wir bereits eine vektorwertige nichtlineare Funktion $\boldsymbol{f} : \mathbb{R}^2 \longrightarrow \mathbb{R}^2$ kennengelernt. Ein weiteres Beispiel für $\boldsymbol{f} : \mathbb{R}^3 \longrightarrow \mathbb{R}^4$ ist

$$\boldsymbol{f}(x_1, x_2, x_3) = \begin{pmatrix} x_1^2 + x_2^2 \\ x_1^2 + x_3^2 \\ x_2^2 + x_3^2 \\ x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 \end{pmatrix},$$

Definition
Aufgabe 5.1

1. Geben Sie je ein konkretes (nicht zu kompliziertes) Beispiel einer skalarwertigen Funktion $f : \mathbb{R}^3 \longrightarrow \mathbb{R}$ sowie einer vektorwertigen Funktion $\boldsymbol{g} : \mathbb{R}^4 \longrightarrow \mathbb{R}^3$ an.
2. Geben sie die lineare Funktion $\boldsymbol{f} : \mathbb{R}^3 \longrightarrow \mathbb{R}^3$ an, für die die Lösung x des linearen Gleichungssystems

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \text{ mit } \boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 4 & -1 & 1 \\ -2 & 5 & 1 \\ 1 & -2 & 5 \end{pmatrix} \text{ und } \boldsymbol{b} = \begin{pmatrix} 5 \\ 11 \\ 12 \end{pmatrix}$$

gerade $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{0}$ ergibt.

Darstellungsformen

- Insbesondere bei der Interpretation von Resultaten einer Berechnung oder Messung ist eine geeignete Darstellungsform der Daten oft entscheidend für das eigene Verständnis und das Verständnis anderer.
- Während Funktionen mit einer unabhängigen Variablen noch einfach darstellbar sind, wird es bei Funktionen mehrerer Variablen schnell schwierig und unübersichtlich.
- Wir gehen hier auf die wichtigsten Darstellungsformen ein, ohne Anspruch auf Vollständigkeit.

Darstellungsformen: Analytisch

Die Funktion liegt in Form einer Gleichung vor. Man unterscheidet:

- Explizite Darstellung: die Funktionsgleichung ist nach einer Variablen aufgelöst

$$y = f(x_1, x_2, \ldots, x_n)$$

  Beispiel: $y = 2 \cdot e^{x_1^2 + x_2^2}$

- Implizite Darstellung: die Funktionsgleichung ist nicht nach einer Variablen aufgelöst (deshalb handelt es sich hier um eine Funktion mit nur $n-1$ unabhängigen Variablen ... warum?).

$$F(x_1, x_2, \ldots, x_n) = 0$$

  Beispiel: $x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 - 1 = 0$

Darstellungsformen: Tabelle

- Betrachten wir den Fall $f : \mathbb{R}^2 \longrightarrow \mathbb{R}$. Setzt man in die (als bekannt) vorausgesetzte Funktionsgleichung $z = f(x, y)$ für die beiden unabhängigen Variablen x und y der Reihe nach bestimmte Werte ein, so erhält man eine Wertetabelle bzw. Matrix (siehe Abb. nächste Slide).

Darstellungsformen: Tabelle

2. unabhängige Variable y

1. unabhängige Variable x

$x \backslash y$	y_1	y_2	$\dots$	y_k	$\dots$	y_n
x_1	z_{11}	z_{12}	$\dots$	z_{1k}	$\dots$	z_{1n}
x_2	z_{21}	z_{22}	$\dots$	z_{2k}	$\dots$	z_{2n}
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\dots$	$\vdots$	$\dots$	$\vdots$
x_i	z_{i1}	z_{i2}	$\dots$	z_{ik}	$\dots$	z_{in}
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\dots$	$\vdots$	$\dots$	$\vdots$
x_m	z_{m1}	z_{m2}	$\dots$	z_{mk}	$\dots$	z_{mn}

← i-te Zeile

↑ k-te Spalte

Abbildung: Wertetabelle für $z = f(x, y)$ für verschiedene Werte von x und y (aus [8]).

Darstellungsformen: Grafisch

- Wir beschränken uns hier auf skalarwertige Funktionen mit zwei unabhängigen Variablen $f : \mathbb{R}^2 \longrightarrow \mathbb{R}$, für die es noch anschauliche grafische Darstellungsmöglichkeiten gibt.
- Dazu betrachten wir die Funktion $z = f(x, y)$ in einem dreidimensionalen kartesischen Koordinatensystem mit den Koordinatenachsen x, y, z.

Darstellungsformen: Grafisch

- Darstellung einer Funktion als Fläche im Raum:
  - Die Funktion f ordnet jedem Punkt $(x, y) \in D$ in der Ebene einen Wert $z = f(x, y)$ zu, der als Höhenkoordinate verstanden werden kann.
  - Durch die Anordnung der Punkte $(x, y, f(x, y))$ im dreidimensionalen Koordinatensystem wird eine über dem Definitionsbereich D liegende Fläche ausgezeichnet (siehe Abb. auf nächster Slide).

Darstellungsformen: Grafisch

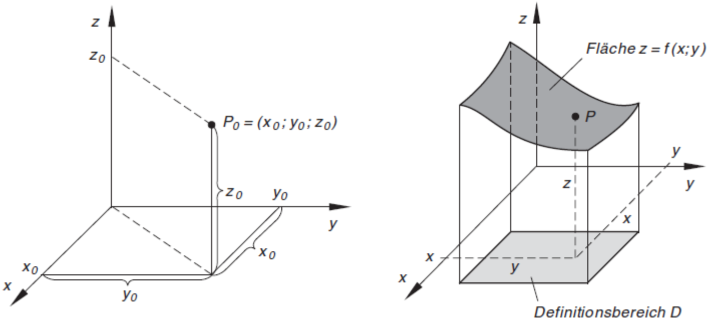
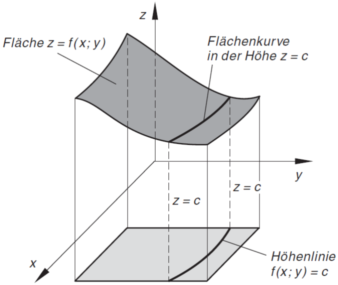


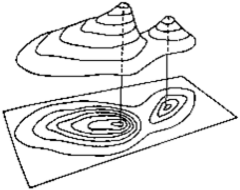
Abbildung: Links: kartesische Koordinaten eines Raumpunktes. Rechts: Darstellung einer Funktion $z = f(x, y)$ als Fläche im Raum (aus [8]).

