

Kapitel 5

Nichtlineare Gleichungssysteme

Nichtlineare Gleichungen oder Gleichungssysteme müssen in vielen Anwendungen der Mathematik gelöst werden. Typischerweise werden die Lösungen nichtlinearer Gleichungen über die Nullstellen einer Funktion $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ definiert, für die dann ein $x^* \in \mathbb{R}^n$ mit

$$f(x^*) = 0$$

gesucht wird.

Beispiel (Berechnung von Quadratwurzeln): Berechne $x^* \in \mathbb{R}$ mit $f(x) = 0$ für $f(x) = x^2 - 2$. Die eindeutige positive reelle Lösung ist $\sqrt{2}$; ein numerisches Verfahren zur Berechnung von Nullstellen kann also insbesondere zur Berechnung von Quadratwurzeln verwendet werden.

5.1 Fixpunktiteration

Die Fixpunktiteration ist eine recht einfache Methode, die auf der Idee beruht, die Lösung eines nichtlinearen Gleichungssystems als Fixpunktgleichung zu formulieren. Setzen wir

$$g(x) = f(x) + x,$$

so ist $f(x^*) = 0$ äquivalent zu $g(x^*) = x^*$. Ein Punkt $x \in \mathbb{R}^n$ mit $g(x) = x$ heißt *Fixpunkt* von g . Statt eine Nullstelle von f zu suchen, können wir alternativ also einen Fixpunkt von g suchen.

Wir erinnern an den aus der Analysis bekannten Banach'schen Fixpunktsatz Satz:

Satz (Banach'scher Fixpunktsatz)

Sei A eine abgeschlossene Teilmenge eines vollständigen normierten Raumes mit Norm $\|\cdot\|$ und sei $\Phi : A \rightarrow A$ eine Kontraktion, d.h. es existiere eine Konstante $k \in (0, 1)$, so dass die Ungleichung

$$\|\Phi(x) - \Phi(y)\| \leq k\|x - y\|$$

gilt. Dann existiert ein eindeutiger Fixpunkt $x^* \in A$, gegen den alle Folgen der Form $x^{(i+1)} = \Phi(x^{(i)})$ mit beliebigen $x^{(0)} \in A$ konvergieren. Darüberhinaus gelten die *a priori* und *a posteriori* Abschätzungen

$$\|x^{(i)} - x^*\| \leq \frac{k^i}{1-k} \|x^{(1)} - x^{(0)}\| \quad \text{und} \quad \|x^{(i)} - x^*\| \leq \frac{k}{1-k} \|x^{(i)} - x^{(i-1)}\|.$$

Beweis: Wir zeigen zunächst, dass jede Folge $(x^{(i)})_{i \in \mathbb{N}_0}$ der Form $x^{(i+1)} = \Phi(x^{(i)})$ mit beliebigem $x^{(0)} \in A$ eine Cauchy-Folge ist: Aus der Kontraktionseigenschaft folgen mit Induktion für beliebige $i, j \in \mathbb{N}_0$ mit $j \geq i$ die Abschätzungen

$$\|x^{(j+1)} - x^{(j)}\| \leq k^{j-i} \|x^{(i+1)} - x^{(i)}\| \quad \text{und} \quad \|x^{(i+1)} - x^{(i)}\| \leq k^i \|x^{(1)} - x^{(0)}\| \quad (5.1)$$

Damit gilt

$$\begin{aligned} \|x^{(i+n)} - x^{(i)}\| &= \left\| \sum_{j=i}^{i+n-1} (x^{(j+1)} - x^{(j)}) \right\| \leq \sum_{j=i}^{i+n-1} \underbrace{\|x^{(j+1)} - x^{(j)}\|}_{\leq k^{j-i} \|x^{(i+1)} - x^{(i)}\|} \\ &= \|x^{(i+1)} - x^{(i)}\| \cdot \underbrace{\sum_{j=0}^{n-1} k^{j-i}}_{= \frac{1-k^n}{1-k} \leq \frac{1}{1-k}} \leq \frac{k^i}{1-k} \|x^{(1)} - x^{(0)}\|, \end{aligned} \quad (5.2)$$

weswegen diese Folge wegen $k^i \rightarrow 0$ eine Cauchy-Folge ist.

Wir zeigen nun, dass $x^{(i)}$ gegen einen Fixpunkt von Φ konvergiert: Da A Teilmenge eines vollständigen Raumes ist, existiert ein Grenzwert x^* dieser Cauchy-Folge, der wegen der Abgeschlossenheit von A wieder in A liegt, also $\lim_{i \rightarrow \infty} x^{(i)} = x^* \in A$. Da Φ eine Kontraktion, also insbesondere stetig ist, folgt

$$\Phi(x^*) = \Phi(\lim_{i \rightarrow \infty} x^{(i)}) = \lim_{i \rightarrow \infty} \Phi(x^{(i)}) = \lim_{i \rightarrow \infty} x^{(i+1)} = x^*,$$

also ist x^* ein Fixpunkt von Φ . Es folgt also, dass jede Folge der angegebenen Form gegen einen Fixpunkt von Φ konvergiert. Es bleibt die Eindeutigkeit des Fixpunktes zu zeigen: Wir nehmen dazu an, dass zwei Fixpunkte $x^*, x^{**} \in A$ von Φ mit $x^* \neq x^{**}$, also $\|x^* - x^{**}\| > 0$, existieren. Aus der Kontraktionseigenschaft folgt dann

$$\|x^* - x^{**}\| = \|\Phi(x^*) - \Phi(x^{**})\| \leq k \|x^* - x^{**}\| < \|x^* - x^{**}\|,$$

was ein Widerspruch zu $\|x^* - x^{**}\| > 0$ ist und daher die Eindeutigkeit zeigt.

Zuletzt zeigen wir die zwei Abschätzungen. Beide folgen aus (5.2) mittels

$$\|x^{(i)} - x^*\| = \lim_{n \rightarrow \infty} \|x^{(i+n)} - x^{(i)}\| \leq \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{1-k} \|x^{(i+1)} - x^{(i)}\| \leq \frac{k^i}{1-k} \|x^{(1)} - x^{(0)}\|.$$

□

Die einfachste Idee zur Bestimmung eines Fixpunktes x^* von g liegt nun in der Iteration dieser Abbildung:

Algorithmus 5.1 (Fixpunktiteration) Gegeben seien eine Funktion $g : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ und ein Startwert $x^{(0)} \in \mathbb{R}^n$. Weiterhin sei eine Abbruchgenauigkeit $\varepsilon > 0$ gegeben.

- (0) Setze $i = 0$ (Zählindex).
- (1) Setze $x^{(i+1)} := g(x^{(i)})$.
- (2) Falls $\|x^{(i+1)} - x^{(i)}\| \leq \varepsilon$ ist oder eine maximal erlaubte Iterationsanzahl überschritten ist, beende den Algorithmus;
sonst setze $i := i + 1$ und gehe zu (1)

□

Falls g die Bedingungen des Banach'schen Fixpunktsatzes auf einer Umgebung A von x^* erfüllt, so konvergiert dieses Verfahren für alle $x^{(0)} \in A$. Der Banach'sche Fixpunktsatz garantiert dann die Genauigkeit

$$\|x^{(i+1)} - x^*\| \leq \frac{k}{1-k} \varepsilon.$$

Natürlich erfüllt nicht jede Abbildung g die Voraussetzungen dieses Satzes. Falls g stetig differenzierbar ist, lässt sich die Kontraktionseigenschaft aber relativ leicht überprüfen.

