Einführung in Computational Engineering
Grundlagen der Modellierung und Simulation

Dr. Arne Nägel

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

Wintersemester 2012/2013

Lösungsvorschlag der 6. Übung

Aufgabe 1 Fixpunktiteration und Newtonverfahren (10 Punkte)

Zunächst soll die nichtlineare Gleichung $f(x) = 0$, mit $f(x) = \mathrm{e}^{2x} + 3x - 8$, durch iterative Verfahren gelöst werden. Die Funktion f hat im Intervall $[0, 1]$ eine Nullstelle. Deren Darstellung mit hoher Genauigkeit lautet $x^* = 0.848\,280\,764\,624\,028$.

Zunächst zur Fixpunktiteration:

a) Begründen Sie, warum $x = \frac{1}{2}\ln(-3x + 8)$ eine äquivalente Fixpunktform zum Nullstellenproblem $f(x) = 0$ ist

b) Führen Sie vier Schritte mit dieser Fixpunktiteration ausgehend vom Startwert $x_0 = 0.5$ aus. Geben Sie jeweils mindestens 8 Nachkommastellen an und markieren Sie die gültigen Stellen der jeweiligen Näherungslösung. Skizzieren Sie Ihr Vorgehen in der vorbereiteten Abbildung 1.

Außerdem soll das Problem $f(x) = 0$ mit dem Newtonverfahren gelöst werden:

c) Geben Sie die Iterationsvorschrift des Newton-Verfahrens an.

d) Führen Sie vier Schritte ausgehend von $x_0 = 0.5$ aus. Verwenden Sie wieder mindestens 8 Nachkommastellen und markieren Sie die gültigen Stellen der jeweiligen Näherungslösung. Skizzieren Sie Ihr Vorgehen in der vorbereiteten Abbildung 2.

e) Ist das Newton-Verfahren für dieses Beispiel quadratisch konvergent? Woran können/würden Sie das mithilfe einer exakten Lösung erkennen?

Lösungsvorschlag

a) Umstellen von $\mathrm{e}^{2x} + 3x - 8 = 0 \Longleftrightarrow \mathrm{e}^{2x} = -3x + 8$ führt nach logarithmieren direkt auf die gegebene Fixpunktform (1 Punkt).

b) Die Werte $x_{k+1} = \ln(-3x_k + 8)$ finden sich in der zweiten Spalte von Tabelle 1; Die grafische Darstellung in Abbildung 1 (3 Punkte).

c) Als Iterationsvorschrift ergibt sich (1 Punkt): $x_0 = 0.5$ und

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)} = x_k - \frac{\mathrm{e}^{2x_k} + 3x_k - 8}{2\mathrm{e}^{2x_k} + 3}, k = 0, 1, 2, \ldots$$

d) Die Werte zur o.g. Iteration finden sich in der dritten Spalte von Tabelle 1; die grafische Darstellung in Abbildung 2 (3 Punkte).

e) Das Newton-Verfahren ist quadratisch konvergent. Das ist erkennbar an der Verdopplung der korrekten Ziffern von Iterationsschritt zu Iterationsschritt. Man sieht auch, dass dies nur „in der Nähe“ der Lösung, und nicht allgemein gilt (2 Punkte).

Tabelle 1: Konvergenz der Fixpunktiteration (links) und des Newtonverfahrens (rechts). Der Trennstrich | gibt die gültigen Ziffern dar.

k	x_k (Fixpunkt)	x_k (Newton)
0	0|.500000000000000	0|.500000000000000
1	0|.935901088450796	0|.948253379613855
2	0.8|23588065025279	0.8|55921057354023
3	0.8|55024807596863	0.848|326466468107
4	0.84|6422913616840	0.84828076|6262214
5	0.848|791355518058	0.848280764624028|

Aufgabe 2 Newtonverfahren und Liniensuche (10 Punkte)

In dieser Aufgabe soll ein Problem betrachtet werden, bei welchem das Newtonverfahren nicht für alle Startwerte konvergiert. Dazu wird die Funktion

$$f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}, x \mapsto \arctan x$$

betrachtet. Diese hat bei $x = 0$ die einzige Nullstelle, der Verlauf im Intervall $[-4, 4]$ ist in Abbildung 3 dargestellt.

a) Geben Sie die Iterationsvorschrift des Newton-Verfahrens (einfache Form) an.

b) Untersuchen Sie experimentell das Verhalten des Newton-Verfahrens für die Startwerte $x_0 = 0.5$ und $x_0 = 2$. Geben Sie dazu die drei ersten Iterierten x_1, x_2, x_3 an. Untersuchen Sie, ob das Verfahren konvergiert oder divergiert. Zeichnen Sie das Verfahren für $x_0 = 2$ soweit möglich in Abbildung 3 ein.

