Kapitel 2

Nichtlineare Gleichungssysteme

Problem: Für vorgegebene Abbildung $f : D \subset \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ finde $x \in \mathbb{R}^n$ mit

$$f(x) = 0 \tag{2.1}$$

oder ausführlicher

$$\begin{aligned} f_1(x_1, \dots, x_n) &= 0, \\ &\vdots \\ f_n(x_1, \dots, x_n) &= 0. \end{aligned}$$

Einerseits führt die mathematische Modellierung auf Gleichungssysteme der Form (2.1), andererseits treten bei vielen Anwendungen solche Systeme als Teilprobleme auf. Während es im linearen Fall eine vollständige Lösungstheorie gibt, lässt sich Gleichung (2.1) für nichtlineares f im Allgemeinen nicht ansehen, ob sie eine Lösung besitzt.

Beispiel 11. *keine Lösung:* $f(x) = e^x$
mehrere Lösungen: $f(x) = x^2 - a$
unendlich viele Lösungen: $f(x) = x \sin \frac{1}{x}$

Lösungen lassen sich zudem nur in einigen speziellen Situationen explizit angeben und selbst die analytische Lösung kann unter Umständen erst nach dem Lösen eines Problems der Form (2.1) numerisch ausgewertet werden.

Beispiel 12. *Tatsächlich wird die Quadratwurzel einer positiven reellen Zahl a als Nullstelle der Nichtlinearen Gleichung*

$$x^2 - a = 0$$

interpretiert und durch ein Iterationsverfahren näherungsweise bestimmt. Auch das Lösen einer allgemeinen quadratischen Gleichung

$$x^2 + px + q = 0$$

mit analytischer Lösung

$$x_{1,2} = -\frac{p}{2} \pm \frac{1}{2}\sqrt{p^2 - 4q}$$

lässt sich numerisch nur bei Kenntnis der entsprechenden Quadratwurzel durchführen.

Im linearen Fall war es möglich die Lösung "exakt" (bis auf Rundungsfehler) z.B. mit dem Gaußschen Eliminationsverfahren zu berechnen. Für nichtlineares f werden wir uns im Allgemeinen mit einer Näherungslösung zufrieden geben müssen, welche zusätzlich zu den Rundungsfehlern mit Verfahrensfehlern (genauer Abbruchfehlern) behaftet ist.

2.1 Fixpunktiterationen

Problem: Für vorgegebene Abbildung $F : D \subset \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ finde $x \in \mathbb{R}^n$ mit

$$F(x) = x \tag{2.2}$$

Definition 6. *Ein Element $x^* \in D$ heißt Fixpunkt von F, falls (2.2) gilt. Im eindimensionalen Fall sind Fixpunkte genau die Stellen, wo der Graph die Winkelhalbierende (des I und III Quadranten) schneidet.*

Zusammenhang zu Nullstellengleichungen der Form (2.1): Problem (2.2) ist offenbar äquivalent zu

$$-Af(x) = 0,$$

falls die Matrix $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ invertierbar ist. Insbesondere ist somit die Nullstellengleichung

$$f(x) = 0$$

äquivalent zu der Fixpunktgleichung

$$F(x) = x$$

mit $F(x) := x - Af(x)$. Diese Überlegungen bleiben auch für von x abhängiges A richtig, sofern $A(x) \in \mathbb{R}^{n\times n}$ invertierbar ist.

Idee der Fixpunktiteration: Geschicktes Umformen der Nullstellengleichung (2.1) in eine Fixpunktgleichung der Form (2.2) und Berechnung der Folge $\{x_i\}_{i\in\mathbb{N}}$ ausgehend von einem Startwert x_0 gemäß der Vorschrift

$$x_{k+1} = F(x_k),$$

wobei die so definierte Folge gegen einen Fixpunkt x^* konvergiert, der auch Problem (2.1) löst.

Beispiel 13. *Die Nullstellengleichung $x^2 - 3 = 0$ besitzt genau dieselben Lösungen wie die Fixpunktgleichungen*

$$\begin{aligned} x = F_1(x) &:= x - \frac{x^2-3}{2x} \\ x = F_2(x) &:= x - \frac{x^2-3}{4}. \end{aligned}$$

Berechnung der Iterierten in double precision liefert:

F_1			F_2		
x_0	$=$	2	x_0	$=$	2
x_1	$=$	$\underline{1.7}5$	x_1	$=$	$\underline{1.7}5$
x_2	$=$	$\underline{1.732}1$	x_2	$=$	$\underline{1.73}4$
x_3	$=$	$\underline{1.7320508}1$	x_3	$=$	$\underline{1.732}4$
x_4	$=$	$\underline{1.732050807568877}$	x_4	$=$	$\underline{1.7320}92$
x_5	$=$	$\underline{1.732050807568877}$	x_5	$=$	$\underline{1.73205}6$

