Lösen von nichtlinearen Gleichungssystemen durch Kurvenfortsetzung

20. Februar 2003

Jan Sieber

sieber@bris.ac.uk

Department of Engineering Mathematics
University of Bristol

Übersicht

- **Einleitung/Wiederholung** — mehrdimensionales Newtonverfahren und seine Eigenschaften
- **Einige Beispiele** — Verbrennungsreaktionen, NAND-Gatter
- **Kurvenfortsetzung** — mit Illustration und Beispielen

Wiederholung — Newtonverfahren

Aufgabe: Löse **nichtlineares Gleichungssystem**

$$\boxed{f(x) = 0, \qquad x \in \mathbb{R}^n, \qquad f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n.}$$

Wiederholung — Newtonverfahren

Aufgabe: Löse **nichtlineares Gleichungssystem**

$$\boxed{f(x) = 0, \qquad x \in \mathbb{R}^n, \qquad f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n.}$$

Prozedur: Startwert $x_0 \in \mathbb{R}^n \Longrightarrow$ Iteration

$$\boxed{x_{k+1} \;=\; x_k - \left[\frac{\partial f}{\partial x}(x_k)\right]^{-1} f(x_k)}$$

Wiederholung — Newtonverfahren

Aufgabe: Löse **nichtlineares Gleichungssystem**

$$\boxed{f(x) = 0, \qquad x \in \mathbb{R}^n, \qquad f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n.}$$

Prozedur: Startwert $x_0 \in \mathbb{R}^n \Longrightarrow$ Iteration

$$\boxed{x_{k+1} \;=\; x_k - \left[\frac{\partial f}{\partial x}(x_k)\right]^{-1} f(x_k)}$$

Idee: Sei x_* Nullstelle von f. Taylorentwicklung von f in x_k:

$$f(x_*) = 0 \;=\; f(x_k) + \left[\frac{\partial f}{\partial x}(x_k)\right](x_* - x_k) + R(x_k)[x_* - x_k]^2$$

$$\Longrightarrow \quad x_* - x_{k+1} \;=\; R(x_k)[x_* - x_k]^2$$

Wiederholung — Newtonverfahren (II)

Voraussetzung: Nullstelle x_* existiert und ist regulär, d.h., $\det\left[\frac{\partial f}{\partial x}(x_*)\right] \neq 0$

Vorteil: Gute Konvergenz

$$x_0 - x_* \approx 10^{-2} \Longrightarrow x_1 - x_* \approx 10^{-4} \Longrightarrow x_2 - x_* \approx 10^{-8}$$

Wiederholung — Newtonverfahren (II)

Voraussetzung: Nullstelle x_* existiert und ist regulär, d.h., $\det\left[\frac{\partial f}{\partial x}(x_*)\right] \neq 0$

Vorteil: Gute Konvergenz

$$x_0 - x_* \approx 10^{-2} \Longrightarrow x_1 - x_* \approx 10^{-4} \Longrightarrow x_2 - x_* \approx 10^{-8}$$

Nachteil: **Startwert muss in der Nähe der Nullstelle sein!**

$$\boxed{x_0 \approx x_*}$$

Wiederholung — Newtonverfahren (II)

Voraussetzung: Nullstelle x_* existiert und ist regulär, d.h., $\det\left[\frac{\partial f}{\partial x}(x_*)\right] \neq 0$

Vorteil: Gute Konvergenz

$$x_0 - x_* \approx 10^{-2} \Longrightarrow x_1 - x_* \approx 10^{-4} \Longrightarrow x_2 - x_* \approx 10^{-8}$$

Nachteil: **Startwert muss in der Nähe der Nullstelle sein!**

$$\boxed{x_0 \approx x_*}$$

Fazit: Die Implementationen in MATLAB oder MAPLE benutzen etwas robustere Varianten des Newtonverfahrens.

Trotzdem:
Es gibt **keinen universellen Algorithmus** zum Lösen von nichtlinearen Gleichungssystemen wie etwa die Gauss-Elimination für lineare Systeme.

Beispiel Verbrennungsreaktion $A \rightarrow B$

Gesucht sind Gleichgewichte der chemischen Reakion $A \rightarrow B$ bestimmt durch