Allgemein kann man zeigen, dass das Newton-Verfahren für Startwerte

$$\arctan(|x_0|) \geq \frac{2|x_0|}{1 + x_0^2}$$

divergiert. Wir wollen nun durch eine geeignete *Schrittweitensteuerung* ein Verfahren kontruieren, dass auch in einem größeren Bereich konvergiert. Dazu verwendet man die Vorschrift

$$x_{k+1} = x_k + \lambda_k s_k, \quad s_k := -\frac{f(x_k)}{f'(x_k)}.$$

Hierbei ergibt sich die Korrektur von x_k aus dem Schritt s_k des einfachen Newtonverfahrens, der mit einer Schrittweite λ_k gedämpft wird. Für jede Iteration k soll wird dabei $\lambda_k \in \{1/8, 1/4, 1/2, 1\}$ so gewählt werden, dass der Wert der nächsten Iterierten $f(x_k + \lambda_k s_k)^2 > 0$ minimal ist.

c) Führen Sie das Newtonverfahren mit Schrittweitensteuerung für den Startwert $x_0 = 2$ aus.

d) Skizzieren Sie das Verfahren aus c) in Abbildung 3. Zeichnen Sie dazu die Iterierten x_k ein und skizzieren dort ebenfalls die Tangenten an f. Außerdem sollen die testweise untersuchten Werte $x_k + \lambda_k s_k$ eingezeichnet werden.

Tabelle 2: Iterierte des Newtonverfahrens für $x_0 = 0.5$

k	x_k	$f(x_k)$	$f'(x_k)$	s_k	$f(x_k+s_k)$
0	0.500	0.464	0.800	-0.580	-0.079560
1	-0.080	-0.079	0.994	0.080	0.000335
2	0.000	0.000	1.000	0.000	0.000000
3	0.000	0.000	1.000	0.000	0.000000
4	0.000	0.000	1.000	0.000	0.000000

Tabelle 3: Iterierte des Newtonverfahrens für $x_0 = 2$

k	x_k	$f(x_k)$	$f'(x_k)$	s_k	$f(x_k+s_k)$
0	2.000	1.107	0.200	-5.536	-3.535744
1	-3.536	-1.295	0.074	17.487	13.950959
2	13.951	1.499	0.005	-293.295	-279.344067
3	-279.344	-1.567	0.000	122296.343	122016.998918
4	122016.999	1.571	0.000	-23386126214.933	-23386004197.933900

Lösungsvorschlag

a) Da $\arctan' x = \frac{1}{1+x^2}$ gilt $x_k := x_k + (1+x^2)\arctan x$ (2 Punkte).

b) Siehe Tabellen 2 und 3 (2 Punkte): Das Verfahren konvergiert für $x_0 = 0.5$ und divergiert für $x_0 = 2$ (1 Punkt).

c) Siehe Tabelle 4 (3 Punkte).

d) Siehe Abb. 3.(2 Punkte)

Tabelle 4: Newton-Verfahren mit Schrittweitensteuerung.

					$x_k + \lambda s_k$				$f(x_k + \lambda s_k)$			
k	x_k	$f(x_k)$	$f'(x_k)$	s_k	$\lambda = 1$	1/2	1/4	1/8	$\lambda = 1$	1/2	1/4	1/8
0	2.000	1.107	0.200	-5.536	-3.535744	-0.767872	0.616064	1.308032	-1.295169	-0.654841	0.552148	0.918075
1	0.616	0.552	0.725	-0.762	-0.145643	0.235211	0.425637	0.520851	-0.144626	0.231012	0.402410	0.480189
2	-0.146	-0.145	0.979	0.148	0.002051	-0.071796	-0.108719	-0.127181	0.002051	-0.071673	-0.108294	-0.126502
3	0.002	0.002	1.000	-0.002	0.000000	0.001025	0.001538	0.001795	0.000000	0.001025	0.001538	0.001795
4	0.000	0.000	1.000	0.000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000