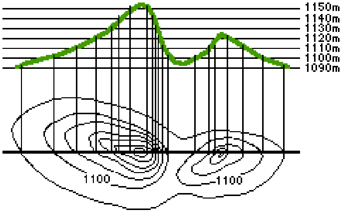
Darstellungsformen: Grafisch

- Schnittkurvendiagramm
  - Wird die Fläche $z = f(x, y)$ bei einer konstanten Höhe $z = const.$ geschnitten, ergibt sich eine Schnittkurve.
  - Wird diese in die $(x, y)-$Ebene projiziert, spricht man von einer Höhenlinie bzw. bei der Abbildung von einem Höhenliniendiagramm., wie wir es z.B. von Wanderkarten her kennen.
  - Natürlich kann man auch andere Schnitte als $z = const.$ (Schnittebene parallel zur $(x, y)-$Ebene) wählen, z.B. $x = const.$ (Schnittebene parallel zur $(y, z)-$Ebene) oder $y = const.$ (Schnittebene parallel zur $(x, z)-$Ebene). Siehe Abb. auf nächster Slide.

Darstellungsformen: Grafisch







Partielle Ableitungen

- Für eine Funktion $f : \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}$ mit einer Variablen ist die Ableitung an der Stelle x_0 bekanntlich definiert als

$$f'(x_0) = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{f(x_0 + \Delta x) - f(x_0)}{\Delta x},$$

aus geometrischer Sicht entspricht dies der Steigung $m = f'(x_0)$ der im Punkt $(x_0, f(x_0))$ angelegten Kurventangente t mit der Tangentengleichung

$$t(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0)$$

Partielle Ableitungen

- Wir werden die Definition der Ableitung jetzt erweitern auf Funktionen mit mehreren unabhängigen Variablen.
- Die Idee dabei ist, jede unabhängige Variable einzeln zu betrachten und sämtliche anderen unabhängigen Variablen "einzufrieren" (d.h. als festgelegte Parameter zu behandeln).
- So kann man ein $n-$dimensionales Problem auf n eindimensionale Probleme reduzieren und die obige Definition der Ableitung verwenden.

Partielle Ableitungen

- Betrachten wir der Einfachheit halber eine Funktion mit zwei unabhängigen Variablen

$$z = f(x, y)$$

  und auf der dadurch definierten Fläche den Punkt P mit den Koordinaten (x_0, y_0, z_0), wobei $z_0 = f(x_0, y_0)$.
- Wir legen durch den Flächenpunkt P zwei Schnittebenen, die erste verläuft parallel zur $(x, z)-$Ebene, die zweite zur $(y, z)-$Ebene .
- Wir erhalten so durch den Punkt P zwei Schnittkurven K_1 und K_2 auf der Fläche $z = f(x, y)$ (siehe Abb. auf den nächsten Slides).

Partielle Ableitungen

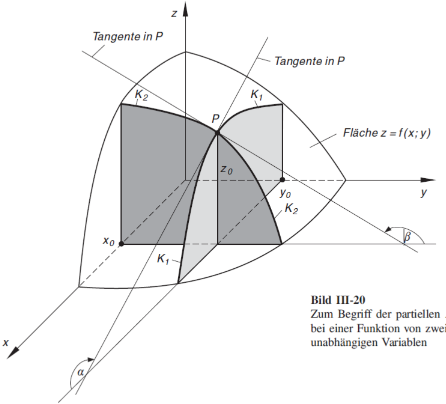


Bild III-20
Zum Begriff der partiellen Ableitung bei einer Funktion von zwei unabhängigen Variablen

Abbildung: Fläche $z = f(x, y)$ mit dem Punkt $P = (x_0, y_0, z_0)$ und den Schnittflächen sowie den Schnittkurven K_1 und K_2 (aus [8]).

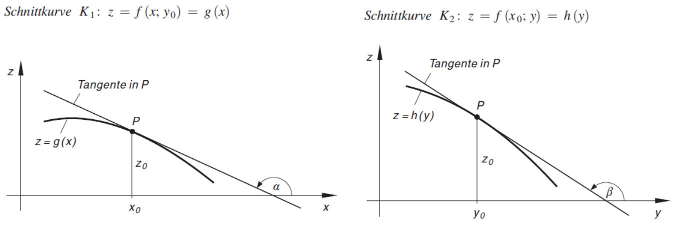


Abbildung: Details zu den Schnittkurven K_1 und K_2 (aus [8]).

Partielle Ableitungen

- Dabei hängt die Funktionsgleichung von K_1 nur noch von der Variablen x ab (d.h. für K_1 gilt $z = f(x, y_0) =: g(x)$, denn y_0 ist fixiert).
- Analog hängt die Funktionsgleichung von K_2 nur noch von der Variablen y ab (d.h. für K_2 gilt $z = f(x_0, y) =: h(y)$, denn x_0 ist fixiert).

Partielle Ableitungen

- Indem wir nun diese beiden Schnittkurven $g(x) = f(x, y_0)$ und $h(y) = f(x_0, y)$ gemäss unserer bisherigen Definition je einmal an der Stelle x_0 bzw. y_0 ableiten, erhalten wir die Steigung der Tangenten an die Fläche $z = f(x, y)$ im Punkt P, einmal in $x-$Richtung und einmal in $y-$Richtung.
- Konkret berechnen wir die beiden Grenzwerte:

$$\begin{aligned} g'(x_0) &= \lim_{\Delta x \to 0} \frac{g(x_0 + \Delta x) - g(x_0)}{\Delta x} = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{f(x_0 + \Delta x, y_0) - f(x_0, y_0)}{\Delta x} =: \frac{\partial f}{\partial x}(x_0, y_0) \\ h'(y_0) &= \lim_{\Delta y \to 0} \frac{h(y_0 + \Delta y) - h(y_0)}{\Delta y} = \lim_{\Delta y \to 0} \frac{f(x_0, y_0 + \Delta y) - f(x_0, y_0)}{\Delta y} =: \frac{\partial f}{\partial y}(x_0, y_0) \end{aligned}$$

Wir bezeichnen diese Grenzwerte als partielle Ableitung 1. Ordnung von f an der Stelle (x_0, y_0).