Satz 5.2 Es seien $D \subset \mathbb{R}^n$ und $g \in C^1(D, \mathbb{R}^n)$ mit Fixpunkt $x^* \in D$. Für eine beliebige Vektornorm $\|\cdot\|$ sei $A = \{x \in \mathbb{R}^n \mid \|x - x^*\| \leq \delta\} \subset D$ für ein $\delta > 0$. Dann erfüllt g die Voraussetzungen des Banach'schen Fixpunktsatzes bezüglich dieser Norm, falls

$$\max_{x \in A} \|Dg(x)\| =: k < 1$$

ist, wobei $Dg(x) \in \mathbb{R}^{n \times n}$ die Jacobi-Matrix, also die matrixwertige Ableitung der Funktion g an der Stelle x bezeichnet und $\|\cdot\|$ die von der gegebenen Vektornorm induzierte Matrixnorm ist. Insbesondere konvergiert also die Fixpunktiteration für alle Startwerte $x^{(0)} \in A$.

Beweis: Aus dem Mittelwertsatz der Differentialrechnung folgt für alle $x, y \in A$ die Ungleichung

$$\|g(x) - g(y)\| \leq \sup_{z \in A} \|Dg(z)\| \|x - y\| \leq k \|x - y\|.$$

Daher ist g eine Kontraktion mit Kontraktionskonstante k .

Es bleibt zu zeigen, dass g die Menge A nach A abbildet. Sei dazu $x \in A$, also $\|x - x^*\| \leq \delta$. Es ist zu zeigen, dass dann auch $g(x) \in A$, also $\|g(x) - x^*\| \leq \delta$ gilt. Dies folgt, denn

$$\|g(x) - x^*\| = \|g(x) - g(x^*)\| \leq k \|x - x^*\| \leq k\delta \leq \delta.$$

□

Für das folgende Korollar, in dem ein weiteres hinreichendes Kriterium für die Konvergenz der Fixpunktiteration hergeleitet wird, benötigen wir den Spektralradius $\rho(A) = \max_i |\lambda_i(A)|$ einer Matrix A , also den maximalen Betrag der Eigenwerte $\lambda_1(A), \dots, \lambda_d(A)$ einer Matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$.

Korollar 5.3 Es seien $D \subset \mathbb{R}^n$ und $g \in C^1(D, \mathbb{R}^n)$ mit Fixpunkt $x^* \in D$. Es gelte $\rho(Dg(x^*)) < 1$ für den Spektralradius der Matrix $Dg(x^*)$. Dann existiert eine Umgebung A von x^* , so dass die Fixpunktiteration für alle Startwerte $x^{(0)} \in A$ gegen x^* konvergiert.

Beweis: Wir beweisen zunächst die folgende Eigenschaft für beliebige Matrizen $E \in \mathbb{R}^{n \times n}$: Für jedes $\varepsilon \in (0, 1)$ existiert eine Vektornorm $\|\cdot\|_{E, \varepsilon}$, so dass für die zugehörige induzierte Matrixnorm folgende Abschätzung gilt:

$$\|E\|_{E, \varepsilon} \leq \rho(E) + \varepsilon. \quad (5.3)$$

Um dies zu beweisen, benötigen wir die aus der linearen Algebra bekannte Jordan'sche Normalform: Zu jeder Matrix $E \in \mathbb{R}^{n \times n}$ existiert eine invertierbare Matrix $S \in \mathbb{C}^{n \times n}$, so dass $R = S^{-1}ES$ in Jordan'scher Normalform vorliegt. Die Matrix R besitzt also als Diagonalelemente r_{ii} gerade die Eigenwerte von E , für die Elemente oberhalb der Diagonalen gilt $r_{i, i+1} \in \{0, 1\}$, alle weiteren Einträge sind gleich Null.

Zur Konstruktion der Norm $\|\cdot\|_{E, \varepsilon}$ beachte, dass für jede invertierbare Matrix $C \in \mathbb{C}^{n \times n}$ die Norm $\|x\|_C := \|C^{-1}x\|_\infty$ eine Vektornorm mit induzierter Matrixnorm

$$\|A\|_C = \sup_{x \in \mathbb{C}^n \setminus \{0\}} \frac{\|C^{-1}Ax\|_\infty}{\|C^{-1}x\|_\infty} = \sup_{y = C^{-1}x \in \mathbb{C}^n \setminus \{0\}} \frac{\|C^{-1}ACy\|_\infty}{\|y\|_\infty} = \|C^{-1}AC\|_\infty$$

ist. Für das gegebene $\varepsilon \in (0, 1)$ setzen wir $C_\varepsilon := SD_\varepsilon$ mit S von oben und $D_\varepsilon = \text{diag}(1, \varepsilon, \varepsilon^2, \dots, \varepsilon^{n-1})$. Wir schreiben $R_\varepsilon = C_\varepsilon^{-1}EC_\varepsilon$. Man rechnet leicht nach, dass für die Elemente $r_{\varepsilon, ij}$ von R_ε die Gleichung $r_{\varepsilon, ij} = \varepsilon^{j-i}r_{ij}$ gilt. Insbesondere gilt also $r_{\varepsilon, ii} = r_{ii}$ und $r_{\varepsilon, i, i+1} = \varepsilon r_{i, i+1}$ während alle anderen Elemente von R_ε gleich Null sind. Damit gilt die gewünschte Abschätzung:

$$\begin{aligned} \|E\|_{C_\varepsilon} &= \|C_\varepsilon^{-1}EC_\varepsilon\|_\infty = \|R_\varepsilon\|_\infty = \max_{i=1, \dots, n} \sum_{j=1}^n |r_{\varepsilon, ij}| \\ &= \max_{i=1, \dots, n} \{|r_{ii}| + |\varepsilon r_{i, i+1}|\} \leq \max_{k=1, \dots, d} \{|\lambda_k| + \varepsilon\} = \rho(E) + \varepsilon. \end{aligned}$$

Entsprechend folgt die Existenz einer Vektornorm $\|\cdot\|$ und zugehöriger induzierter Matrixnorm mit

$$\|Dg(x^*)\| \leq \rho(Dg(x^*)) + \varepsilon < 1.$$

Für jede hinreichend kleine Umgebung A von x^* gilt dann wegen der Stetigkeit von Dg die Ungleichung $\sup_{x \in A} \|Dg(x)\| \leq k_A < 1$. Damit folgt die Behauptung mit Satz 5.2. \square

Mit Korollar 5.3 kann für $n = 1$ zudem das folgende Korollar bewiesen werden. Hierbei bezeichnet $g^{-1}(x)$ die Umkehrabbildung der Funktion $g(x)$.

Korollar 5.4 Sei $g \in C^1(\mathbb{R}, \mathbb{R})$ mit $g(x^*) = x^*$. Es gelte $|g'(x^*)| \neq 1$. Dann gibt es eine Umgebung A von x^* , so dass eine der beiden Iterationen

- i) $x^{(i+1)} = g(x^{(i)})$
- ii) $x^{(i+1)} = g^{-1}(x^{(i)})$

für alle Startwerte $x^{(0)} \in A$ gegen x^* konvergiert.