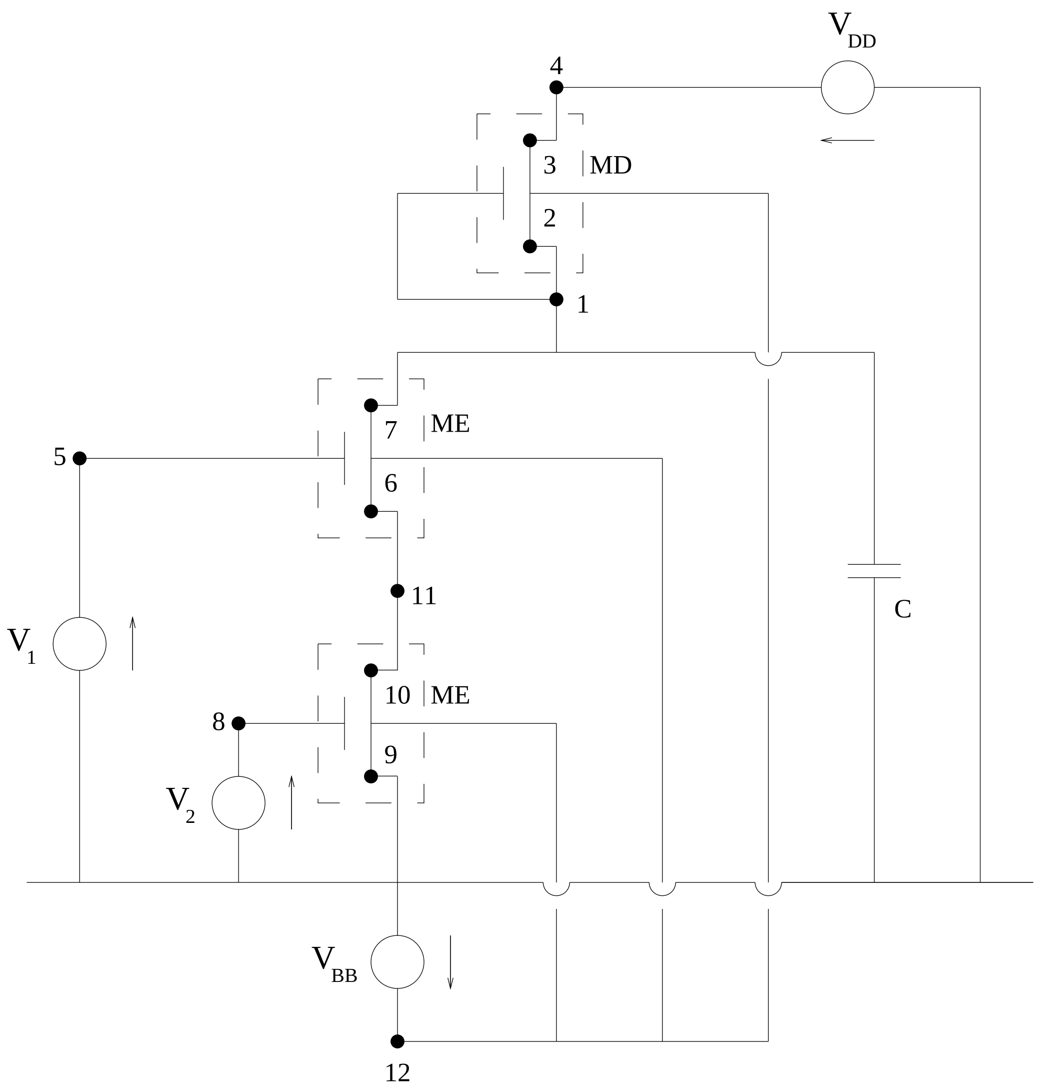
$$\boxed{\begin{aligned} 0 \;\; (= \dot{c}) &= -c + p_1 (1-c)\, e^T \\ 0 \;\; (= \dot{T}) &= -T + p_1 p_2 (1-c)\, e^T - p_3 T \end{aligned}}$$

c		— Konzentration von B
T		— Temperatur
p_1	$= 0.105509$	— Antrieb
p_2	$= 14$	— Exothermik der Reaktion
p_3	$= 2$	— Kühlung

$$\Longrightarrow$$

MAPLE-Demonstration

Beispiel aus der Elektrotechnik — NAND-Gatter



Modifizierte Knotenanalyse:

$$\begin{aligned} \text{dim} &= 16 \\ &= 12 \text{ Knoten} \\ &\quad + 4 \text{ Spannungs-quellen} \end{aligned}$$

Nichtlineare Widerstände in den 3 MOSFETs.

$\Rightarrow$

Gleichgewicht erfüllt nichtlineares Gleichungssystem der Dimension 16.

Noch ein Beispiel — Verbrennung zur Wärmegewinnung

Konzentration c des Produkts und Temperatur T erfüllen das **nichtlineare Randwertproblem**

$$\boxed{\begin{aligned}
\dot{c}(t) &= \gamma\, c(t)\,[1-c(t)]\,e^{T(t)}\\
\dot{T}(t) &= c(t)\,[1-c(t)]\,e^{T(t)} - \alpha\, T(t)\\
0 &= T(-\infty)\\
0 &= T(+\infty)
\end{aligned}}$$

c		— Konzentration des Produkts
T		— Temperatur
γ	$= 0.01$	— Reaktionsgeschwindigkeit
α		— Wärmeentnahme

Dimension des Problems $=$„∞“.
Gesucht ist ein α, so dass insgesamt möglichst viel Wärme produziert wird, aber keine Explosion stattfindet.

Parameterfortsetzung

Einfache Lösung des Problems „Wie beschaffe ich einen guten Startwert?“:
Langsames Variieren eines Parameters

Beispiel $A \to B$:

$$\boxed{\begin{aligned} 0 &= -c + p_1\,(1-c)\,e^T \\ 0 &= -T + p_1\,p_2\,(1-c)\,e^T - p_3\,T \end{aligned}}$$

Wenn $p_1 = 0$ ist, ist $c = T = 0$ Lösung.

$\Longrightarrow$ Erhöhe $p_1 = 0$ in kleinen Schritten bis zum gewünschten Wert.
Starte in jedem Schritt das Newtonverfahren mit der Lösung vom vorherigen Schritt.

$\Longrightarrow$ MAPLE-Demonstration

Parameterfortsetzung

Allgemeiner Algorithmus:

- Gesucht wird ein x mit

$$\boxed{f(x,p) = 0, \qquad x \in \mathbb{R}^n, \qquad f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n, \quad p \in \mathbb{R}.}$$

- Für p_0 ist Lösung x_0 bekannt: $f(x_0, p_0) = 0$.
- Wähle Schrittweite $1/N$.
- Iteration:

$$\boxed{\begin{array}{rcl} p_{k+1} & = & p_k + (p - p_0)/N \\ x_{k+1} & = & \text{Lösung von } f(x_{k+1}, p_{k+1}) = 0 \text{ mit} \\ & & \text{Newtonverfahren und Startwert } x_k. \end{array}}$$

  ergibt Punkte auf der **Lösungskurve** $x(p)$ mit $f(x(p), p) = 0$.
- Nachteil: Scheitert an Umkehrpunkten
- **Idee:** Behandeln x und p gleich: $\qquad y = (x, p) \in \mathbb{R}^{n+1}$.