Beispiel 14. *Die Nullstellengleichung $2x - \tan x = 0$, $x \in]-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}[$, besitzt genau dieselben Lösungen wie die Fixpunktgleichungen*

$$\begin{aligned} x = F_1(x) &:= \frac{1}{2}\tan x \\ x = F_2(x) &:= \arctan(2x). \end{aligned}$$

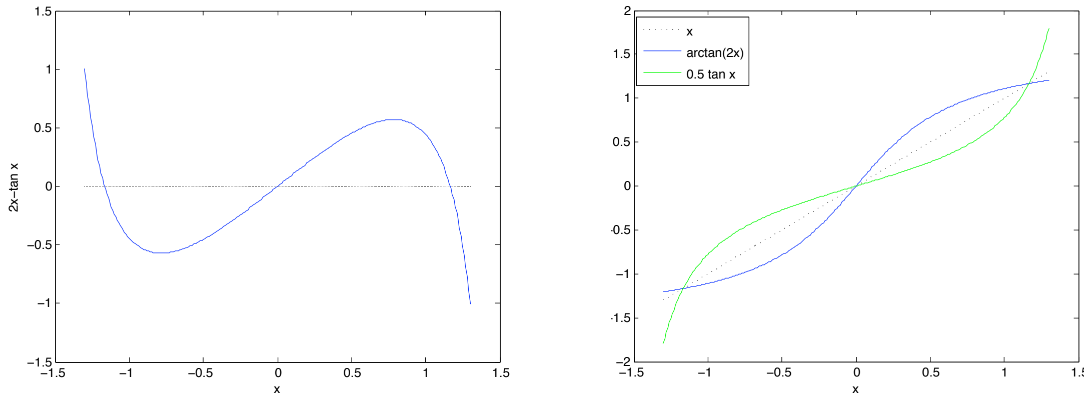

Abbildung 2.1: Links ist der Graph der Funktion $2x - \tan x$ dargestellt, rechts die Graphen von F_i.

Berechnung der Iterierten in double precision liefert:

F_1			F_1			F_2		
x_0	$=$	1	x_0	$=$	1.2	x_0	$=$	1.2
x_1	$=$	0.78	x_1	$=$	1.286	x_1	$=$	1.176
x_2	$=$	0.49	x_2	$=$	$1.708 > \pi/2$	x_2	$=$	1.1688
x_3	$=$	0.27				x_3	$=$	1.1666
x_4	$=$	0.14				x_4	$=$	1.1659
x_5	$=$	0.069				x_5	$=$	1.16566
x_6	$=$	0.035				x_6	$=$	1.165591
x_7	$=$	0.017				x_7	$=$	1.165571
$\vdots$						$\vdots$		
x_{27}	$=$	0.000000166				x_{27}	$=$	1.165561185207212
x_{28}	$=$	0.0000000083				x_{28}	$=$	1.165561185207212

Der Banachsche Fixpunktsatz ist einer der zentralen Sätze der angewandten Mathematik. Er liefert nicht nur die Existenz und die Eindeutigkeit eines Fixpunktes, sondern auch ein konstruktives Vorgehen und nützliche Abschätzungen. Um den Satz formulieren zu können, benötigen wir den Begriff der Kontraktion.

Definition 7. *Eine Abbildung $F : D \to D \subset \mathbb{R}^n$ ist eine Kontraktion auf D, falls ein $0 \leq \theta < 1$ existiert mit*

$$\|F(x) - F(y)\| \leq \theta \|x - y\|$$

für alle $x, y \in D$. Insbesondere ist also der Abstand der Bildpunkte von x und y kleiner als der Abstand von x und y selbst.

Satz 13. *(Banachscher Fixpunktsatz)*
Es sei $F : D \to D$ eine Kontraktion auf D, D abgeschlossene Teilmenge des $\mathbb{R}^n$, mit Kontraktionszahl $0 \leq \theta < 1$.
Dann gilt:
(i) Es existiert genau ein Fixpunkt x^* von F.

(ii) Die durch die Vorschrift

$$x_{k+1} = F(x_k)$$

definierte Folge konvergiert gegen x^* für jeden Startwert $x_0 \in D$.

(iii) Es gelten die Abschätzungen

$$\begin{aligned}
\|x^* - x_k\| &\leq \theta \|x^* - x_{k-1}\| && \text{(monotone Abnahme)} \\
\|x^* - x_k\| &\leq \frac{\theta^k}{1-\theta} \|x_0 - x_1\| && \text{(a priori-Abschätzung)} \\
\|x^* - x_k\| &\leq \frac{\theta}{1-\theta} \|x_{k-1} - x_k\| && \text{(a posteriori-Abschätzung).}
\end{aligned}$$