Beweis: Für eindimensionale Funktionen gilt $\rho(g'(x^*)) = |g'(x^*)|$. Da aus der Voraussetzung nun entweder

$$|g'(x^*)| < 1 \quad \text{oder} \quad |(g^{-1})'(x^*)| = \frac{1}{|g'(x^*)|} < 1$$

folgt, ergibt sich die Behauptung mit Korollar 5.3. \square

Verfahren, die nur für Anfangswerte in einer Umgebung des gesuchten Wertes konvergieren, bezeichnen wir als *lokal konvergent*.

Das folgende Beispiel zeigt, dass der im vorhergehenden Satz beschriebene Übergang zur Umkehrabbildung leider nicht immer praktikabel ist und stellt zugleich eine weitere Methode vor, mit der das Problem der Nicht-Konvergenz behoben werden kann.

Beispiel 5.5 Betrachte die Wurzelberechnung aus dem einführenden Beispiel mit $f(x) = x^2 - 2$. Hier ist die zugehörige Fixpunktabbildung gegeben durch $g(x) = x^2 + x - 2$, die Ableitung in $x^* = \sqrt{2}$ ist $g'(x^*) = 2x^* + 1 \approx 3.8284271$, also ist der Banach'sche Fixpunktsatz nicht anwendbar. Die Umkehrfunktion lässt sich hier zwar theoretisch leicht berechnen, es gilt $g^{-1}(x) = \sqrt{x + 9/4} - 1/2$, und der Banach'sche Fixpunktsatz wäre auch anwendbar. Wenn wir aber diese Abbildung als Iterationsvorschrift verwenden, müssen wir in jedem Schritt eine Wurzel berechnen: wir haben also die Berechnung *einer* Wurzel $\sqrt{2}$ durch eine Berechnung *mehrerer* Wurzeln ersetzt, was sicherlich wenig effizient ist.

Eine Abhilfe bietet hier aber die einfache Skalierung der ursprünglichen Funktion mit $-1/2$: Die Funktion $f(x) = -x^2/2 + 1$ besitzt offenbar die gleichen Nullstellen wie das ursprüngliche f . Für die Fixpunktabbildung $g(x) = -x^2/2 + x + 1$ gilt nun aber in $x^* = \sqrt{2}$ gerade $|g'(x^*)| = |-x^* + 1| \approx 0.41421356$, weswegen das Verfahren hier lokal konvergiert, wie die Ergebnisfolge für Startwert $x^{(0)} = 1$ zeigt:

```
x( 0) = 1.0000000000000000
x( 1) = 1.5000000000000000
x( 2) = 1.3750000000000000
x( 3) = 1.4296875000000000
x( 4) = 1.40768432617188
x( 5) = 1.41689674509689
x( 6) = 1.41309855196381
x( 7) = 1.41467479318270
x( 8) = 1.41402240794944
x( 9) = 1.41429272285787
x(10) = 1.41418076989350
```

Eine solche Skalierung funktioniert im eindimensionalen Fall “fast” immer. □

Festzuhalten bleibt, dass die Fixpunktiteration eines der wenigen Verfahren ist, mit denen man allgemeine nichtlineare Gleichungssysteme im \mathbb{R}^n direkt lösen kann, ohne weitere Informationen wie Ableitungen etc. zu benötigen. Allerdings werden wir später sehen, dass das Verfahren vergleichsweise langsam konvergiert.

5.2 Das Bisektionsverfahren

Wir werden in diesem Kapitel auch Verfahren betrachten, die nur im \mathbb{R}^1 funktionieren und die sich nicht auf höhere Dimensionen verallgemeinern lassen. Das nun folgende Bisektionsverfahren ist ein solches Verfahren, das sehr einfach und anschaulich ist und darüberhinaus unter minimalen Bedingungen global konvergiert.

Wir betrachten also eine stetige reelle Funktion $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ und suchen eine Nullstelle, also einen Wert $x^* \in \mathbb{R}$ mit $f(x^*) = 0$. Der folgende Algorithmus berechnet solch eine Nullstelle.

Algorithmus 5.6 (Bisektionsverfahren) Gegeben seien eine Funktion $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ und Werte $a < b$, so dass $f(a)f(b) < 0$ gilt (d.h., $f(a)$ und $f(b)$ haben unterschiedliches Vorzeichen). Weiterhin sei eine gewünschte Genauigkeit $\varepsilon > 0$ gegeben.

- (0) Setze $i = 0$ (Zählindex) und $a_0 = a$, $b_0 = b$.
- (1) Setze $x^{(i)} = a_i + (b_i - a_i)/2$.
- (2) Falls $f(x^{(i)}) = 0$ oder $(b_i - a_i)/2 < \varepsilon$ beende den Algorithmus
- (3) Falls $f(x^{(i)})f(a_i) < 0$ ist setze $a_{i+1} = a_i$, $b_{i+1} = x^{(i)}$
 Falls $f(x^{(i)})f(a_i) > 0$ ist setze $a_{i+1} = x^{(i)}$, $b_{i+1} = b_i$
 Setze $i = i + 1$ und gehe zu Schritt (1).

□

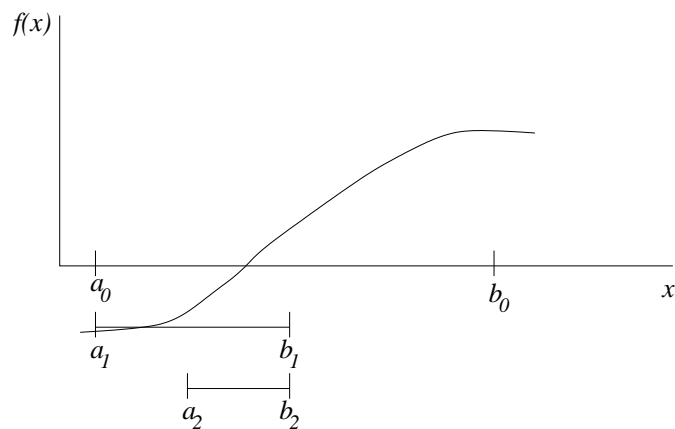


Abbildung 5.1: Bisektionsverfahren

Abbildung 5.1 illustriert dieses Verfahren. Man kann die Punkte a_i , b_i als Intervallgrenzen der Intervalle $[a_i, b_i]$ verstehen, mit denen die Nullstelle durch immer weitere Halbierung eingeschachtelt wird. Daher stammt der Name “Bisektion” (= Zweiteilung).

Die Auswahlbedingung der neuen Werte a_{i+1} und b_{i+1} stellt sicher, dass $f(a_{i+1})$ und $f(b_{i+1})$ unterschiedliches Vorzeichen haben; deswegen muss (da f stetig ist) sich eine Nullstelle zwischen diesen Werten befinden. Wenn die Abbruchbedingung $(x^{(i)} - a_i) < \varepsilon$ erreicht ist, ist also sichergestellt, dass es eine Nullstelle x^* mit $|x^* - x^{(i)}| < \varepsilon$ gibt, dass also $x^{(i)}$ eine approximative Nullstelle ist.

Das Bisektionsverfahren hat einige sehr vorteilhafte Eigenschaften:

- Es funktioniert für allgemeine stetige Funktionen.
- Es liefert immer ein Ergebnis, vorausgesetzt, dass man geeignete Startwerte a und b finden kann (man sagt, dass das Verfahren “global konvergiert”).
- Die Anzahl der Schritte, nach der die gewünschte Genauigkeit erreicht ist, hängt nur von a und b aber nicht von f ab.

