Numerische Mathematik

- Zahlenmässige Lösung math. Probleme
- Theorie der Algorithmen (=Rechenverfahren)
- Theorie der Zahlenrechnung auf Computern

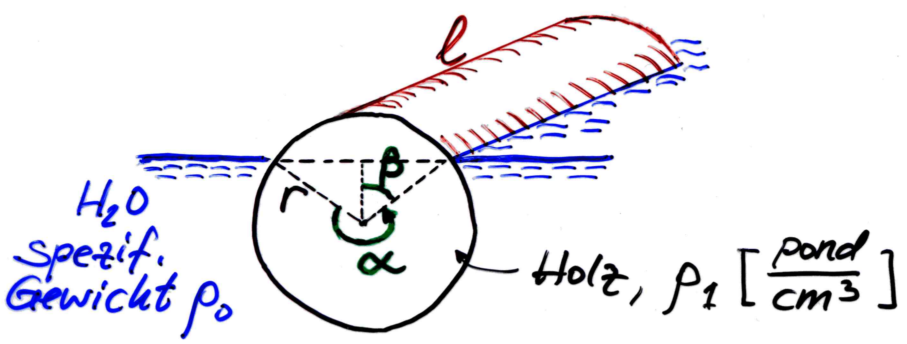
I. Gleichungen (numer. Algebra)

Alltägliche Objekte in math. Modellen

Ziel: Lösen, Berechnung der Unbekannten

<u>Beispiel</u> (willkürlich):

Schwimmender Balken



Radius : r

Länge : ℓ

$\beta = \pi - \frac{\alpha}{2}$

Archimedes:

$$G = r^2\pi \cdot \ell\rho_1 = \Big[\frac{r^2}{2}\alpha + r^2 \sin\underbrace{(\pi - \tfrac{\alpha}{2})}_{\beta} \cdot \cos(\pi - \tfrac{\alpha}{2})\Big]\ell\rho_0$$

$\uparrow$ Gewicht

Multiplikation mit $\frac{2}{r^2\rho_0\ell}$ ergibt

$\alpha = ?$ $\quad \boxed{\alpha - \sin\alpha = 2\pi\rho}$ $\quad \rho = \frac{\rho_1}{\rho_0} \in (0,1)$

Fixpunktform einer Gleichung: $\alpha = g(\alpha)$, $g(\alpha) := 2\pi\rho + \sin(\alpha)$

1. Iteration (iterare = wiederholen)

1.1. Fixpunkte

Gegeben: Funktion $g: x \in \underset{\text{Definitions-}}{D} \mapsto g(x) \in \underset{\text{Bildbereich}}{g(D)}$

Definition: $\xi \in D$ mit $g(\xi) = \xi$ heisst Fixpunkt von g

Sei $x_0 \in D$ eine Näherung für ξ und sei $\boxed{g(D) \subset D}$

Def: Der Prozess (Algorithmus)

$$x_{k+1} = g(x_k), \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

heisst "Fixpunkt-Iteration".

Klar: Falls die Folge $\{x_k\}$ konvergiert, gilt:

$$\xi = \lim_{k \to \infty} x_k \quad \text{ist Fixpunkt von } g$$

Beispiel. Tannenholz: $\rho = \frac{\rho_1}{\rho_0} = \frac{5}{6}$

Mit $g(\alpha) = 2\pi\rho + \sin(\alpha)$: $\alpha_{k+1} = 2\pi\rho + \sin(\alpha_k)$, $k = 0, 1, \dots$

z.B. $\alpha_0 = 0$

$\Rightarrow$ $\alpha_1 = 5.236$

$\alpha_2 = 4.370$

$\alpha_3 = 4.294$

$\alpha_4 = 4.322$

$\alpha_5 = 4.311$

$\alpha_6 = 4.315$

.....

.....