Verbesserung: Kurvenfortsetzung

Aufgabe

$$\boxed{f(y) = 0, \qquad y \in \mathbb{R}^{n+1}, \qquad f : \mathbb{R}^{n+1} \to \mathbb{R}^n.}$$

hat eine **Lösungskurve** in $\mathbb{R}^{n+1}$.

Start ein y_0 mit $f(y_0) = 0$, die Tangente t_0 an Lösungskurve in y_0, Schrittweite h.

Prädiktor Gehen die Tangente entlang: $y^P_{k+1} = y_k + h\, t_k$

Korrektur

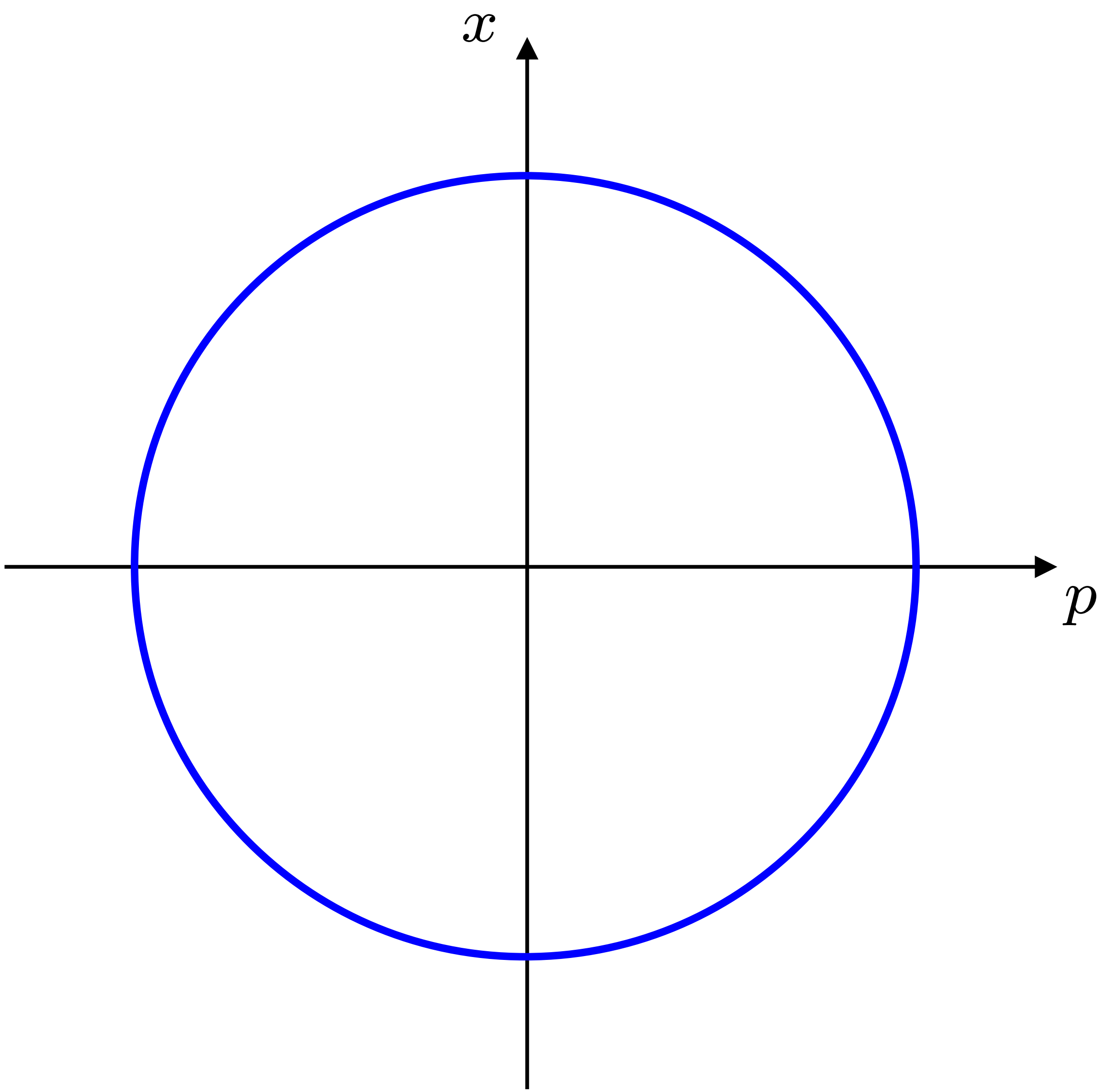
$$\boxed{\begin{aligned} 0 &= f(y_{k+1}) \\ 0 &= \left(y_{k+1} - y^P_{k+1}\right)^T t_k \end{aligned}}$$

lösen nach y_{k+1} mit dem Newtonverfahren und dem Prädiktor y^P_{k+1} als Startwert.

Tangente Lösen nach t_{k+1}:

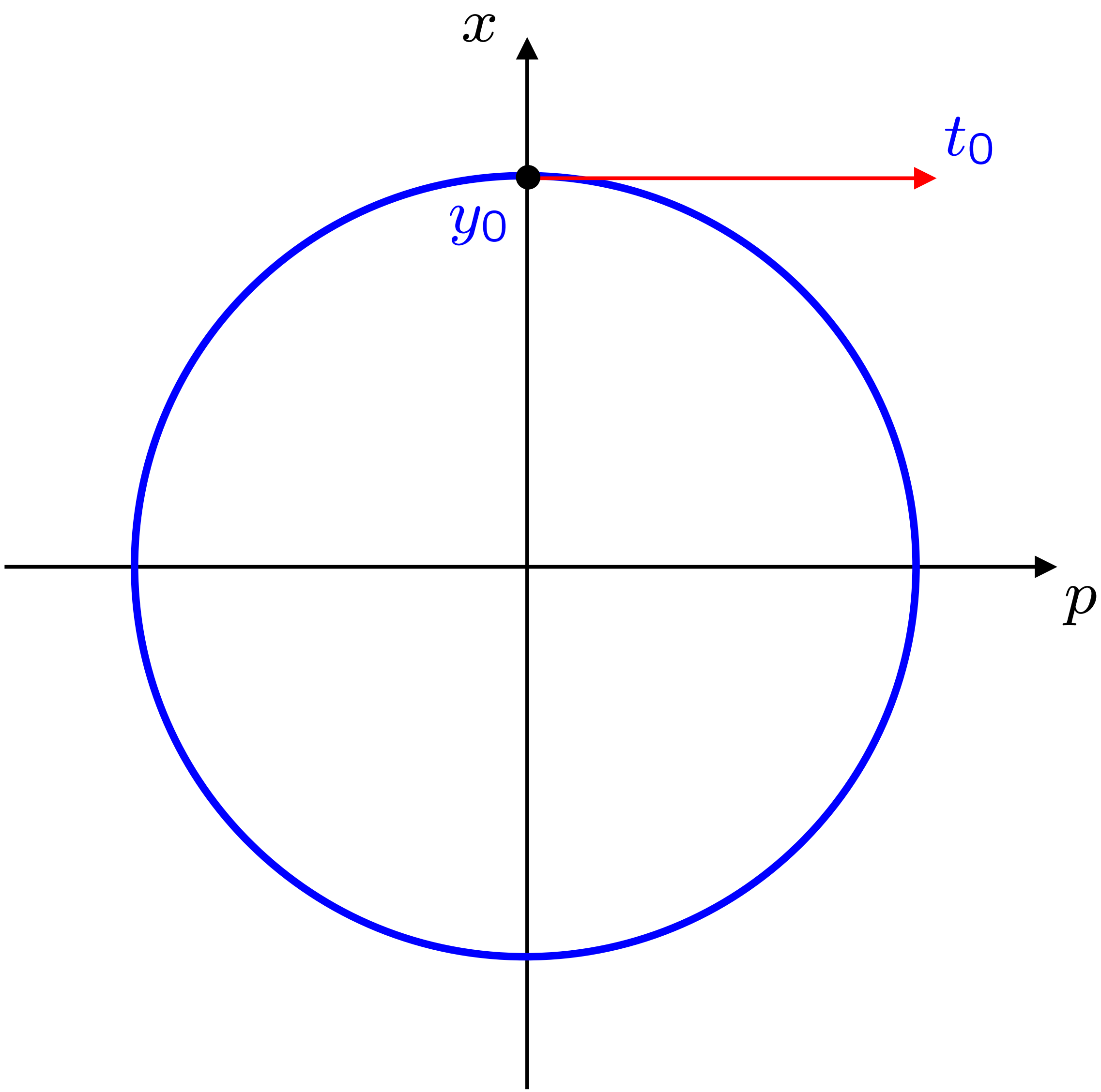
$$\boxed{\begin{aligned} 0 &= \left[\frac{\partial f}{\partial y}(y_{k+1})\right] t_{k+1} \\ 1 &= t_k{}^T t_{k+1} \end{aligned}}$$