Bei der Anwendung auf die Wurzelberechnung mit $f(x) = x^2 - 2$ und Startintervall $[1, 2]$ erhält man die folgenden Werte:

```

i= 0: [1.000000, 2.000000], x( 0)=1.500000
i= 1: [1.000000, 1.500000], x( 1)=1.250000
i= 2: [1.250000, 1.500000], x( 2)=1.375000
i= 3: [1.375000, 1.500000], x( 3)=1.437500
i= 4: [1.375000, 1.437500], x( 4)=1.406250
i= 5: [1.406250, 1.437500], x( 5)=1.421875
i= 6: [1.406250, 1.421875], x( 6)=1.414062
i= 7: [1.414062, 1.421875], x( 7)=1.417969
i= 8: [1.414062, 1.417969], x( 8)=1.416016
i= 9: [1.414062, 1.416016], x( 9)=1.415039
i=10: [1.414062, 1.415039], x(10)=1.414551
i=11: [1.414062, 1.414551], x(11)=1.414307
i=12: [1.414062, 1.414307], x(12)=1.414185
i=13: [1.414185, 1.414307], x(13)=1.414246
i=14: [1.414185, 1.414246], x(14)=1.414215
i=15: [1.414185, 1.414215], x(15)=1.414200
i=16: [1.414200, 1.414215], x(16)=1.414207
i=17: [1.414207, 1.414215], x(17)=1.414211
i=18: [1.414211, 1.414215], x(18)=1.414213
i=19: [1.414213, 1.414215], x(19)=1.414214
i=20: [1.414213, 1.414214], x(20)=1.414214
i=21: [1.414213, 1.414214], x(21)=1.414213
i=22: [1.414213, 1.414214], x(22)=1.414214
i=23: [1.414214, 1.414214], x(23)=1.414214

```

Der Grund, warum in der Praxis auch im eindimensionalen Fall trotzdem oft andere Verfahren eingesetzt werden, liegt darin, dass das Verfahren — ebenso wie die Fixpunktiteration — relativ langsam gegen den gesuchten Wert x^* konvergiert. Um dies zu verstehen, müssen wir zunächst geeignete Konzepte zum Messen von Konvergenzgeschwindigkeiten einführen.

5.3 Konvergenzordnung

Der Begriff der Konvergenzordnung liefert eine Möglichkeit, iterative Verfahren auf ihre Geschwindigkeit hin zu untersuchen. Wir werden hier zwei verschiedene Konvergenzordnungen betrachten: Lineare Konvergenz und quadratische Konvergenz.

Iterative Verfahren liefern eine Folge approximativer Lösungen $x^{(i)}$, die gegen die exakte Lösung x^* konvergieren. Die Konvergenzordnung wird über den Fehler

$$\|x^{(i)} - x^*\|$$

definiert und gibt an, wie schnell dieser Fehler gegen Null konvergiert.

Die folgende Definition beschreibt die zwei Arten der Konvergenzordnung, die wir hier betrachten wollen.

Definition 5.7 Betrachte ein iteratives Verfahren, das eine Folge von approximativen Lösungen $x^{(i)}$ für die exakte Lösung x^* liefert. Dann definieren wir die folgenden Konvergenzordnungen:

- (i) Das Verfahren heißt *linear konvergent*, falls eine Konstante $c \in (0, 1)$ existiert, so dass die Abschätzung

$$\|x^{(i+1)} - x^*\| \leq c \|x^{(i)} - x^*\| \text{ für alle } i = 0, 1, 2, \dots$$

gilt.

- (ii) Das Verfahren heißt *quadratisch konvergent*, falls eine Konstante $q > 0$ existiert, so dass die Abschätzung

$$\|x^{(i+1)} - x^*\| \leq q \|x^{(i)} - x^*\|^2 \text{ für alle } i = 0, 1, 2, \dots$$

gilt.

□

Bemerkung 5.8 Durch iterative Anwendung dieser Ungleichungen erhält man die Fehlerabschätzungen

$$\begin{aligned} \|x^{(i)} - x^*\| &\leq c^i \|x^{(0)} - x^*\| \\ \|x^{(i)} - x^*\| &\leq \frac{1}{q} (q \|x^{(0)} - x^*\|)^{2^i}. \end{aligned}$$

Beachte, dass die zweite Ungleichung nur dann eine sinnvolle Fehlerabschätzung liefert, wenn $q \|x^{(0)} - x^*\| < 1$ bzw. $\|x^{(0)} - x^*\| < 1/q$ gilt, d.h. wenn der Anfangswert $x^{(0)}$ bereits nahe genug am exakten Ergebnis x^* liegt. □

Abbildung 5.2 zeigt die Abhängigkeit der Fehler für $c = 0.5$, $q = 2$ und $\|x^{(0)} - x^*\| = 1/4$.

Zwar kann man erkennen, dass die quadratische Konvergenz schneller gegen Null tendiert als die lineare, allerdings lässt sich aus dieser Grafik nicht direkt erkennen, welche Konvergenzordnung einer bestimmten Kurve zu Grunde liegt.

Dies lässt sich viel leichter feststellen, wenn man statt des Fehlers den *Logarithmus des Fehlers* betrachtet. Für den Logarithmus gelten die Rechenregeln

$$\log(ab) = \log(a) + \log(b), \quad \log(1/q) = -\log(q) \quad \text{und} \quad \log(c^d) = d \log(c).$$

Damit erhalten wir für die betrachteten Konvergenzarten aus Definition 5.7 die Ungleichungen

$$\begin{aligned} \log(\|x^{(i+1)} - x^*\|) &\leq \log(\|x^{(i)} - x^*\|) + \log(c) \\ \log(\|x^{(i+1)} - x^*\|) &\leq 2 \log(\|x^{(i)} - x^*\|) + \log(q). \end{aligned} \tag{5.4}$$

und mit der Abkürzung $K = \log(\|x^{(0)} - x^*\|)$ aus Bemerkung 5.8 die Abschätzungen

$$\begin{aligned} \log(\|x^{(i)} - x^*\|) &\leq i \log(c) + K \\ \log(\|x^{(i)} - x^*\|) &\leq 2^i (\log(q) + K) - \log(q). \end{aligned}$$

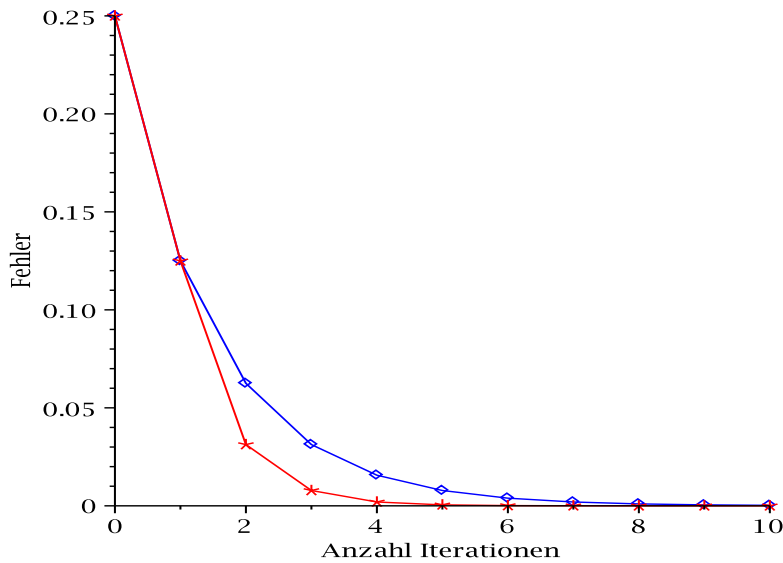


Abbildung 5.2: Konvergenzordnungen: linear und quadratisch (von oben nach unten)

Beachte, dass der Logarithmus dabei gegen minus unendlich strebt, wenn der Fehler gegen Null konvergiert.