Definition 5.2 [8]: Partielle Ableitungen 1. Ordnung

Unter den partiellen Ableitungen 1. Ordnung einer Funktion $z = f(x, y)$ and der Stelle (x, y) werden die folgenden Grenzwerte verstanden (falls sie vorhanden sind):

- Partielle Ableitung 1. Ordnung nach x:

$$\frac{\partial f}{\partial x}(x,y) = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{f(x + \Delta x, y) - f(x,y)}{\Delta x}$$

- Partielle Ableitung 1. Ordnung nach y:

$$\frac{\partial f}{\partial y}(x,y) = \lim_{\Delta y \to 0} \frac{f(x, y + \Delta y) - f(x,y)}{\Delta y}$$

Partielle Ableitungen: Bemerkungen

1. Weitere übliche Symbole sind $f_x(x,y)$, $f_y(x,y)$ oder in abgekürzter Schreibweise f_x, f_y bzw. $\frac{\partial f}{\partial x}$, $\frac{\partial f}{\partial y}$.
2. Geometrische Interpretation der partiellen Ableitungen der Funktion $z = f(x,y)$ an der Stelle (x_0, y_0):
   1. $\frac{\partial f}{\partial x}(x_0, y_0)$ ist die Steigung der Flächentangente im Flächenpunkt $P = (x_0, y_0, z_0)$ in positiver $x-$Richtung
   2. $\frac{\partial f}{\partial y}(x_0, y_0)$ ist die Steigung der Flächentangente im Flächenpunkt $P = (x_0, y_0, z_0)$ in positiver $y-$Richtung

Partielle Ableitungen: Bemerkungen

- Formal erhalten wir die partielle Ableitung $\frac{\partial f}{\partial x}(x,y)$, indem wir die Funktion $z = f(x,y)$ zunächst als eine nur von x abhängige Funktion betrachten und nach der Variablen x differenzieren.
- Während dieser Differentiation wird die Variable y als konstante Grösse (Parameter) betrachtet. Für das Differenzieren selbst gelten dann die bereits aus der Analysis bekannten Ableitungsregeln für Funktionen von einer unabhängigen Variablen.
- Beispiel:

$$\begin{aligned} z &= f(x,y) = 3xy^3 + 10x^2y + 5y + 3y \cdot \sin(5xy) \\ \frac{\partial f}{\partial x}(x,y) &= f_x(x,y) = 3 \cdot 1 \cdot y^3 + 10 \cdot 2x \cdot y + 0 + 3y \cdot \cos(5xy) \cdot 5 \cdot 1 \cdot y \end{aligned}$$

Partielle Ableitungen: Bemerkungen

- Analog erhalten wir die partielle Ableitung $\frac{\partial f}{\partial y}(x,y)$, indem wir die Funktion $z = f(x,y)$ zunächst als eine nur von y abhängige Funktion betrachten und nach der Variablen y differenzieren.
- Während dieser Differentiation wird die Variable x als konstante Grösse (Parameter) betrachtet. Für das Differenzieren selbst gelten dann die bereits aus der Analysis bekannten Ableitungsregeln für Funktionen von einer unabhängigen Variablen.
- Beispiel:

$$\begin{aligned} z &= f(x,y) = 3xy^3 + 10x^2y + 5y + 3y\cdot\sin(5xy) \\ \frac{\partial f}{\partial y}(x,y) &= f_y(x,y) = 3x\cdot 3y^2 + 10x^2\cdot 1 + 5\cdot 1 + (3\cdot 1\cdot\sin(5xy) + 3y\cdot\cos(5xy)\cdot 5x\cdot 1) \end{aligned}$$

Partielle Ableitungen: Bemerkungen

- Die partielle Differentiation wird somit auf die gewöhnliche Differentiation, d. h. auf die Differentiation einer Funktion von einer Variablen zurückgeführt.
- Die Ableitungsregeln sind daher die gleichen wie bei den Funktionen einer Variablen.
- So lautet beispielsweise die Produktregel bei zwei unabhängigen Variablen, d. h. für eine Funktion vom Typ $z = f(x,y) = u(x,y) \cdot v(x,y)$:
  - $f_x = u_x \cdot v + u \cdot v_x$
  - $f_y = u_y \cdot v + u \cdot v_y$

Partielle Ableitungen: Bemerkungen

- Für Funktionen mit mehr als zwei unabhängigen Variablen geht man analog vor.
- Sei $y = f(x_1, x_2, ..., x_n)$ eine Funktion mit n unabhängigen Variablen. Es lassen sich nun n partielle Ableitungen 1. Ordnung bilden gemäss

$$\frac{\partial f}{\partial x_k}(x_1, ..., x_k, ..., x_n) = \lim_{\Delta x_k \to 0} \frac{f(x_1, ..., x_k + \Delta x_k, ..., x_n) - f(x_1, ..., x_k, ..., x_n)}{\Delta x_k}$$

$$(k = 1, ..., n)$$

- Dabei werden wieder alle anderen Variablen ausser x_k als konstante Grösse angenommen und es wird nach x_k abgeleitet.

Aufgabe 5.2

- Berechnen Sie die partiellen Ableitungen erster Ordnung für die folgenden Funktionen

  1. $z = f(x,y) = x^2y^4 + e^x \cdot \cos y + 10x - 2y^2 + 3$
  2. $z = f(x,y) = xy^2 \cdot (\sin x + \sin y)$
  3. $z = f(x,y) = \ln(x + y^2) - e^{2xy} + 3x$

Aufgabe 5.2: Lösungen

Linearisierung

- Wieder ausgehend vom eindimensionalen Fall haben wir für die an eine Funktion $y = f(x)$ im Punkt $(x_0, f(x_0))$ angelegten Kurventangente g die Tangentengleichung

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

und wir wissen, dass in einer Umgebung von x_0 die Funktion $y = f(x)$ durch die lineare Tangente angenähert ('linearisiert') werden kann, also

$$f(x) \approx f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0)$$

gilt.