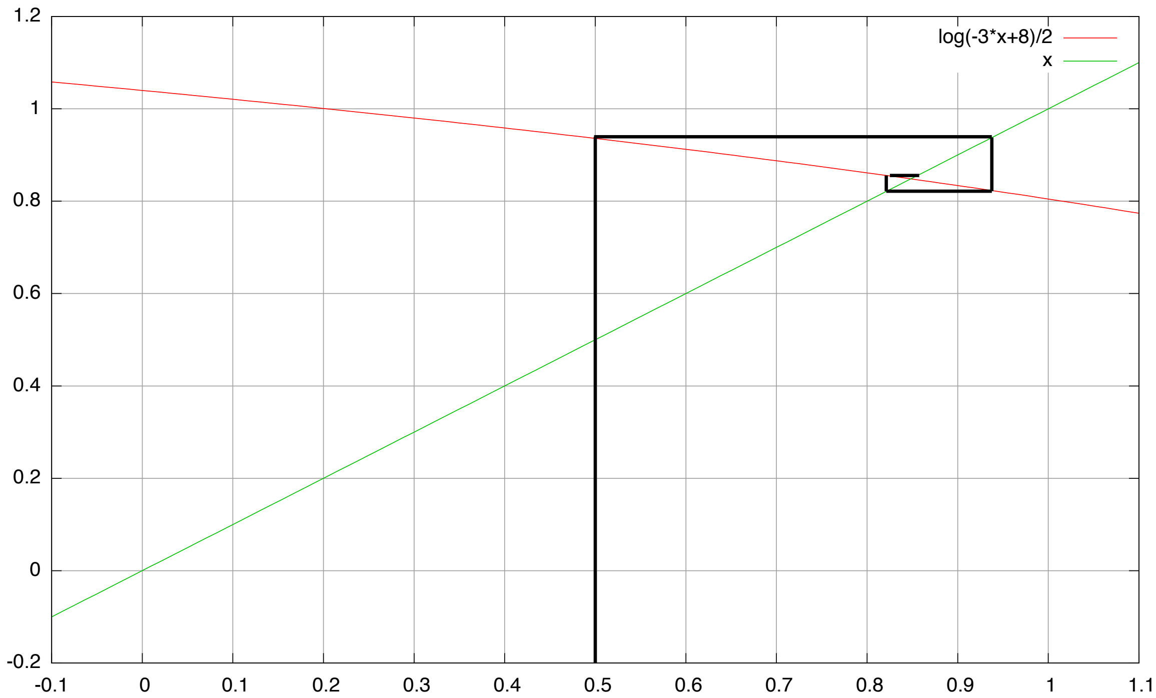

Abbildung 1: Skizze der Lösung zu Aufgabenteil 1a)