Wenn man nun diese letzten beiden Abschätzungen grafisch darstellt, so erhält man im linearen Fall eine Gerade mit negativer Steigung und im quadratischen Fall eine Kurve der Form $i \mapsto -C2^i + D$ für $C > 0, D \in \mathbb{R}$. Abbildung 5.3 zeigt das typische Verhalten dieser Kurven für den Logarithmus der Basis 10.

Tatsächlich würden diese Kurven für jeden anderen Logarithmus ähnlich aussehen, der Logarithmus zur Basis 10 hat aber die spezielle Eigenschaft, dass man die Genauigkeit direkt ablesen kann, wenn man sie in der Anzahl der korrekten Nachkommastellen des Ergebnisses misst, zumindest im eindimensionalen Fall, also für $x \in \mathbb{R}$:

Sei dazu $d = \log_{10}(|x^{(i)} - x^*|)$. Wir nehmen an, dass d negativ ist, was genau dann der Fall ist, wenn $|x^{(i)} - x^*| < 1$ ist (die folgenden Überlegungen gelten also nur, wenn $x^{(i)}$ bereits hinreichend nahe an x^* liegt). Sei nun $m > 0$ die größte ganze Zahl, die echt kleiner als $-d$ ist. Dann gilt

$$|x^{(i)} - x^*| = 10^d < 10^{-m} = \underbrace{0.0 \dots 0}_{(m-1)\text{-mal}} 1.$$

Jede Zahl, die kleiner als 10^{-m} ist, ist von der Form

$$\underbrace{0.0 \dots 0}_{m\text{-mal}} * * * \dots,$$

wobei der Stern “*” beliebige Ziffern symbolisiert. Also ist

$$|x^{(i)} - x^*| \leq \underbrace{0.0 \dots 0}_{m\text{-mal}} * * * \dots,$$

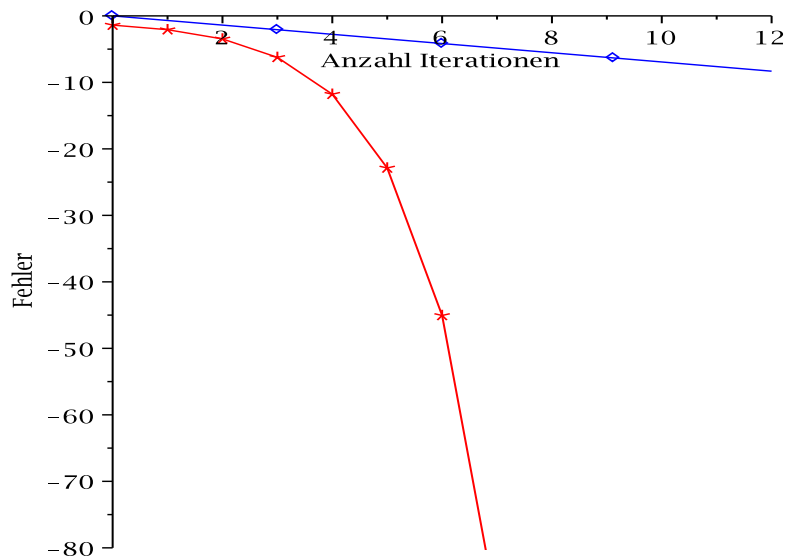


Abbildung 5.3: Konvergenzordnungen: linear und quadratisch (von oben nach unten)

weswegen $x^{(i)}$ und x^* mindestens in den ersten m Nachkommastellen übereinstimmen müssen. Auf diese Weise lässt sich aus d die Anzahl der korrekten Nachkommastellen des Ergebnisses direkt ablesen.

Aus den Ungleichungen (5.4) kann man daraus die Konsequenzen ableiten, dass sich die Anzahl der korrekten Stellen bei linearer Konvergenz etwa alle $1/(-\log(c))$ Schritte um 1 erhöht¹ und bei quadratischer Konvergenz (wenn man den $\log(q)$ Summanden vernachlässigt) in jedem Schritt in etwa verdoppelt.

In Tabelle 5.1 werden die Charakteristika der verschiedenen betrachteten Konvergenzordnungen noch einmal zusammengefasst.

Konvergenzordnung	linear	quadratisch
Definition	$\ x^{(i+1)} - x^*\ \leq c\ x^{(i)} - x^*\ $ für ein $c \in (0, 1)$	$\ x^{(i+1)} - x^*\ \leq q\ x^{(i)} - x^*\ ^2$ für ein $q > 0$
Kurve im log-Diagramm	Gerade	$\approx i \mapsto -C2^i + D$
Anzahl korrekter Nachkommastellen	erhöht sich um 1 nach ca. $1/(-\log(c))$ Schritten	verdoppelt sich ca. nach jedem Schritt

Tabelle 5.1: Charakteristika verschiedener Konvergenzordnungen

¹Wenn $1/(-\log(c)) < 1$ ist, ist dies so zu verstehen, dass die Anzahl korrekter Stellen pro Schritt im Mittel um $-\log(c)$ zunimmt.

Wir wollen nun die Konvergenzordnung der bisher betrachteten Verfahren bestimmen.

Für die Fixpunktiteration erhalten wir aus den Voraussetzungen des Banach'schen Fixpunktsatzes die Fehlerabschätzung

$$\|x^{(i+1)} - x^*\| = \|g(x^{(i)}) - g(x^*)\| \leq k \|x^{(i)} - x^*\|,$$

also lineare Konvergenz mit $c = k$. Ein Sonderfall ergibt sich, falls $Dg(x^*) = 0$ gilt und g zweimal stetig differenzierbar ist. Dann gilt mit Taylor-Entwicklung um x^* für die Komponenten g_j von g die Gleichung

$$g_j(x) - x_j^* = g_j(x) - g_j(x^*) = \frac{1}{2} \sum_{k,l=1}^n \frac{\partial^2 g_j(\xi_j)}{\partial x_k \partial x_l} (x_k - x_k^*)(x_l - x_l^*),$$

wobei x_j^* die j -te Komponente von x^* bezeichnet und ξ_j ein Punkt auf der Verbindungsgeraden von x nach x^* ist. Da die zweiten Ableitungen von jeder Komponente g_j nach Voraussetzung stetig sind, sind diese für x in einer Umgebung N von x^* durch eine Konstante $r > 0$ beschränkt. Damit gilt mit $q = r/2$

$$\begin{aligned} \|x^{(i+1)} - x^*\|_\infty &= \|g(x^{(i)}) - x^*\|_\infty = \max_{j=1,\dots,n} |g_j(x^{(i)}) - x_j^*| \\ &\leq \max_{j=1,\dots,n} q(x_j^{(i)} - x_j^*)^2 \leq q \|x^{(i)} - x^*\|_\infty^2, \end{aligned}$$

also quadratische Konvergenz.