Illustration



$$
\begin{aligned}
y &= (x, p) \\
0 &= f(y) \\
&= x^2 + p^2 - 1
\end{aligned}
$$

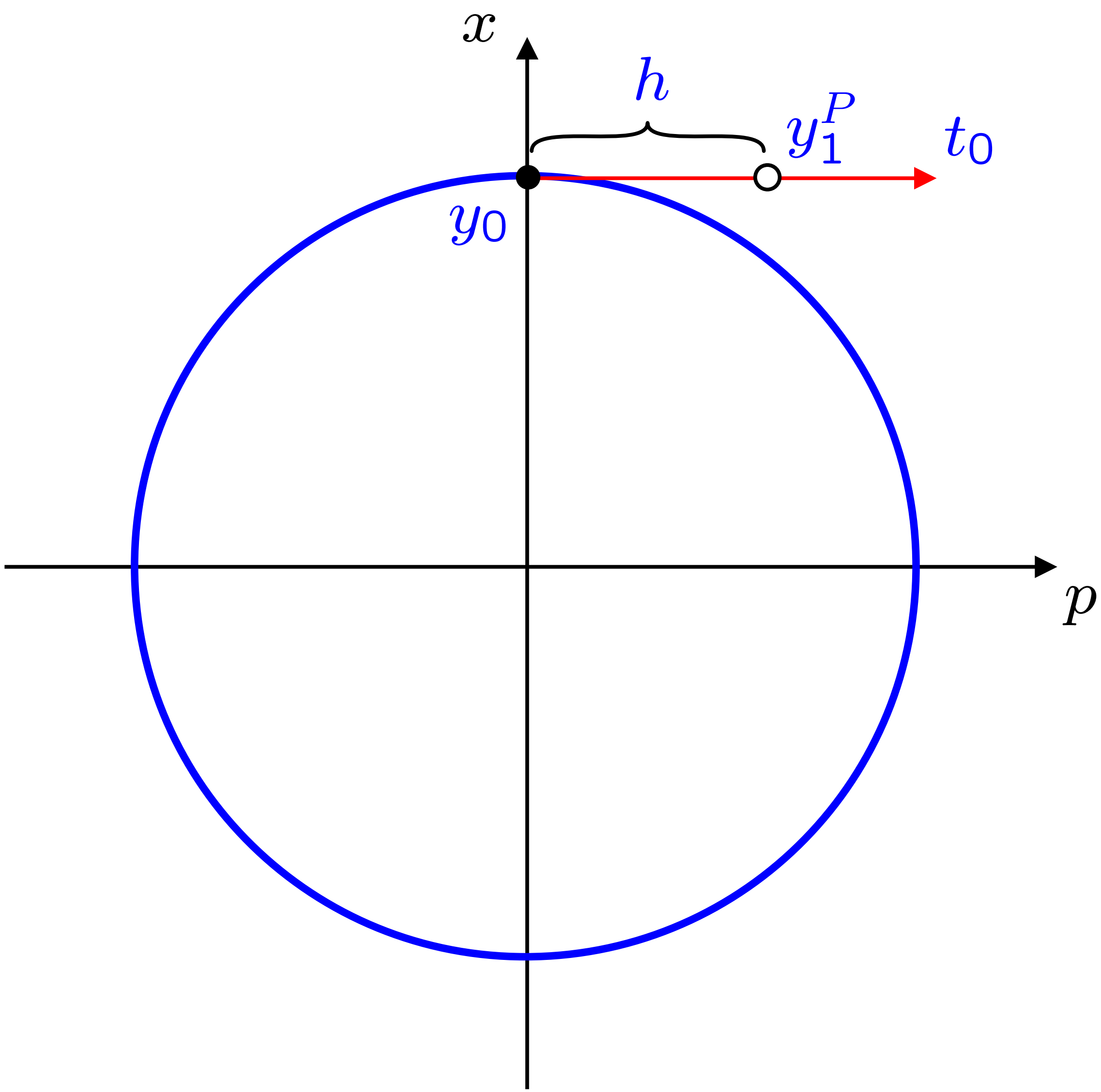
Illustration



$$\begin{aligned} y &= (x, p) \\ 0 &= f(y) \\ &= x^2 + p^2 - 1 \end{aligned}$$

Schrittweite $h \ll 1$

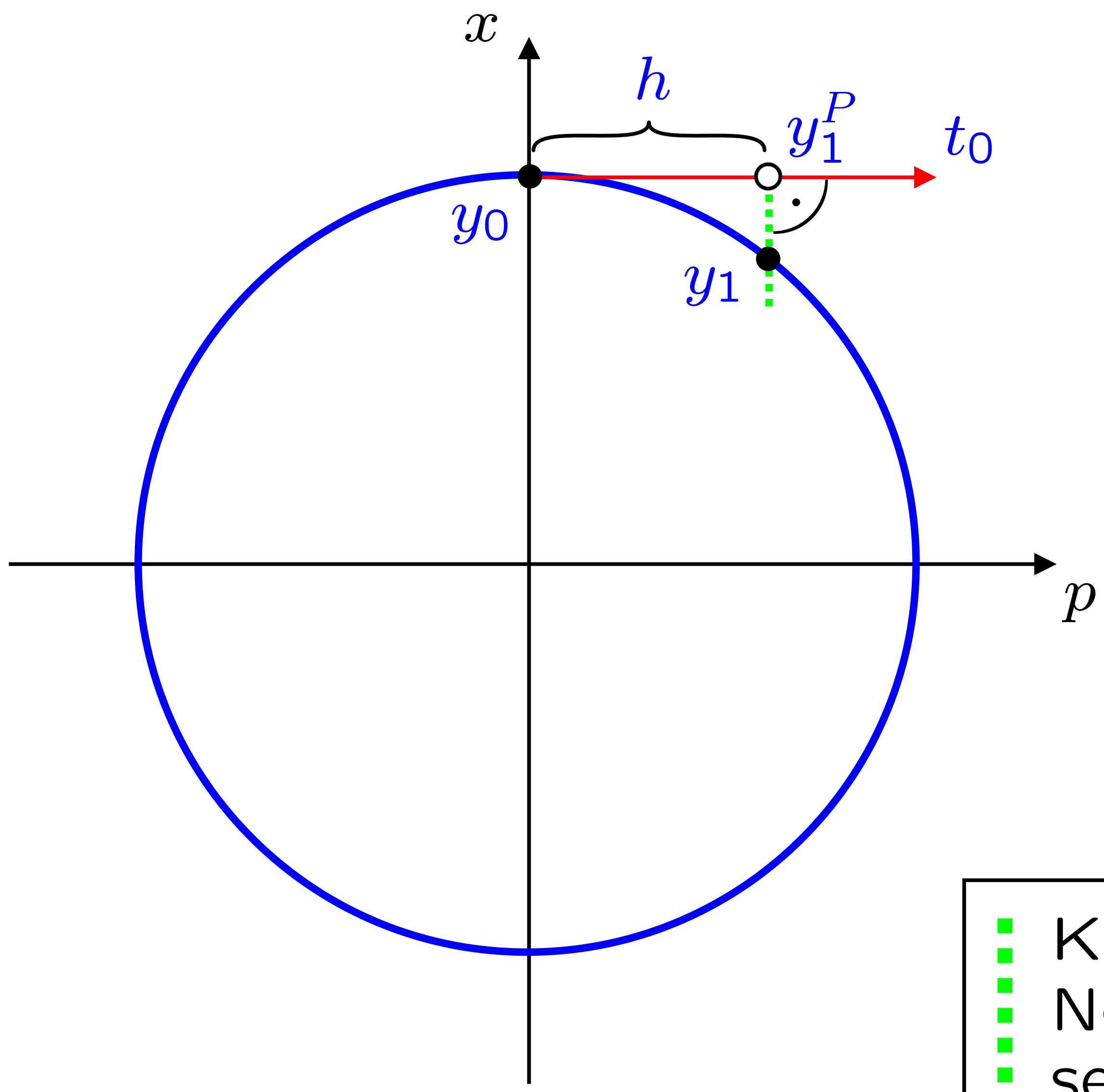
Illustration



$$\boxed{\begin{aligned} y &= (x,p) \\ 0 &= f(y) \\ &= x^2+p^2-1 \end{aligned}}$$