- Nun wollen wir dies auf Funktionen mit mehreren Variablen erweitern und führen dafür die sogenannte Jacobi-Matrix $Df(x)$ ein, welche die einfache Ableitung $f'(x)$ ersetzen wird.

Definition 5.3: Jacobi-Matrix:

- Sei $\boldsymbol{f} : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}^m$ mit $\boldsymbol{y} = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}) = \begin{pmatrix} y_1 = f_1(\boldsymbol{x}) \\ y_2 = f_2(\boldsymbol{x}) \\ \vdots \\ y_m = f_m(\boldsymbol{x}) \end{pmatrix}$ und $\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, ..., x_n)^T \in \mathbb{R}^n$. Die **Jacobi-Matrix** enthält sämtliche partiellen Ableitung 1. Ordnung von $\boldsymbol{f}$ und ist definiert als

$$\boldsymbol{Df}(\boldsymbol{x}) := \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1}(x) & \frac{\partial f_1}{\partial x_2}(x) & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n}(x) \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1}(x) & \frac{\partial f_2}{\partial x_2}(x) & \cdots & \frac{\partial f_2}{\partial x_n}(x) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_m}{\partial x_1}(x) & \frac{\partial f_m}{\partial x_2}(x) & \cdots & \frac{\partial f_m}{\partial x_n}(x) \end{pmatrix}$$

Linearisierung

Definition 5.3: Linearisierung

- Die “verallgemeinerte Tangentengleichung”

$$\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^{(0)}) + \boldsymbol{Df}(\boldsymbol{x}^{(0)}) \cdot (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^{(0)})$$

beschreibt eine lineare Funktion und es gilt $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}) \approx \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x})$ in einer Umgebung eines gegebenen Vektors $\boldsymbol{x}^{(0)} = (x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, \ldots, x_n^{(0)})^T \in \mathbb{R}^n$. Man spricht deshalb auch von der **Linearisierung** der Funktion $\boldsymbol{y} = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})$ in einer Umgebung von $\boldsymbol{x}^{(0)}$ (ein hochgestellter Index in Klammern $\boldsymbol{x}^{(k)}$ bezeichnet wie bisher einen Vektor aus $\mathbb{R}^n$ nach der $k-$ten Iteration).

Definition 5.3: Tangentialebene

- Für den speziellen Fall $f : \mathbb{R}^2 \longrightarrow \mathbb{R}$ mit $y = f(x_1, x_2)$ liefert die linearisierte Funktion

$$\begin{aligned} g(x_1, x_2) \quad &= \quad f(x_1^{(0)}, x_2^{(0)}) + \frac{\partial f}{\partial x_1}(x_1^{(0)}, x_2^{(0)}) \cdot \left(\; x_1 - x_1^{(0)} \; \right) \\ &\quad + \frac{\partial f}{\partial x_2}(x_1^{(0)}, x_2^{(0)}) \cdot \left(\; x_2 - x_2^{(0)} \; \right) \end{aligned}$$

  die Gleichung der **Tangentialebene**.

- Sie enthält sämtliche im Flächenpunkt $P = (x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, f(x_1^{(0)}, x_2^{(0)}))$ an die Bildfläche von $y = f(x_1, x_2)$ angelegten Tangenten.

- Betrachten wir konkret nochmals die Funktion $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}) = \begin{pmatrix} f_1(x_1, x_2) \\ f_2(x_1, x_2) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1^2 + x_2 - 11 \\ x_1 + x_2^2 - 7 \end{pmatrix}$ aus dem einführenden Beispiel von Kap. 5.1 und linearisieren sie in der Umgebung von $\boldsymbol{x}^{(0)} = (1, 1)^T$.
- Für die Jacobi-Matrix erhalten wir

$$\boldsymbol{Df}(x_1, x_2) = \begin{pmatrix} 2x_1 & 1 \\ 1 & 2x_2 \end{pmatrix}$$

und an der Stelle $\boldsymbol{x}^{(0)} = (1, 1)^T$ gilt

$$\boldsymbol{Df}(x_1^{(0)}, x_2^{(0)}) = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}.$$

Linearisierung: Beispiele 5.2 (1)

- Damit erhalten wir

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) &= \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^{(0)}) + \boldsymbol{Df}(\boldsymbol{x}^{(0)}) \cdot (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^{(0)}) \\
\boldsymbol{g}(x_1, x_2) &= \begin{pmatrix} -9 \\ -5 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 - 1 \\ x_2 - 1 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} -9 + 2(x_1 - 1) + (x_2 - 1) \\ -5 + (x_1 - 1) + 2(x_2 - 1) \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} 2x_1 + x_2 - 12 \\ x_1 + 2x_2 - 8 \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

Linearisierung: Beispiele 5.2 (2)

- Betrachten wir konkret die Funktion $f(x_1,x_2) = x_1^2 + x_2^2$. Wir linearisieren sie in der Umgebung von $\boldsymbol{x}^{(0)} = (1,2)^T$. Wir erhalten für die Jacobi-Matrix

$$\boldsymbol{Df}(x_1,x_2) = \begin{pmatrix} 2x & 2y \end{pmatrix}$$

und damit

$$\begin{aligned} g(\boldsymbol{x}) &= f(\boldsymbol{x}^{(0)}) + \boldsymbol{Df}(\boldsymbol{x}^{(0)}) \cdot (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^{(0)}) \\ g(x_1,x_2) &= 5 + \begin{pmatrix} 2 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 - 1 \\ x_2 - 2 \end{pmatrix} \\ &= 5 + 2(x_1 - 1) + 4 \cdot (x_2 - 2) \\ &= 2x_1 + 4x_2 - 5. \end{aligned}$$

Linearisierung: Beispiele 5.2 (2)

- Dies ist nichts anderes als die Gleichung der Tangentialebene im kartesischen $(x_1, x_2, x_3)-$Koordinatensystem an die durch $x_3 = f(x_1, x_2) = x_1^2 + x_2^2$ definierte Fläche im Flächenpunkt $P = (1, 2, 5)$, wie auf der nächsten Slide dargestellt.