Für das Bisektionsverfahren aus Algorithmus 5.6 müssen wir den Fehler etwas anders definieren. Bei diesem Verfahren kann der Fall eintreten, dass der Wert $x^{(i)}$ zufällig sehr nahe an der gesuchten Nullstelle liegt und sich in weiteren Iterationsschritten zunächst wieder entfernt, bevor er letztendlich konvergiert. Tatsächlich sollte man hier den Fehler nicht über den Abstand $|x^{(i)} - x^*|$ sondern über die Intervallgröße $(b_i - a_i)$ definieren, da aus der Konstruktion sofort die Abschätzung $|x^{(i)} - x^*| \leq (b_i - a_i)/2$ folgt. Diese Intervallgröße halbiert sich in jedem Schritt; man erhält also

$$(b_{i+1} - a_{i+1}) \leq \frac{1}{2}(b_i - a_i)$$

und damit lineare Konvergenz mit $c = 1/2$.

Im folgendem Abschnitt werden wir ein Verfahren erläutern, das quadratisch konvergiert.

5.4 Das Newton-Verfahren

In diesem Abschnitt werden wir ein weiteres Verfahren zur Lösung nichtlinearer Gleichungssysteme betrachten, das Newton-Verfahren. Im Vergleich zu den bisher betrachteten Verfahren (mit Ausnahme der Fixpunktiteration mit verschwindender Ableitung) konvergiert dieses deutlich schneller, es ist quadratisch konvergent.

Im Gegensatz zum Bisektions-Verfahren oder der Fixpunktiteration wird hier nicht nur die Funktion f selbst sondern auch ihre Ableitung benötigt. Wir beschreiben das Verfahren zunächst im \mathbb{R}^1 und gehen danach zum \mathbb{R}^n über.

Die Idee des Newton-Verfahrens ist wie folgt: Berechne die Tangente $g(x)$ von f im Punkt $x^{(i)}$, d.h. die Gerade

$$g(x) = f(x^{(i)}) + f'(x^{(i)})(x - x^{(i)})$$

und wähle $x^{(i+1)}$ als Nullstelle von g , also

$$f(x^{(i)}) + f'(x^{(i)})(x^{(i+1)} - x^{(i)}) = 0 \Leftrightarrow f'(x^{(i)})x^{(i+1)} = f'(x^{(i)})x^{(i)} - f(x^{(i)})$$

$$\Leftrightarrow x^{(i+1)} = x^{(i)} - \frac{f(x^{(i)})}{f'(x^{(i)})}.$$

Die Idee ist in Abbildung 5.4 grafisch dargestellt.

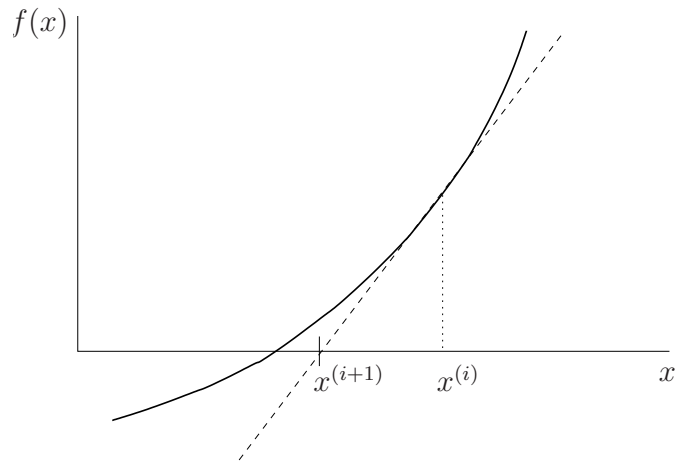


Abbildung 5.4: Newton-Verfahren

Formal lässt sich der Algorithmus im \mathbb{R}^1 wie folgt beschreiben.

Algorithmus 5.9 (Newton-Verfahren) Gegeben sei eine Funktion $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, ihre Ableitung $f' : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ sowie ein Startwert $x^{(0)} \in \mathbb{R}$ und eine gewünschte Genauigkeit $\varepsilon > 0$. Setze $i = 0$.

- (1) Berechne $x^{(i+1)} = x^{(i)} - f(x^{(i)})/f'(x^{(i)})$
- (2) Falls $|x^{(i+1)} - x^{(i)}| < \varepsilon$, beende den Algorithmus, ansonsten setze $i = i + 1$ und gehe zu (1)

□

Das folgende Beispiel zeigt den Verlauf des Newton-Verfahrens für das bereits bekannte Beispiel 5.5.

Beispiel 5.10 Betrachte die Funktion $f(x) = x^2 - 2$ mit $f'(x) = 2x$ und Nullstelle $x^* = \sqrt{2} \approx 1.4142135623731$. Die Iterationsvorschrift des Newton-Verfahrens ergibt hier

$$x^{(i+1)} = x^{(i)} - \frac{f(x^{(i)})}{f'(x^{(i)})} = x^{(i)} - \frac{(x^{(i)})^2 - 2}{2x^{(i)}} = \frac{1}{2}x^{(i)} + \frac{1}{x^{(i)}}$$

Wir wählen den Startwert $x^{(0)} = 2$. Damit erhalten wir (korrekte Nachkommastellen sind unterstrichen)

$$\begin{aligned} x^{(1)} &= \frac{1}{2} \cdot 2 + \frac{1}{2} &= \frac{3}{2} &= 1.5 \\ x^{(2)} &= \frac{1}{2} \cdot \frac{3}{2} + \frac{1}{\frac{3}{2}} &= \frac{17}{12} &= 1.\underline{41}\bar{6} \\ x^{(3)} &= \frac{1}{2} \cdot \frac{17}{12} + \frac{1}{\frac{17}{12}} &= \frac{577}{408} &\approx 1.\underline{4142156862745} \\ x^{(4)} &= \frac{1}{2} \cdot \frac{577}{408} + \frac{1}{\frac{577}{408}} &= \frac{665857}{470832} &\approx 1.\underline{4142135623746} \end{aligned}$$

□

Im Gegensatz zum Bisektionsverfahren lässt sich das Newton-Verfahren auf nichtlineare Gleichungssysteme im \mathbb{R}^n verallgemeinern. Wenn wir die Iterationsvorschrift des Newton-Verfahrens für $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$

$$x^{(i+1)} = x^{(i)} - \frac{f(x^{(i)})}{f'(x^{(i)})}$$

betrachten, stellt sich die Frage, wie eine geeignete Verallgemeinerung aussehen kann.

Sei dazu $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ nun eine vektorwertige Funktion. Die Ableitung an einer Stelle $x \in \mathbb{R}^n$, die wir wie üblich mit $Df(x)$ bezeichnen, ist jetzt keine reelle Zahl mehr, sondern eine Matrix.