2.2 Das Newton-Verfahren

Satz 14. *(lokal quadratische Konvergenz des Newton-Verfarens)*
Sei $D \subset \mathbb{R}^n$ offen und $f : D \to \mathbb{R}^n$ zweimal stetig differenzierbar. Es existiere ein $x^* \in D$ mit $f(x^*) = 0$. Des Weiteren sei die Jacobi-Matrix $f'(x^*)$ ausgewertet an der Nullstelle invertierbar.
Dann gibt es eine Kugel

$$K := K_\rho(x^*) \; = \; \{x \in \mathbb{R}^n | \|x - x^*\|_\infty \leq \rho\} \subset D,$$

so dass x^* die einzige Nullstelle von f in K ist. Zudem liegen die Folgeglieder

$$x_{k+1} = x_k - f'(x_k)^{-1} f(x_k)$$

für jeden Startwert $x_0 \in K$ ebenfalls in K, und es gilt

$$\lim_{k\to\infty} x_k = x^*.$$

Weiter existiert eine Konstante $C > 0$ mit

$$\|x^* - x_{k+1}\| = C\|x^* - x_k\|^2 \tag{2.3}$$

für $k \in \mathbb{N}$.

Bemerkung 12.
(i) Formelzeile (2.3) *besagt, dass die quadratische Konvergenz vorliegt.*

(ii) Ein Problem des Newton Verfahrens ist sein möglicherweise kleiner Einzugsbereich, d.h. ρ im Satz 14 ist klein (und natürlich auch unbekannt). Startet man das Newton-Verfahren zu weit von der Nullstelle entfernt, so divergiert es oft.

Anschauung für $n = 1$: siehe Abbildung 2.2

Praktische Durchführung:

Wähle Startwert x_0
while $(\|\Delta x_k)\| > TOL$ do
  Löse $f'(x_k)\Delta x_k = -f(x_k)$ (lineares Gleichungssystem, berechne LR-Zerlegung)
  Berechne $x_{k+1} = x_k + \Delta x_k$
end do.

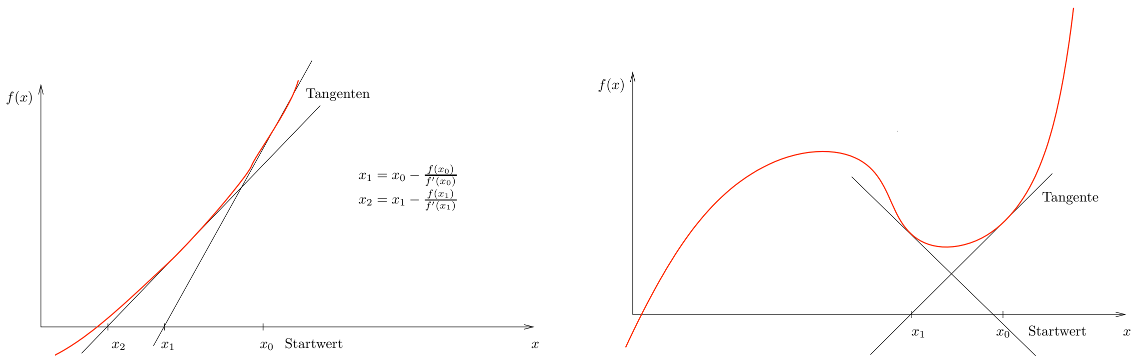

Abbildung 2.2: Links konvergiert das Newton-Verfahren, rechts lässt sich keine Konvergenz beobachten

Bemerkung 13. *Für das Abbruchkriterum sind andere Varianten möglich. Man sollte jedoch nicht* $\|f(x_k)\| \leq TOL$ *zum Abbruchkriterium machen. Denn die Ersetzung von* $f(x) = 0$ *durch* $Af(x) = 0$ *mit invertierbarer Matrix* A *ändert die exakte Lösung und die Iterierten* x_k *des Newton-Verfahrens nicht und sollte daher auch das Abbruchkriterium nicht ändern.*

Vereinfachtes Newton-Verfahren: Beim gewöhnlichen Newton-Verfahren muss pro Iteration die Ableitung von f einmal ausgewertet werden. Zudem wird pro Iteration beim Lösen des linearen Gleichungssystems eine LR-Zerlegung dieser Ableitung bestimmt. Dieses Vorgehen ist im Allgemeinen sehr teuer. Beim vereinfachten Newton-Verfahren ersetzen wir die Ableitung durch eine konstante Matrix

$$A \approx f'(x_0).$$

Es ist somit insgesamt höchstens eine Auswertung und eine Berechnung der LR-Zerlegung nötig. Wir verlieren jedoch die quadratische Konvergenz. Die Konvergenz des vereinfachten Newton-Verfahrens ist linear. Das Verfahren kann als Fixpunktiteration der Abbildung

$$F(x) = x - A^{-1} f(x)$$

aufgefasst werden.

Praktische Durchführung:

Wähle Startwert x_0 und berechne LR-Zerlegung von $A \approx f'(x_0)$
while $(\|\Delta x_k)\| > TOL$ do
    Löse $A\Delta x_k = -f(x_k)$
    Berechne $x_{k+1} = x_k + \Delta x_k$
end do.

Bemerkung 14. *Tatsächlich werden auch lineare Gleichungssysteme durch Iterationsverfahren näherungsweise gelöst.*