Assignment 2

3618143
Jman - Belkis Gemaledin

A1 $f(x) = x^2 - 2x - 3$ mit Anfangswert $x_0 = -2$

- Ableitung berechnen

$$f'(x) = 2x - 2$$

- Formel: $x^{k+1} = x^k - \frac{f(x^k)}{f'(x^k)}$

→ erste Iteration $(k=0)$:

$$x^1 = x^0 - \frac{f(x^0)}{f'(x^0)} = -2 - \frac{5}{-6} = -2 + \frac{5}{6} = -1{,}16667$$

mit $f(x^0) = f(-2) = 4 + 4 - 3 = 5$
$f'(x^0) = f'(-2) = -4 - 2 = -6$

→ zweite Iteration $(k=1)$:

$$x^2 = x^1 - \frac{f(x^1)}{f'(x^1)} = -1{,}6667 - \frac{f(-1{,}6667)}{f'(-1{,}6667)} = -1{,}6667 - \frac{0{,}69446}{-4{,}33334}$$

$$= -1{,}00641$$

→ dritte Iteration $(k=2)$:

als Indize

$$x^3 = x^2 - \frac{f(x^2)}{f'(x^2)} = -1{,}0066 - \frac{f(-1{,}0064)}{f'(-1{,}00641)} = -1{,}00641 - \frac{0{,}02568}{-4{,}01282}$$

$$= -1{,}00001$$

Zusammenfassung der Iterationen:

Iteration k	x^k	$f(x^k)$	$f'(x^k)$	x^{k+1}
0	-2	5	-6	$-1{,}16667$
1	$-1{,}16667$	$0{,}69446$	$-4{,}33334$	$-1{,}00641$
2	$-1{,}00641$	$0{,}02568$	$-4{,}01282$	$-1{,}00001$

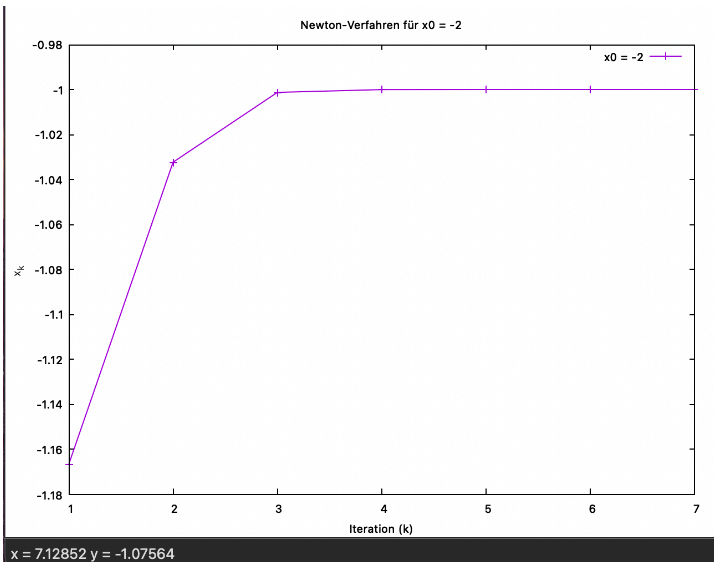
Man bemerkt dass, $f(x)$ immer näher zu 0 wird.

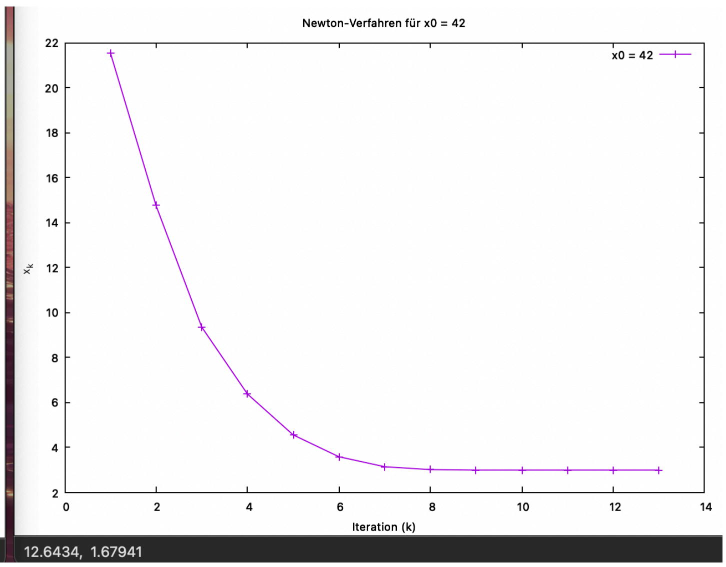
Die Nullstelle der Funktion $f(x) \approx 0$ nach 3 Iterationen ist ungefähr $x = -1{,}00001$

(A2) In Aufgabe 2 des 2. Assignments sollten die Nullstellen der Funktion $f(x) = x^2 - 2x - 3$ mittels Newton Verfahrens numerisch berechnet werden. Dazu sollte ein C++ Programm erstellt werden, welches die Newton Iteration für verschiedene Startwerte durchführt und die Anzahl der Iterationen gegen die x^k Werte grafisch darstellt.

Die Funktion $f(x)$ und ihre numerische Ableitung wurden als separate Funktionen definiert. Um die Iterationen des Newton-Verfahrens durchzuführen, wurde eine while-Schleife verwendet. Diese Schleife läuft, bis das Residuum $|f(x^k)|$ kleiner als die Toleranz $tol = 1 \times 10^{-10}$ ist oder die maximale Anzahl von Iterationen $k_{max} = 50$ erreicht wurde (damit das Programm nicht in eine unendliche Schleife bleibt). Die Ableitung von $f(x)$ wurde numerisch mittels des Diff.quotienten approximiert.