Natürlich können wir diese Ableitung $Df(x)$ nicht einfach in die Iterationsvorschrift für $x^{(i+1)}$ einsetzen, da man ja durch eine Matrix nicht teilen kann. Man kann also nicht einfach $f(x^{(i)})/f'(x^{(i)})$ durch $f(x^{(i)})/Df(x^{(i)})$ ersetzen, sondern muss, um denselben Effekt zu erzielen, die entsprechende Operation für Matrizen verwenden. Statt durch $Df(x^{(i)})$ zu teilen, multiplizieren wir nun mit $[Df(x^{(i)})]^{-1}$, berechnen also $[Df(x^{(i)})]^{-1}f(x^{(i)})$. Dies führt zum folgenden Algorithmus

Algorithmus 5.11 (Newton-Verfahren im \mathbb{R}^n , Version 1)

Gegeben sei eine Funktion $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$, ihre Ableitung $Df : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^{n \times n}$ sowie ein Startwert $x^{(0)} \in \mathbb{R}^n$ und eine gewünschte Genauigkeit $\varepsilon > 0$. Setze $i = 0$.

- (1) Berechne $x^{(i+1)} = x^{(i)} - [Df(x^{(i)})]^{-1}f(x^{(i)})$
- (2) Falls $\|x^{(i+1)} - x^{(i)}\| < \varepsilon$, beende den Algorithmus, ansonsten setze $i = i + 1$ und gehe zu (1)

□

Wir illustrieren den Ablauf dieses Algorithmus an dem obigen Beispiel.

Beispiel 5.12 Gesucht ist eine Lösung des nichtlinearen Gleichungssystems

$$\begin{aligned} x_1^2 + x_2^2 &= 1 \\ x_1 &= 0 \end{aligned}$$

Dies ist äquivalent zum Suchen einer Nullstelle $x^* \in \mathbb{R}^2$ der Funktion $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2$ gegeben durch

$$f(x) = \begin{pmatrix} f_1(x) \\ f_2(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1^2 + x_2^2 - 1 \\ x_1 \end{pmatrix}.$$

Für die gesuchte Lösung x^* muss also gleichzeitig $f_1(x^*) = 0$ und $f_2(x^*) = 0$ gelten. Für die hier gegebene Funktion f ist die Lösung leicht zu sehen: Die Funktion f_1 ist genau dann gleich Null, wenn $x_1^2 + x_2^2 = 1$, also $\|x\| = 1$ ist. Die Funktion f_2 ist gleich Null, wenn $x_1 = 0$ ist. Die Menge der möglichen Lösungen bestehe also aus allen Vektoren $(x_1, x_2)^T$ der Länge $\|x\| = 1$, für die $x_1 = 0$ ist, also $x^* = (0, 1)^T$ oder $x^* = (0, -1)^T$.

Die partiellen Ableitungen von f_1 und f_2 lauten

$$\frac{\partial f_1}{\partial x_1}(x) = 2x_1, \quad \frac{\partial f_1}{\partial x_2}(x) = 2x_2, \quad \frac{\partial f_2}{\partial x_1}(x) = 1, \quad \frac{\partial f_2}{\partial x_2}(x) = 0$$

also ist

$$Df(x) = \begin{pmatrix} 2x_1 & 2x_2 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Damit ist z.B. für $x = (0, 1)^T$ die Ableitung gegeben durch

$$Df(x) = \begin{pmatrix} 0 & 2 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Die Inverse der Ableitung

$$Df(x) = \begin{pmatrix} 2x_1 & 2x_2 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

ist gegeben durch

$$Df(x)^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ \frac{1}{2x_2} & -\frac{x_1}{x_2} \end{pmatrix}.$$

Die Iterationsvorschrift ergibt sich mit $x^{(i)} = (x_1^{(i)}, x_2^{(i)})^T$ also zu

$$x^{(i+1)} = x^{(i)} - \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ \frac{1}{2x_2^{(i)}} & -\frac{x_1^{(i)}}{x_2^{(i)}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (x_1^{(i)})^2 + (x_2^{(i)})^2 - 1 \\ x_1^{(i)} \end{pmatrix}.$$

Mit $x^{(0)} = (1, 1)$ ergibt sich so (korrekte Nachkommastellen sind wieder unterstrichen)

$$\begin{aligned} x^{(1)} &= \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ \frac{1}{2} & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{3}{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \underline{1.5} \end{pmatrix} \\ x^{(2)} &= \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{3}{2} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ \frac{1}{3} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{5}{4} \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{13}{12} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \underline{1.08\bar{3}} \end{pmatrix} \\ x^{(3)} &= \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{13}{12} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ \frac{6}{13} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{25}{144} \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{313}{312} \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} 0 \\ \underline{1.0032051282} \end{pmatrix} \\ x^{(4)} &= \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{313}{312} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ \frac{156}{313} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{625}{97344} \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{195313}{195312} \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} 0 \\ \underline{1.0000051200} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

□

In der Praxis wird man $[Df(x)]^{-1}$ natürlich nicht “per Hand” berechnen, sondern eine numerische Routine verwenden. Tatsächlich ist es numerisch nicht besonders effizient, die Inverse der Matrix $Df(x^{(i)})$ wirklich zu berechnen, statt dessen löst man das lineare Gleichungssystem $Df(x^{(i)})\Delta x^{(i)} = f(x^{(i)})$, das einen Vektor $\Delta x^{(i)}$ mit $\Delta x^{(i)} = [Df(x^{(i)})]^{-1}f(x^{(i)})$ liefert. Dies führt zu der folgenden effizienteren Version des Newton-Verfahrens.

Algorithmus 5.13 (Newton-Verfahren im \mathbb{R}^n , Version 2)

Gegeben sei eine Funktion $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$, ihre Ableitung $Df : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^{n \times n}$ sowie ein Startwert $x^{(0)} \in \mathbb{R}^n$ und eine gewünschte Genauigkeit $\varepsilon > 0$. Setze $i = 0$.

- (1) Löse das lineare Gleichungssystem $Df(x^{(i)})\Delta x^{(i)} = f(x^{(i)})$ und berechne $x^{(i+1)} = x^{(i)} - \Delta x^{(i)}$
- (2) Falls $\|\Delta x^{(i)}\| < \varepsilon$, beende den Algorithmus, ansonsten setze $i = i + 1$ und gehe zu (1)

□

Der folgende Satz zeigt (lokale) quadratische Konvergenz für das Newton-Verfahren.

Satz 5.14 Sei $D \subset \mathbb{R}^n$ eine offene und konvexe Menge und sei $f : D \rightarrow \mathbb{R}^n$ eine zweimal stetig differenzierbare Funktion mit invertierbarer Jacobi-Matrix $Df(x)$ für alle $x \in D$. Sei zudem $x^* \in D$ eine Nullstelle von f .

Dann konvergiert die durch das Newton-Verfahren definierte Folge $x^{(i)}$ für $i > 0$ gegen x^* für alle Startwerte $x^{(0)} \in \mathbb{R}^n$ aus einer hinreichend kleinen Umgebung von x^* . Die Konvergenzordnung lässt sich dabei abschätzen durch

$$\|x^{(i+1)} - x^*\| \leq q \|x^{(i)} - x^*\|^2 \quad (5.5)$$

mit einer Konstanten $q > 0$, d.h. das Verfahren konvergiert lokal quadratisch.