Schrittweite $h \ll 1$

Illustration

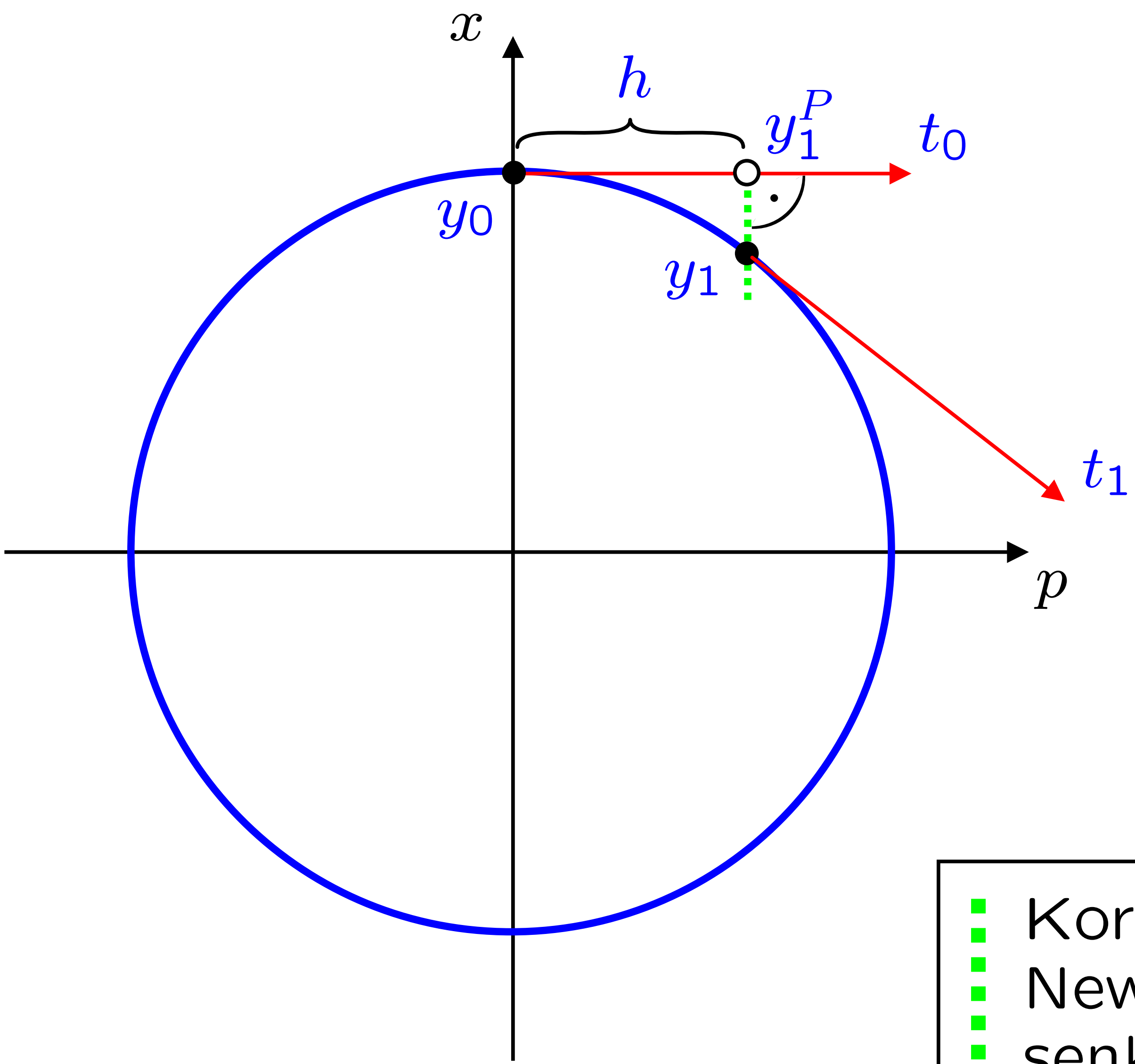


$$
\begin{aligned}
y &= (x,p)\\
0 &= f(y)\\
&= x^2+p^2-1
\end{aligned}
$$

Schrittweite $h \ll 1$

- Korrektur durch Newtonverfahren senkrecht zur Tangente

Illustration

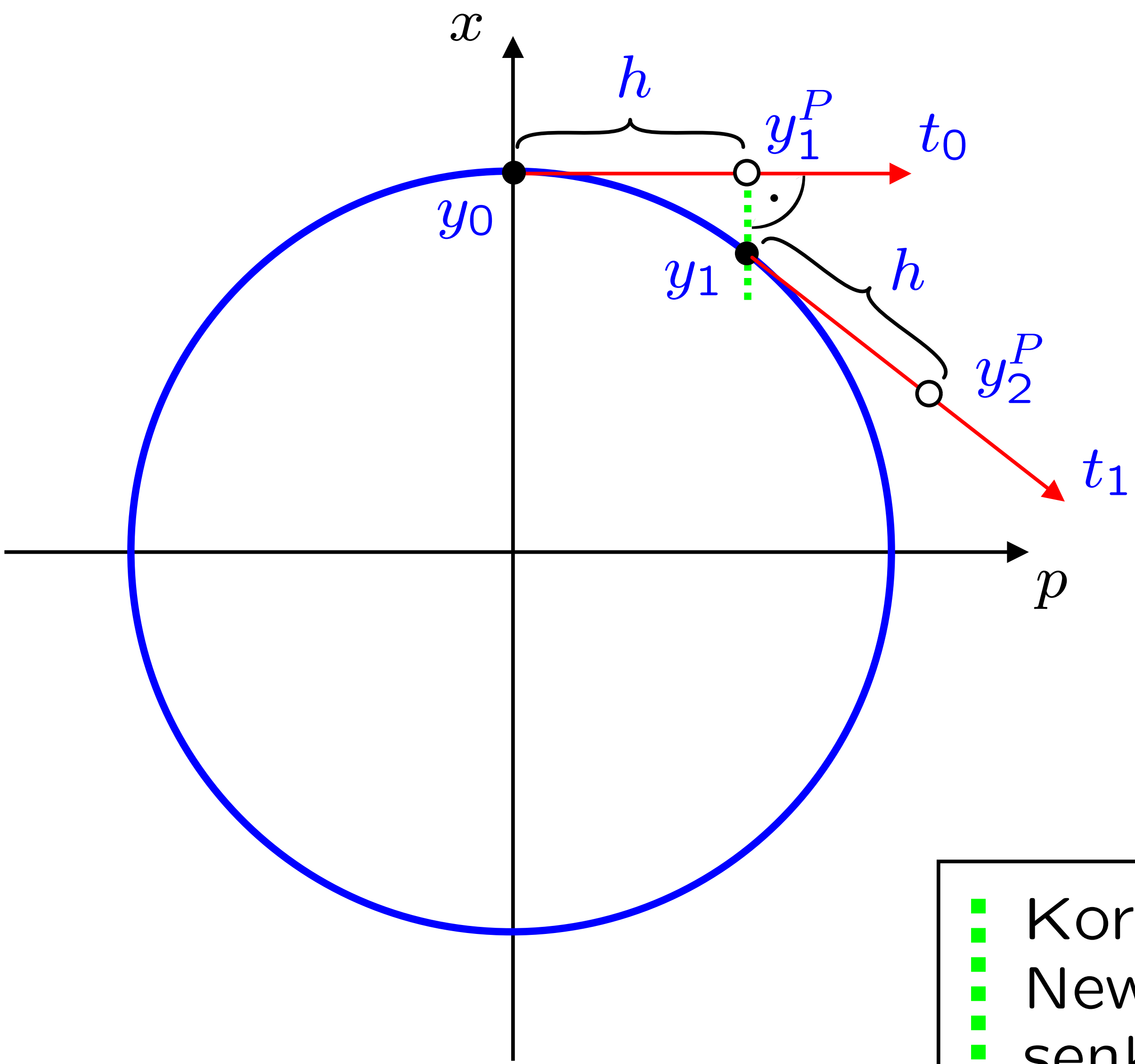


$$
\begin{aligned}
y &= (x, p) \\
0 &= f(y) \\
&= x^2 + p^2 - 1
\end{aligned}
$$

Schrittweite $h \ll 1$

- Korrektur durch Newtonverfahren senkrecht zur Tangente

Illustration

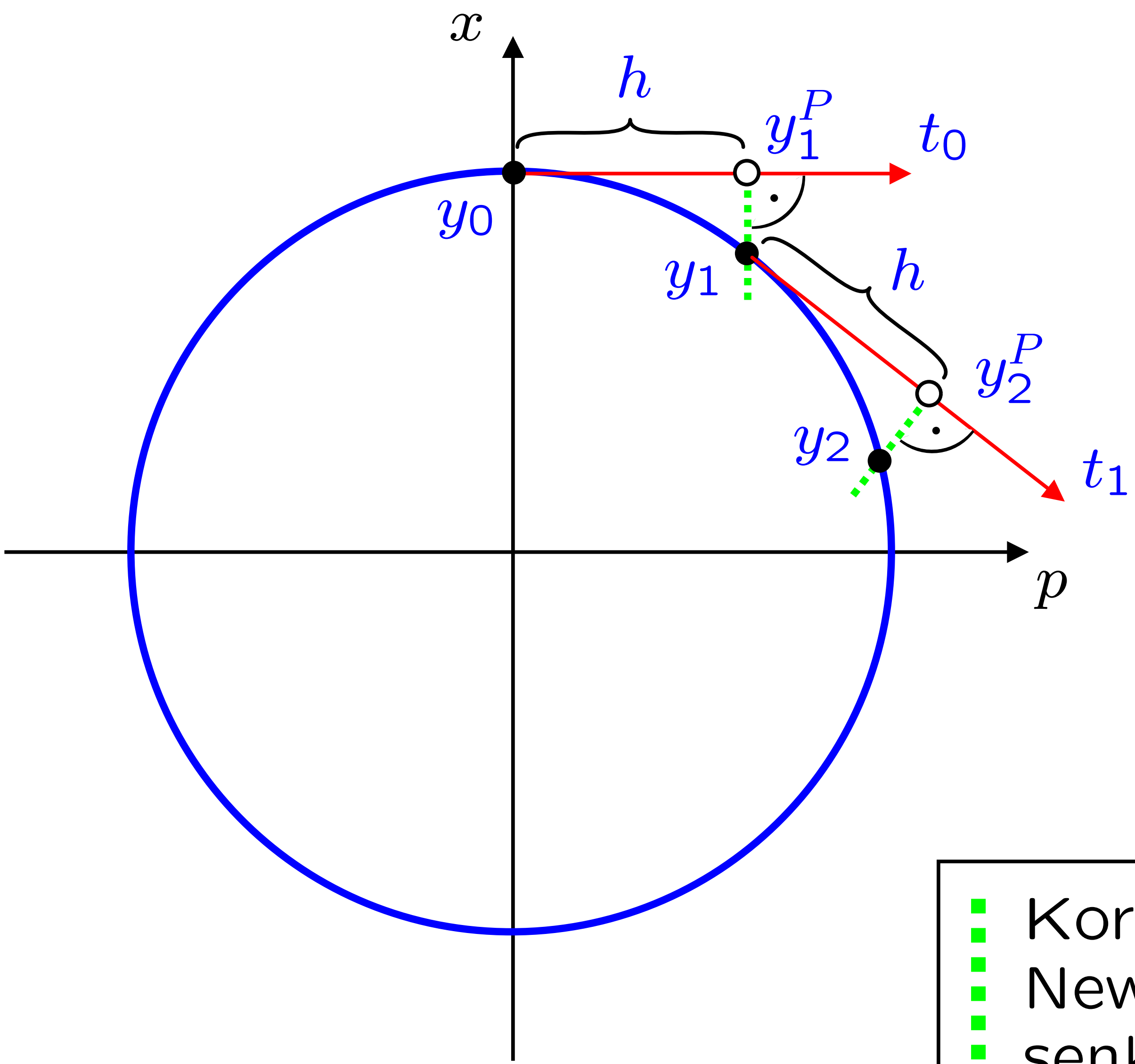


$$
\begin{aligned}
y &= (x, p) \\
0 &= f(y) \\
&= x^2 + p^2 - 1