Linearisierung: Beispiele 5.2 (2)

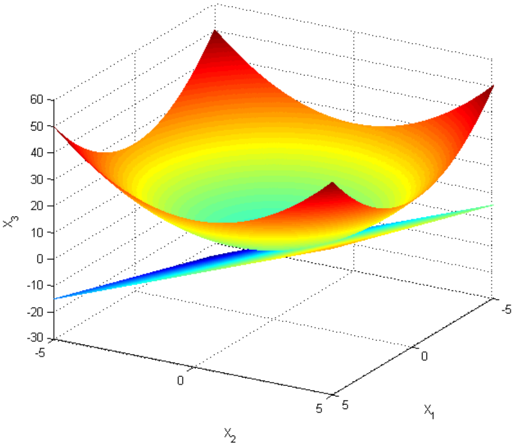


Abbildung: Grafische Darstellung der Fläche $x_3 = f(x_1, x_2) = x_1^2 + x_2^2$ sowie der Tangentialebene durch den Flächenpunkt (1,2,5).

Problemstellung zur Nullstellenbestimmung für nichtlineare Systeme

Problemstellung

Die allgemeine Problemstellung zur Nullstellenbestimmung für nichtlineare Gleichungssysteme lautet:

Definition 5.4 [1]:

- Gegeben sei $n \in \mathbb{N}$ und eine Funktion $\boldsymbol{f} : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}^n$. Gesucht ist ein Vektor $\bar{\boldsymbol{x}} \in \mathbb{R}^n$ mit $\boldsymbol{f}(\bar{\boldsymbol{x}}) = \boldsymbol{0}$.
- Komponentenweise bedeutet dies: Gegeben sind n Funktionen $f_i : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$, die die Komponenten von $\boldsymbol{f}$ bilden. Gesucht ist ein Vektor $\bar{\boldsymbol{x}} \in \mathbb{R}^n$ mit $f_i(\bar{\boldsymbol{x}}) = 0$ (für $i = 1, ..., n$). Dann heisst $\bar{\boldsymbol{x}} \in \mathbb{R}^n$ eine Lösung des **Gleichungssystems**

$$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{f}(x_1, ..., x_n) = \begin{pmatrix} f_1(x_1, ..., x_n) \\ f_2(x_1, ..., x_n) \\ \vdots \\ f_n(x_1, ..., x_n) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$$

Problemstellung

- Während es für lineare Gleichungssysteme relativ einfache Kriterien bezüglich der Lösbarkeit und der Anzahl von Lösungen gibt, ist diese Frage bei nichtlinearen Gleichungssystemen erheblich schwieriger zu beantworten.
- Es gibt keine einfachen Methoden um festzustellen, ob ein nichtlineares Gleichungssystem lösbar ist und wieviele Lösungen es hat.
- Deshalb entscheidet die Wahl einer " geeigneten Startnäherung" meist über Erfolg oder Misserfolg der eingesetzten numerischen Verfahren.

Beispiel 5.3

- Lösen Sie das folgende nichtlineare Gleichungssystem mit zwei Unbekannten:

$$\boldsymbol{f}(x_1, x_2) = \begin{pmatrix} f_1(x_1, x_2) \\ f_2(x_1, x_2) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2x_1 + 4x_2 \\ 4x_1 + 8x_2^3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

- Lösung: Auflösen der ersten Gleichung nach x_2 und einsetzen in die zweite Gleichung liefert die drei Lösungen $(0,0)$, $(-2,1)$, $(2,-1)$.

Das Newton-Verfahren für Systeme

Das Newton-Verfahren für Systeme

- Im Kapitel 3.5 haben wir für die Nullstellenbestimmung einer Funktion $f:\mathbb{R}\to\mathbb{R}$ mit einer Variablen das Newton-Verfahren hergeleitet.
- Aus der Linearisierung der Funktion f mittels der Tangente g an der Selle x_n

$$f(x) \approx g(x) = f(x_n) + f'(x_n)(x - x_n)$$

folgte die Iteration

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)} \qquad (n = 0, 1, 2, 3, \ldots).$$

Das Newton-Verfahren für Systeme

- In Definition 5.3 haben wir die Jacobi-Matrix und die Linearisierung eingeführt. Für den für uns interessanten Fall von $\boldsymbol{f} : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}^n$ lautet die Jacobi-Matrix

$$\boldsymbol{Df}(\boldsymbol{x}) := \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1}(x) & \frac{\partial f_1}{\partial x_2}(x) & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n}(x) \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1}(x) & \frac{\partial f_2}{\partial x_2}(x) & \cdots & \frac{\partial f_2}{\partial x_n}(x) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_n}{\partial x_1}(x) & \frac{\partial f_n}{\partial x_2}(x) & \cdots & \frac{\partial f_n}{\partial x_n}(x) \end{pmatrix}$$

und durch Linearisierung erhalten wir

$$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}) \approx \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^{(n)}) + \boldsymbol{Df}(\boldsymbol{x}^{(n)}) \cdot (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^{(n)}).$$

(wobei $\boldsymbol{x}^{(n)}$ wie üblich den Näherungs-Vektor für die Nullstelle $\boldsymbol{x}$ nach der n-ten Iteration beschreibt).

Das Newton-Verfahren für Systeme

- Wenn der Vektor $\boldsymbol{x}^{(n+1)}$ eine Nullstelle von $\boldsymbol{f}$ ist, gilt:

$$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^{(n+1)}) = \boldsymbol{0} \approx \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^{(n)}) + \boldsymbol{Df}(\boldsymbol{x}^{(n)}) \cdot (\boldsymbol{x}^{(n+1)} - \boldsymbol{x}^{(n)}).$$

Durch Auflösen nach $\boldsymbol{x}^{(n+1)}$ erhalten wir dann die Iterationsvorschrift

$$\boxed{\boldsymbol{x}^{(n+1)} = \boldsymbol{x}^{(n)} - \left(\boldsymbol{Df}(\boldsymbol{x}^{(n)})\right)^{-1} \cdot \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^{(n)}))}$$

wieder in Analogie zum eindimensionalen Fall

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$$

- Es wird aber nie die Inverse der Jacaboi-Matrix berechnet, sondern die obige Gleichung wird zur Lösung eines linearen Gleichungssystems verwendet, indem man die Substitution

$$\delta^{(n)} := -\left(\boldsymbol{Df}(\boldsymbol{x}^{(n)})\right)^{-1} \cdot \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^{(n)})$$

als lineares Gleichungssystem auffasst gemäss

$$\boldsymbol{Df}(\boldsymbol{x}^{(n)})\delta^{(n)} = -\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^{(n)})$$

und so δ^n bestimmen und anschliessend

$$\boldsymbol{x}^{(n+1)} := \boldsymbol{x}^{(n)} + \delta^{(n)}$$

berechnen kann.