Beweis: Da f zweimal stetig differenzierbar ist, liefert die Taylorentwicklung um x^* für $x \in D$ und $i \in \{1, 2, \dots, n\}$

$$f_i(x^*) - f_i(x) - Df_i(x)(x^* - x) = (x^* - x)^T D^2 f(\xi)(x^* - x) \quad (5.6)$$

mit $\xi \in \{y : y = x^* + s(x - x^*), s \in [0, 1]\}$. Sei nun $\rho > 0$ so gewählt, dass $\mathcal{B}_\rho := \{x \in \mathbb{R}^n : \|x - x^*\| \leq \rho\} \subset D$ gilt. Dann folgt aus (5.6) sowie der Stetigkeit von Df^{-1} auf D

$$\|Df(x)^{-1}(f(x^*) - f(x) - Df(x)(x^* - x))\| \leq q \|x - x^*\|^2 \quad (5.7)$$

für alle $x \in \mathcal{B}_\rho$ und ein $q > 0$. Aus der Iterationsvorschrift und $f(x^*) = 0$ erhalten wir

$$\begin{aligned} x^{(i+1)} - x^* &= x^{(i)} - Df(x^{(i)})^{-1}f(x^{(i)}) - x^* \\ &= x^{(i)} - x^* - Df(x^{(i)})^{-1}(f(x^{(i)}) - f(x^*)) \\ &= Df(x^{(i)})^{-1}(f(x^*) - f(x^{(i)}) - Df(x^{(i)})(x^* - x^{(i)})). \end{aligned}$$

Mit (5.7) ergibt dies die behauptete Abschätzung (5.5). Falls $\|x^{(i)} - x^*\| \leq \rho$ und $\rho \cdot q < 1$ gelten, folgt daraus

$$\|x^{(i+1)} - x^*\| \leq q \|x^{(i)} - x^*\| \|x^{(i)} - x^*\| \leq \rho \cdot q \|x^{(i)} - x^*\| < \rho,$$

weswegen die Folge für $\|x^{(i)} - x^*\| \leq \rho$ für alle $i > 0$ in $B_\rho(x^*)$ bleibt und gegen x^* konvergiert. \square

Das Newton-Verfahren ist nur lokal konvergent wie das folgende Beispiel verdeutlicht.

Beispiel 5.15 Betrachte die Funktion $f(x) = 5x/4 - x^3/4$ mit Ableitung $f'(x) = 5/4 - 3x^2/4$. Offenbar hat diese Funktion eine Nullstelle in $x^* = 0$ mit $f'(0) = 5/4 \neq 0$ und ist beliebig oft stetig differenzierbar. Die Iterationsvorschrift ergibt sich hier als

$$x^{(i+1)} = x^{(i)} - f(x^{(i)})/f'(x^{(i)}) = x^{(i)} - \frac{5x^{(i)}/4 - (x^{(i)})^3/4}{5/4 - 3(x^{(i)})^2/4} = \frac{2(x^{(i)})^3}{-5 + 3(x^{(i)})^2}.$$

Mit Startwert $x^{(0)} = 1$ erhalten wir daraus

$$\begin{aligned} x^{(1)} &= \frac{2 \cdot 1}{-5 + 3 \cdot 1} = \frac{2}{-2} = -1 \\ x^{(2)} &= \frac{2 \cdot (-1)}{-5 + 3 \cdot 1} = \frac{-2}{-2} = 1 \\ x^{(3)} &= \frac{2 \cdot 1}{-5 + 3 \cdot 1} = \frac{2}{-2} = -1 \\ x^{(4)} &= \frac{2 \cdot (-1)}{-5 + 3 \cdot 1} = \frac{-2}{-2} = 1 \\ &\vdots \end{aligned}$$

Das Verfahren springt also für alle Zeiten zwischen 1 und -1 hin und her und konvergiert nicht. \square

Das Verfahren ist also tatsächlich nur lokal konvergent, es ist also wichtig, bereits einen brauchbaren Startwert $x^{(0)}$ für die Iteration zu haben. Im Buch von Deuffhard/Hohmann ist ein Verfahren beschrieben, mit dem bereits nach wenigen Schritten erkannt werden kann, dass voraussichtlich keine Konvergenz zu erwarten ist.

Ein wesentlicher Nachteil des Newton-Verfahrens ist, dass die Ableitung der Funktion f in der Iterationsvorschrift benötigt wird. Tatsächlich kann man die Ableitung durch eine geeignete numerische Näherung ersetzen und damit die explizite Berechnung von $Df(x^{(i)})$ vermeiden. Ersetzt man z.B. $f'(x)$ durch $(f(x + f(x)) - f(x))/f(x)$, so erhält man im \mathbb{R}^1 das sogenannte *Steffensen-Verfahren*.

Das Newton-Verfahren kann auch zur Bestimmung von Extremalstellen von Funktionen $g : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ verwendet werden, wenn man $f := \nabla g : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ setzt. In diesem Fall ist die Jacobi-Matrix Df gerade die Hesse-Matrix D^2g und man kann zur Vermeidung der exakten Berechnung von D^2g das sogenannte *BFGS-Verfahren* verwenden. Hierbei werden während der Iteration aus einer Startschätzung $B^{(0)} \approx D^2g(x^{(0)})$ iterativ Näherungen $B^{(i)} \approx D^2g(x^{(i)})$ erzeugt.

Da die numerische Approximation von Ableitungen im Allgemeinen sehr anfällig gegenüber Rundungsfehlern ist, muss die numerische Stabilität solcher Verfahren — möglichst unter Hinzunahme weiterer Informationen über f — genau überprüft werden.

Eine ableitungsfreie Alternative zum Newton-Verfahren, die im \mathbb{R}^1 funktioniert, ist das so genannte Sekanten-Verfahren, in dem statt der Tangente im Punkt $x^{(i)}$ die Sekante durch $x^{(i)}$ und $x^{(i-1)}$ berechnet wird (ebenfalls nur lokal konvergent). Die nächste Iterierte ergibt sich erneut als Nullstelle dieser Sekante. Die Idee ist in Abbildung 5.5 grafisch veranschaulicht.

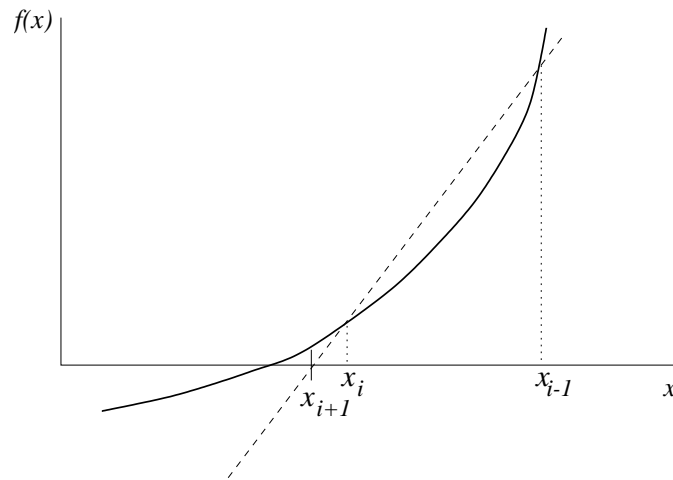


Abbildung 5.5: Sekanten-Verfahren

Die Konvergenzgeschwindigkeit des Sekanten-Verfahrens ist superlinear — eine “Zwischenstufe” zwischen linearer und quadratischer Konvergenz, die sich im *log-Diagramm* an einer Kurve mit negativer Krümmung erkennen lässt. Entsprechend entwickelt sich die Anzahl korrekter Nachkommastellen wie bei linearer Konvergenz, jedoch mit immer schnellerer Zunahme.