\end{aligned}
$$

Schrittweite $h \ll 1$

Korrektur durch Newtonverfahren senkrecht zur Tangente

Illustration

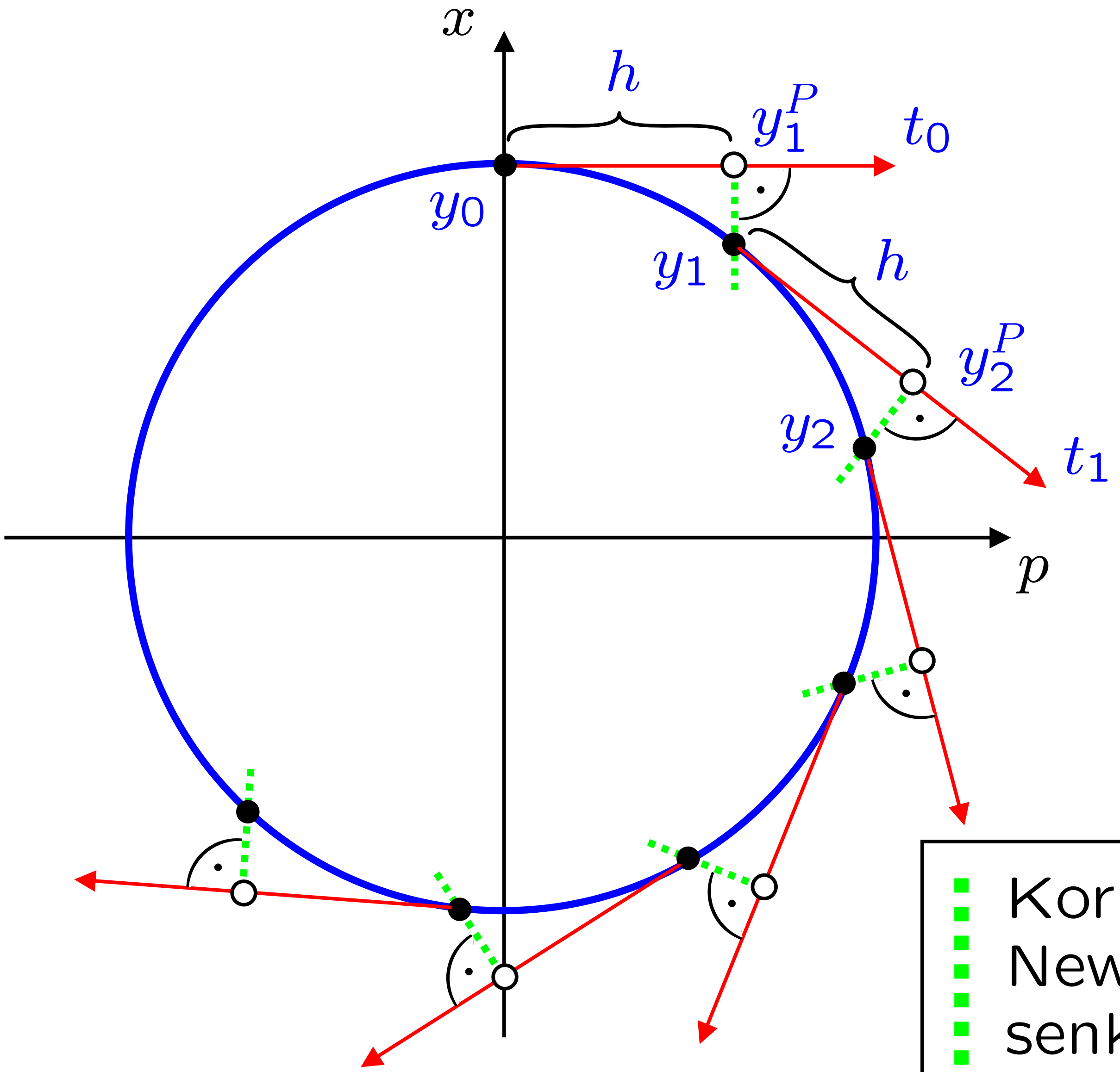


$$
\begin{aligned}
y &= (x,p)\\
0 &= f(y)\\
&= x^2+p^2-1
\end{aligned}
$$

Schrittweite $h \ll 1$

Korrektur durch Newtonverfahren senkrecht zur Tangente

Illustration



$$\begin{aligned} y &= (x,p) \\ 0 &= f(y) \\ &= x^2 + p^2 - 1 \end{aligned}$$

Schrittweite $h \ll 1$

Korrektur durch Newtonverfahren senkrecht zur Tangente

Weitere Verbesserungen:

- variable Schrittweite h
- Erkennen von Verzweigungspunkten, Abzweigen an Verzweigungen
- Erkennen, Verfolgen von Umkehrpunkten
- Berechnung der dynamischen Stabilität, Erkennen und Verfolgen von Stabilitätswechseln

Klassisches Softwarepaket:

AUTO (Autor der Originalversion: E. Doedel), aktuelle Version frei verfügbar (LGPL) unter

`http://auto2000.sourceforge.net`

Abschließendes kleines Testproblem

Die Funktion

$$\boxed{f(\lambda) \;=\; e^{-\lambda} - \lambda - 1}$$

hat eine reelle Nullstelle (0), aber unendlich viele komplexe Nullstellen. (Die Nullstellen von f sind Eigenwerte eines Differentialoperators.)

Wie findet man die anderen Nullstellen?