Das Programm wurde für 2 Startwerte ausgeführt: $x_0 = -2$ & $x_0 = 42$. Die x^k Werte, wurden in Dateien ('output_minus2.txt' & 'output_42.txt') gespeichert um sie (mit GNUPlot) grafisch darzustellen. Unten sind die beide Plots zu sehen, die die Konvergenz der Newton Iteration für die Startwerte $x_0 = -2$ & $x_0 = 42$ darstellen.





-2: schnelle Konvergenz zu eine Nullstelle

42: der Startwert ist weit von der Nullstelle

(A3) Im Aufgabe 3 wurde das Newton Verfahren in C++ implementiert.

3a) Startwert: $(-1000, 6)^T$

Iterationen	NST x_1	NST x_2	Residuum
14	-1.81487	1,09791	8.88178e-16

↳ sehr kleinen Residuum

Gleichungssyst. besteht aus 2 Gleichungen, die durch F1 definiert werden. Das Hauptprogramm liest den Startvektor x_0 aus Tastatur ein. Danach wird die Klasse Newton verwendet, um das Gleichungssyst. mit der Methode „Solve" zu lösen. Das Ergebnis und das Residuum der Lösung werden ausgegeben.

3b) In dieser Teilaufgabe wird die um einen Faktor von 10^6 skaliert und die Auswirkungen davon untersucht. Die skalierte Gleichung wird in der Fkt F2 definiert. Analog zu a) wird das GLS mit der Funktion F1 und anschließend mit F2 (skalierte Fkt) unter Verwendung der Klasse „Newton". Die Ergebnisse & Residuen werden ausgegeben. Ist zu bemerken, dass die Nullstellen & Residuen gleich bleiben.

Startwert $(-1000, 6)^T$

Iterationen	NST x_1	NST x_2	Residuum
15	-1.81487	1,09791	8.88178e-16

3c) Das Hauptprogramm verwendet die gleichen Funktionen F_1 & F_2 wie vorher. Das Abbruchkrit. des Newton-Verfahrens wird geändert, um die L_2-Norm des Newtonkorrektur anstelle des Residuums zu verwenden. (Änderung des Abbkrit. erfolgt in der Klasse „Newton"). GLS wird erneut für F_1 & F_2 gelöst. Die Auswirkungen des neuen Abbkrit werden analysiert: Sowohl das Residuum als auch Δx^k werden klein, wenn sich die Iterationen des Newton-Verfahrens der NST nähern. Das Verfahren in beiden Fällen nahe der gleichen Lösung abbricht.

Newton-Verfahren mit F_1:

Iterationen	NST x_1	NST x_2	Residuum
14	-1.81487	1,09791	8,88178e-16

Newton-Verfahren mit F_2:

Iterationen	NST x_1	NST x_2	Residuum
14	-1.81487	1,09791	8,88178e-16

Startwert $(-1000,6)$

3d) Es wird ein neuer Startwert verwendet um eine alternative Lösung des GLS zu finden. (analog zu vorheige Teilaufgaben).

gewählter Startvektor $(1000,-6)^T$.

Newton-Verfahren mit F_1:

Iterationen	NST x_1	NST x_2	Residuum
12	1.81487	1,09791	8,88178e-16

Newton-Verfahren mit F_2:

Iterationen	NST x_1	NST x_2	Residuum
12	1.81487	1,09791	8,88178e-16

- verschiedene Startwerte können zu unterschiedlichen Lösungen führen

$\Rightarrow$ Die Wahl des Startvektors beeinflusst die konvergierte Lösung des Verfahrens

- Das GLS hat mehrere Lösungen und $(1000,-6)^T$ bestimmt zu welcher Lösung das Newton-Verf. konvergiert.

A4 In Auf 4 wurde das Newton Verfahren verwendet, um den Äquivalenzpunkt zweier Säure-Base Titrationen (gepuffert & ungepuffert) zu bestimmen. Der Äquivalenzpkt. ist der Punkt, an dem die Säure- und Basenkonzentration ausgeglichen sind. Mithilfe des Newton-Verfahrens wurden die Schnittpunkte der Titrationskurven mit einem pH-Wert von 7 ermittelt.

Startwert	Iterationen	NST	Residuum
0	4	nan	nan
9.5	4	10	0
14	4	nan	nan

für jedes Startwert wird es die gepufferte & ungepufferte Titration berechnet, aber davon kann man nur die benötigte / ausgesuchte wählen.

→ Beim Startwert $x_0 = 0$ & $x_0 = 14$ liefert das Verfahren keine gültige NST (nan).

⇒ die Startwerte außerhalb des Einzugsbereichs der Lösung liegen.

⇒ nur für bestimmte Startwerte konvergiert erfolgreich ⇒ Methode ist <u>stark</u> abhängig von Startpkt

A5 Gedämpftes Newtonverfahren mit F_ungef: FÜR $x_0 = 0$

damped:

Iterationen	NSTX1	Residuum
6	10	0

damped2:

Iterationen	NSTX1	Residuum
7	10	0

In Auf 5 wurde das Newton-Verfahren um eine Dämpfungsstrategie erweitert. Es wird mithilfe der gedämpften Newton-Methode den Äquivalenzpkt einer ungepufferten Säure-Base-Titration bestimmt. In Newton.cpp wurden 2 neue Methoden implementiert: Solve_damped & Solve_damped2. Der Unterschied zur A4 ist die verbesserte Stabilität & Konvergenzgeschwindigkeit des Verfahren durch die Dämpfungsstrategie. Während in A4 bei bestimmten Startwerten nicht konvergiert oder nan Werte hatte, zeigte die gedämpfte Methode in A5 eine zuverlässige Konvergenz für verschiedene Startwerte.