Newton-Verfahren für Systeme [1]:
Gesucht sind Nullstellen von $\boldsymbol{f} : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}^n$. Sei $\boldsymbol{x}^{(0)}$ ein Startvektor in der Nähe einer Nullstelle. Das Newton-Verfahren zur näherungsweisen Bestimmung dieser Nullstelle lautet:

- für $n = 0, 1, \ldots$:
  - Berechne $\delta^{(n)}$ als Lösung des linearen Gleichungssystems
    $$\boldsymbol{Df}(\boldsymbol{x}^{(n)})\delta^{(n)} = -\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^{(n)})$$
  - Setze
    $$\boldsymbol{x}^{(n+1)} := \boldsymbol{x}^{(n)} + \delta^{(n)}$$

Quadratisch-konvergentes Newton-Verfahren

1. Mögliche Abbruchkriterien, $\varepsilon > 0$ (gmäss [6]):
    1. $n \geq n_{max},\ n_{max} \in \mathbb{N}$
    2. $\| \boldsymbol{x}^{(n+1)} - \boldsymbol{x}^{(n)} \| \leq \| \boldsymbol{x}^{(n+1)} \| \cdot \varepsilon$
    3. $\| \boldsymbol{x}^{(n+1)} - \boldsymbol{x}^{(n)} \| \leq \varepsilon$
    4. $\| \boldsymbol{f}\left(\boldsymbol{x}^{(n+1)}\right) \| \leq \varepsilon$
2. Es kann passieren, dass mit dem Newton-Verfahren statt einer Nullstelle von $\boldsymbol{f}$ ein lokales Minimum $\boldsymbol{x}_{min}$ gefunden wird, das ungleich $\boldsymbol{0}$ ist. In diesem Falle ist $\boldsymbol{Df}(\boldsymbol{x}_{min})$ aber immer nicht regulär. Siehe untenstehendes Beispiel 5.5.

Beispiel 5.4

- Wenden Sie das Newton-Verfahren auf das nichtlineare Gleichungssystem aus Beispiel 5.3 an:

$$\boldsymbol{f}(x_1, x_2) = \begin{pmatrix} f_1(x_1, x_2) \\ f_2(x_1, x_2) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2x_1 + 4x_2 \\ 4x_1 + 8x_2^3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Beispiel 5.4: Lösung

- Für die Jacobi-Matrix erhalten wir

$$\boldsymbol{Df}(x_1,x_2) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1}(x_1,x_2) & \frac{\partial f_1}{\partial x_2}(x_1,x_2) \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1}(x_1,x_2) & \frac{\partial f_2}{\partial x_2}(x_1,x_2) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 4 \\ 4 & 24x_2^2 \end{pmatrix}$$

- Wir wählen den Startvektor $\boldsymbol{x}^{(0)} = \begin{pmatrix} 4 \\ 2 \end{pmatrix}$. Daraus ergibt sich für die erste Iteration das lineare Gleichungssystem

$$\boldsymbol{Df}(4,2)\delta^{(0)} = -\boldsymbol{f}(4,2) \Rightarrow \begin{pmatrix} 2 & 4 \\ 4 & 96 \end{pmatrix} \delta^{(0)} = -\begin{pmatrix} 16 \\ 80 \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \delta^{(0)} = -\begin{pmatrix} \frac{76}{11} \\ \frac{6}{11} \end{pmatrix} \text{und}$$

$$\boldsymbol{x}^{(1)} = \boldsymbol{x}^{(0)} + \delta^{(0)} = \begin{pmatrix} -\frac{32}{11} \\ \frac{16}{11} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -2.909\ldots \\ 1.4545\ldots \end{pmatrix}.$$

Beispiel 5.4: Lösung

- Die weiteren Schritte sind

i	0	1	2	3	4
$x^{(i)}$	$\begin{pmatrix}4\\2\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}-2.909\\1.455\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}-2.302\\1.151\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}-2.051\\1.025\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}-2.0018\\1.0009\end{pmatrix}$

- Die Folge konvergiert gegen $(-2,1)^T$, damit haben wir eine der drei Nullstellen gefunden.

Aufgabe 5.3

- Finden Sie für das obige Beispiel Startvektoren, so dass das Newton-Verfahren mit diesen Startvektoren gegen die beiden anderen Nullstellen von f konvergiert.

Aufgabe 5.3: Lösung

Quadratisch-konvergentes Newton-Verfahren

Man sieht, dass das Newton-Verfahren konvergiert, wenn der Startvektor nahe genug bei einer Nullstelle liegt. Allgemein gilt:

Satz 5.1: Quadratische Konvergenz des Newton-Verfahrens für Systeme[1]
Das Newton-Verfahren konvergiert quadratisch für nahe genug an einer Nullstelle $\overline{\boldsymbol{x}}$ liegende Startvektoren, wenn $\boldsymbol{Df}(\overline{\boldsymbol{x}})$ regulär und $\boldsymbol{f}$ dreimal stetig differenzierbar ist.

Aufgabe 5.4

- Das nichtlineare System

$$\begin{aligned}\boldsymbol{f}(x_1,x_2) &= \begin{pmatrix} f_1(x_1,x_2) \\ f_2(x_1,x_2) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 5x_1^2 - x_2^2 \\ x_2 - 0.25(\sin x_1 + \cos x_2) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}\end{aligned}$$

  besitzt in der Nähe von $\boldsymbol{x} = (0.25, 0.25)^T$ eine Lösung.
- Bestimmen Sie mit dem Newton–Verfahren eine Näherungslösung, die bezüglich der euklidischen Norm eine Genauigkeit von 10^{-5} besitzt.