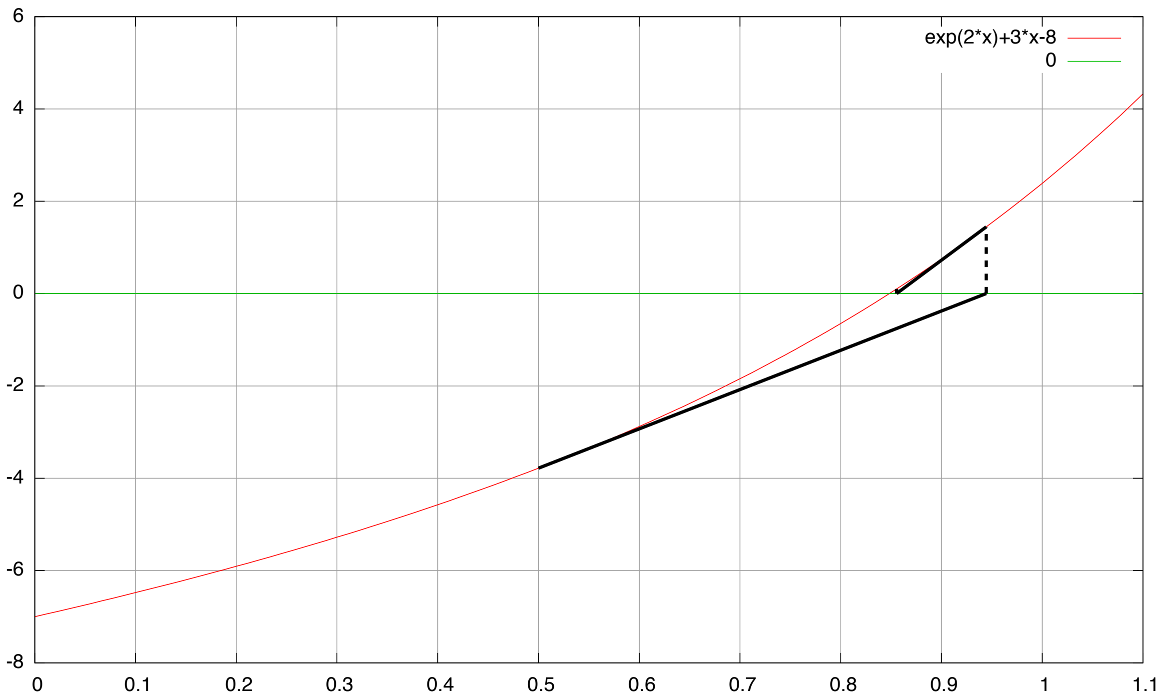

Abbildung 2: Skizze der Lösung zu Aufgabenteil 1b)

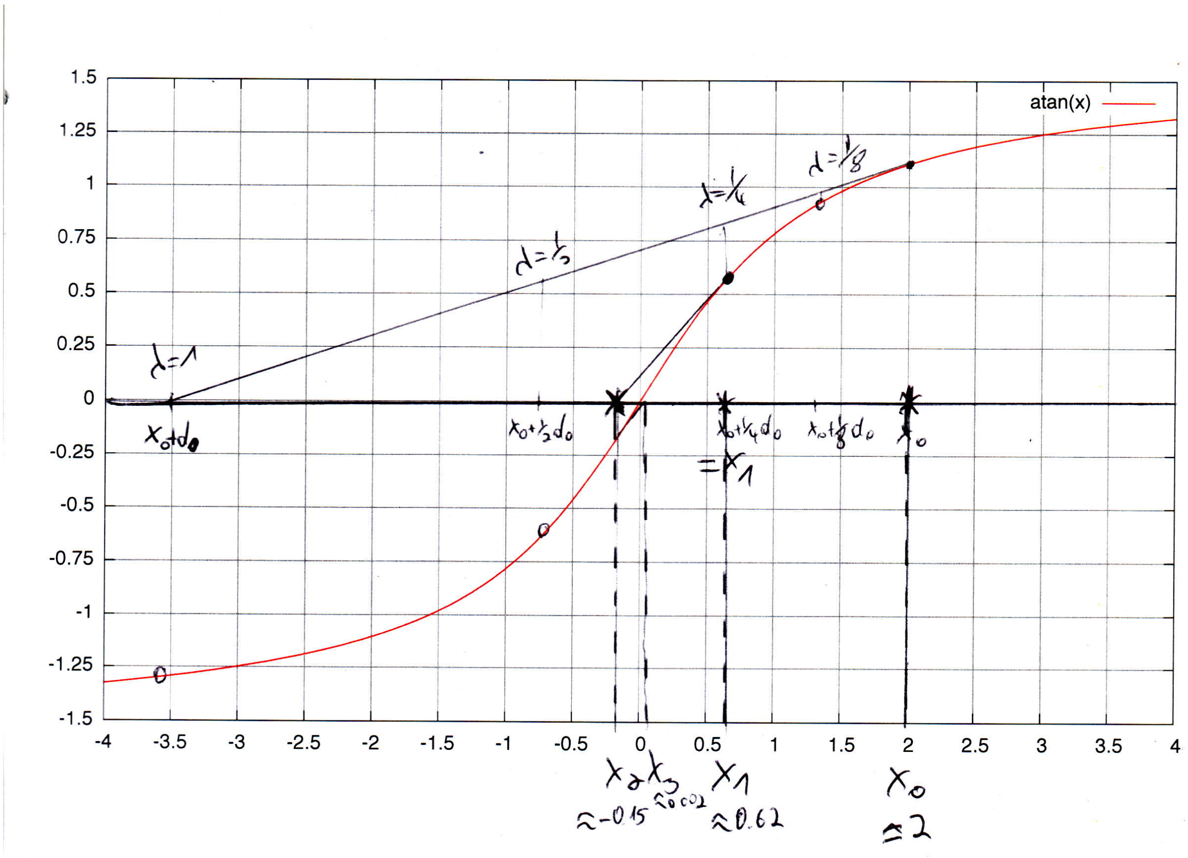

Abbildung 3: Skizze der Lösung zu Aufgabenteil 2 d)