Aufgabe 5.4: Lösung

Aufgabe 5.4: Lösung

Aufgabe 5.4: Lösung

Beispiel 5.5

- Das Newtonverfahren für das nichtlineare System

$$\boldsymbol{f}(x_1, x_2) = \begin{pmatrix} f_1(x_1, x_2) \\ f_2(x_1, x_2) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1^3 - x_2 - 1 \\ x_1^2 - x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

konvergiert für den Startvektor $\boldsymbol{x}^{(0)} = \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix}$ gegen $\boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} 0 \\ -0.5 \end{pmatrix}$. Da aber $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}) = \begin{pmatrix} -0.5 \\ 0.5 \end{pmatrix} \neq 0$ ist das keine Nullstelle. Man sieht entsprechend, dass $\boldsymbol{Df}(\boldsymbol{x}) = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ nicht regulär ist.

Vereinfachtes Newton-Verfahren

- Der Aufwand pro Schritt kann reduziert werden, wenn nicht bei jedem Schritt die Jacobi-Matrix $\boldsymbol{Df}(\boldsymbol{x}^{(n)})$ auswertet, sondern immer wieder $\boldsymbol{Df}(\boldsymbol{x}^{(0)})$ verwendet.
- Dies ist in Analogie zu Kapitel 3.5.1 das 'vereinfachte Newtonverfahren'.
- Das vereinfachte Newton-Verfahren konvergiert nur noch linear und nicht mehr quadratisch.

Vereinfachtes Newton-Verfahren

Vereinfachtes Newton-Verfahren für Systeme [1]:
Gesucht sind Nullstellen von $\boldsymbol{f} : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}^n$. Sei $\boldsymbol{x}^{(0)}$ ein Startvektor in der Nähe einer Nullstelle. Das vereinfachte Newton-Verfahren zur näherungsweisen Bestimmung dieser Nullstelle lautet:

- für $n = 0, 1, \ldots$:
  - Berechne $\delta^{(n)}$ als Lösung des linearen Gleichungssystems
    $$\boldsymbol{Df}(\boldsymbol{x}^{(0)})\delta^{(n)} = -\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^{(n)})$$
  - Setze
    $$\boldsymbol{x}^{(n+1)} := \boldsymbol{x}^{(n)} + \delta^{(n)}$$

Beispiel 5.6

- Wenden Sie das vereinfachte Newton-Verfahren auf das nichtlineare Gleichungssystem aus Beispiel 5.3 an:

$$\boldsymbol{f}(x_1, x_2) = \begin{pmatrix} f_1(x_1, x_2) \\ f_2(x_1, x_2) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2x_1 + 4x_2 \\ 4x_1 + 8x_2^3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Beispiel 5.6: Lösung

Lösung: Wir wählen als Startvektor wieder $\boldsymbol{x}^{(0)} = \begin{pmatrix} 4 \\ 2 \end{pmatrix}$. Der erste Schritt des vereinfachten Newton-Verfahrens ist identisch mit dem ersten Schritt des Newton-Verfahrens. Im zweiten Schritt verwenden wir erneut die Jacobi-Matrix aus dem ersten Schritt; es ist also zu lösen

$$\boldsymbol{Df}(\boldsymbol{x}^{(0)})\,\boldsymbol{\delta}^{(1)} = \boldsymbol{Df}(4,2)\,\boldsymbol{\delta}^{(1)} = -\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^{(1)}) = -\boldsymbol{f}(-2.09, 1.45)$$

$$\Longleftrightarrow \begin{pmatrix} 2 & 4 \\ 4 & 96 \end{pmatrix} \boldsymbol{\delta}^{(1)} = -\begin{pmatrix} 6 \cdot 10^{-9} \\ -12.98 \end{pmatrix} \Longleftrightarrow \boldsymbol{\delta}^{(1)} = \begin{pmatrix} 0.2951 \\ -0.1475 \end{pmatrix}$$

Damit haben wir nach einem Newton-Schritt

$$\boldsymbol{x}^{(2)} = \boldsymbol{x}^{(1)} + \boldsymbol{\delta}^{(1)} = \begin{pmatrix} -2.614 \\ 1.307 \end{pmatrix}$$

Einige weitere Iterierte:

i	0	1	2	5	10
$\boldsymbol{x}^{(i)}$	$\begin{pmatrix} 4 \\ 2 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -2.909 \\ 1.455 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -2.614 \\ 1.307 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -2.258 \\ 1.129 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -2.0817 \\ 1.041 \end{pmatrix}$

Offensichtlich konvergiert die Folge gegen $(-2, 1)^{\mathrm{T}}$, jedoch deutlich langsamer als das Newton-Verfahren. ■

Gedämpftes Newton-Verfahren

- Falls beim $n-$ten Iterationsschritt die Jacobi-Matrix $\boldsymbol{Df}(x^{(n)})$ schlecht konditioniert (bzw. nicht oder fast nicht invertierbar) ist, kann wegen

$$\delta^{(n)} := -\left(\boldsymbol{Df}(\boldsymbol{x}^{(n)})\right)^{-1} \cdot \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^{(n)})$$

nicht generell erwartet werden, dass

$$\boldsymbol{x}^{(n+1)} = \boldsymbol{x}^{(n)} + \delta^{(n)}$$

eine bessere Näherung für die Nullstelle darstellt als $\boldsymbol{x}^{(n)}$.
- Unter Umständen entfernt sich in diesem Fall $\boldsymbol{x}^{(n+1)}$ sogar sehr weit von der eigentlichen Nullstelle, wie auf der nächsten Slide für einen eindimensionale Fall gezeigt ist.

Gedämpftes Newton-Verfahren

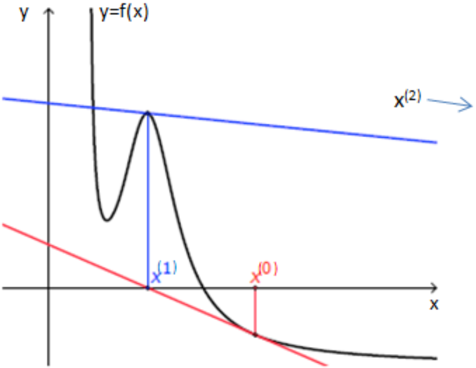


Abbildung: $x^{(1)}$ kommt fast auf ein lokales Maximum zu liegen und deshalb wird $f'(x^{(1)})$ beliebig klein bzw. $\left(f'(x^{(1)})\right)^{-1}$ beliebig gross. Die Iteration $x^{(2)}$ 'reisst' demzufolge aus und ist keine bessere Näherung für die Nullstelle von $f(x)$ als $x^{(1)}$.

Gedämpftes Newton-Verfahren

- Falls dies der Fall ist, macht es Sinn, $\boldsymbol{x}^{(n)} + \delta^{(n)}$ zu verwerfen und es beispielsweise mit $\boldsymbol{x}^{(n)} + \frac{\delta^{(n)}}{2}$ zu probieren (d.h. wir verkleinern bzw. dämpfen die Schrittweite $\delta^{(n)}$) und diesen Wert zu akzeptieren, sofern für die Länge des Vektors

$$\| \boldsymbol{f}\left(\boldsymbol{x}^{(n)} + \frac{\delta^{(n)}}{2}\right) \|_2 < \| \boldsymbol{f}\left(\boldsymbol{x}^{(n)}\right) \|_2$$

gilt, da wir ja eine Iteration von $\| \boldsymbol{f}\left(\boldsymbol{x}^{(n)}\right) \|_2$ gegen $\boldsymbol{0}$ erreichen wollen.

- Das heisst, wir akzeptieren einen Iterationsschritt erst, wenn gilt

$$\| \boldsymbol{f}\left(\boldsymbol{x}^{(n+1)}\right) \|_2 < \| \boldsymbol{f}\left(\boldsymbol{x}^{(n)}\right) \|_2$$

Gedämpftes Newton-Verfahren

Gedämpftes Newton-Verfahren für Systeme [6]:
Gesucht sind Nullstellen von $\boldsymbol{f} : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}^n$. Sei $\boldsymbol{x}^{(0)}$ ein Startvektor in der Nähe einer Nullstelle, $k_{max} \in \mathbb{N}$ sei vorgegeben. Das gedämpfte Newton-Verfahren zur näherungsweisen Bestimmung dieser Nullstelle lautet:

- für $n = 0, 1, \ldots$:
  - Berechne $\delta^{(n)}$ als Lösung des linearen Gleichungssystems

    $$\boldsymbol{Df}(\boldsymbol{x}^{(n)})\delta^{(n)} = -\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^{(n)})$$

  - Finde das minimale $k \in \{0, 1, \ldots, k_{max}\}$ mit

    $$\| \boldsymbol{f}\left(\boldsymbol{x}^{(n)} + \frac{\delta^{(n)}}{2^k}\right) \|_2 < \| \boldsymbol{f}\left(\boldsymbol{x}^{(n)}\right) \|_2$$

  - Falls kein minimales k gefunden werden kann, rechne mit $k = 0$ weiter
  - Setze

    $$\boldsymbol{x}^{(n+1)} := \boldsymbol{x}^{(n)} + \frac{\delta^{(n)}}{2^k}$$

Bemerkungen:

1. Natürlich kann man auch für das vereinfachte Newton-Verfahren die analoge Dämpfung einbauen.
2. Umfangreiche Tests haben ergeben, dass das gedämpfte Newton-Verfahren im Allgemeinen weit besser ist als das normale Newton-Verfahren oder andere, hier nicht behandelte Verfahren wie das Gradientenverfahren.
3. Die Dämpfungsgrösse k_{max} ist stark vom jeweiligen Problem abhängig. Das Verfahren kann bei gleichem Startvektor bei verschiedener Vorgabe von k_{max}einmal konvergieren und einmal divergieren; es kann insbesondere für verschiedene k_{max} auch gegen verschiedene Nullstellen konvergieren. Sofern nichts über sinnvolle Werte bekannt ist, kann zunächst mit $k_{max} = 4$ gerechnet werden.

Aufgabe 5.5 (in den Übungen)

- Der Druck, der benötigt wird, damit ein grosser, schwerer Gegenstand in einem weichen, auf einem harten Untergrund liegenden, homogenen Boden absinkt, kann über den Druck vorhergesagt werden, der zum Absinken kleinerer Gegenstände in demselben Boden benötigt wird.
- Speziell der Druck p, der benötigt wird, damit ein runder flacher Gegenstand vom Radius r um d cm tief in den weichen Boden sinkt, kann über eine Gleichung der Form

$$p = k_1 e^{k_2 r} + k_3 r$$

approximiert werden, wobei k_1, k_2 und k_3 Konstanten mit $k_2 > 0$ sind, die von d und der Konsistenz des Bodens, aber nicht vom Radius des Gegenstandes abhangen. Der harte Untergrund liege in einer Entfernung $D > d$ unter der Oberfläche.

Aufgabe 5.5 (in den Übungen)

1. Bestimmen Sie die Werte von k_1, k_2 und k_3, falls angenommen wird, dass ein Gegenstand vom Radius 1 cm einen Druck von 10 N/cm^2 benötigt, um 30 cm tief in einen schlammigen Boden zu sinken, ein Gegenstand vom Radius 2 cm einen Druck von 12 N/cm^2 benötigt, um 30 cm tief zu sinken und ein Gegenstand vom Radius 3 cm einen Druck von 15 N/cm^2 benötigt, um ebensoweit abzusinken (vorausgesetzt, der Schlamm ist tiefer als 30 cm). Benutzen Sie den Startvektor $\boldsymbol{k}^{(0)} = \begin{pmatrix} 10 \\ 0.1 \\ -1 \end{pmatrix}$
2. Sagen Sie aufgrund Ihrer Berechnungen aus Übung a) die minimale Grösse eines runden Gegenstandes voraus, der eine Belastung von 500 N aushält und dabei weniger als 30 cm tief sinkt.