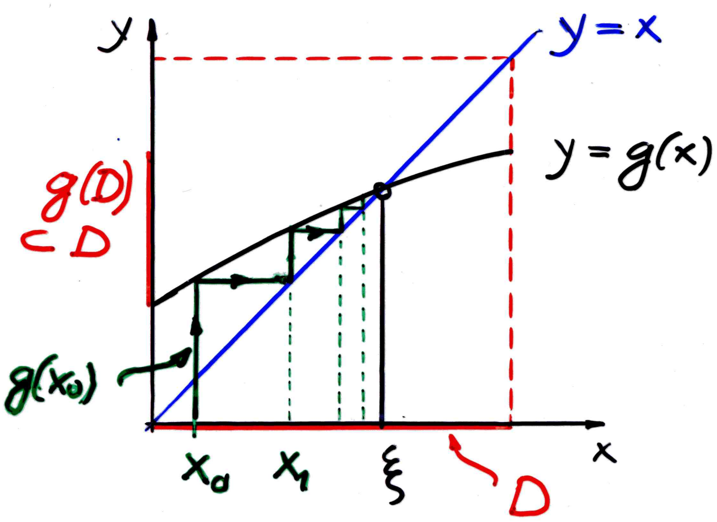
$\alpha_{23} = 4.3142\,16594$

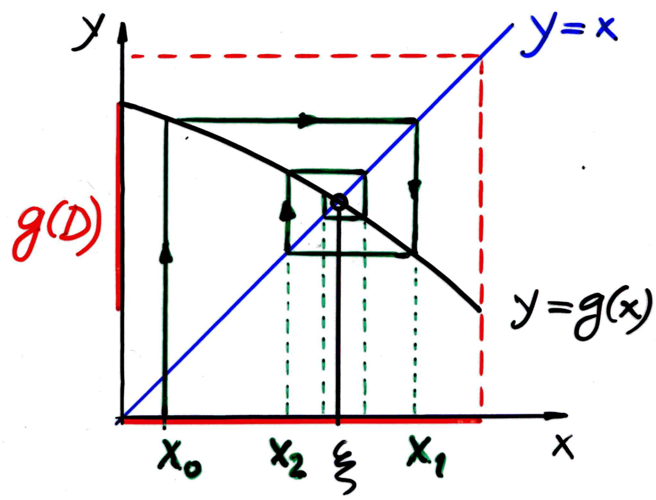
$\alpha_{24} = 4.3142\,16594$

$\alpha = 247^\circ.186403$

Fixpunkt

Graphisch



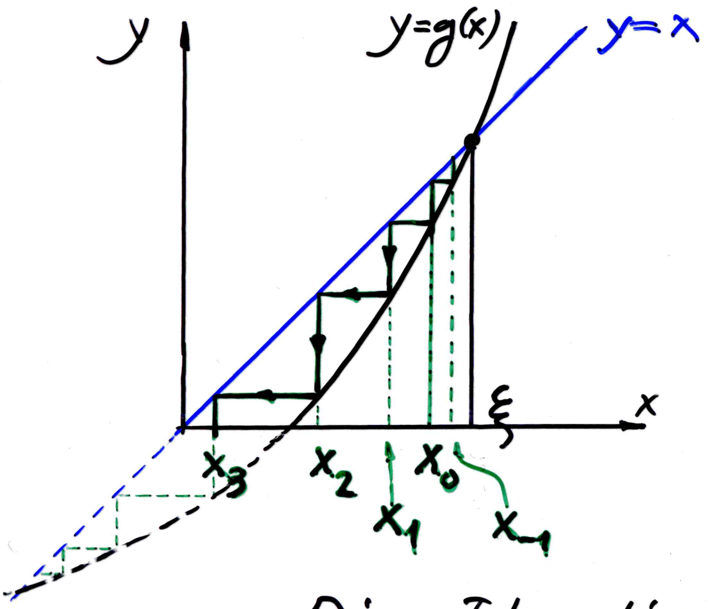


<u>Anziehende</u> Fixpunkte

(attraktiv, stabil)

Die Iteration konvergiert, $\lim_{k\to\infty} x_k = \xi$

Aber:



Hier ist ξ ein <u>abstossender</u> Fixpunkt

(repulsiv, instabil)

Die Iteration $x_{k+1} = g(x_k)$, $k = 0, 1, \ldots$

konvergiert nicht gegen ξ

Hingegen konvergiert die Rückwärts-Iteration

$$x_k = g^{-1}(x_{k+1}), \quad k = -1, -2, \ldots$$

gegen ξ, $\quad \xi = \lim_{k\to -\infty} x_k$

1.2. Fehlertheorie

Absoluter Fehler von x_k bez. des Fixpunktes ξ:

$$e_k := x_k - \xi \qquad \text{wobei } x_{k+1} = g(x_k)$$

Idee:

e_{k+1} durch e_k ausdrücken!

Taylorreihe im Punkt ξ verwenden:

(Sei g genügend oft diff'bar)

$$e_{k+1} = x_{k+1} - \xi = g(\xi + e_k) - \xi$$
$$= g'(\xi)\, e_k + \frac{1}{2!} g''(\xi)\, e_k^2 + O(e_k^3)$$

Asymptotisches Fehlergesetz:

Es gelte $x_k \to \xi$, d.h. Folge $\{x_k\}$ konvergiert gegen ξ

$\Rightarrow$ ξ ist attraktiver Fixpunkt

$e_k \to 0$ für $k \to \infty$

$$e_{k+1} = g'(\xi)\, e_k + O(e_k^2)$$

Konvergenzgeschwindigkeit

Def: Sei die Folge $\{x_k\}$ konvergent mit

$\lim_{k \to \infty} x_k = \xi$, und sei $e_k := x_k - \xi$.

$\{x_k\}$ heisst linear konvergent, falls

$q := \lim_{k \to \infty} \frac{e_{k+1}}{e_k}$ existiert mit $|q| < 1$, $q \neq 0$;

q heisst "Konvergenzfaktor".

SATZ: Die Iteration $x_{k+1} = g(x_k)$ gegen den anziehenden Fixpunkt ξ konv. linear mit K'faktor $g'(\xi)$.

Zusammenfassung

Sei ξ ein Fixpunkt von g, $\xi = g(\xi)$, und sei x_0 ein Startwert genügend nahe bei ξ. Iteration: $x_{k+1} = g(x_k)$. Hauptfälle:

(i) $|g'(\xi)| < 1 \Leftrightarrow \xi$ attraktiv, $x_k \to \xi$ für $k \to +\infty$

(ii) $|g'(\xi)| > 1 \Leftrightarrow \xi$ repulsiv, $x_k \to \xi$ für $k \to -\infty$

Bemerkung: Sei ξ ein repulsiver Fixpunkt von g, $|g'(\xi)| > 1$. Dann gilt

$$\left|(g^{-1})'(\xi)\right| = \left|\frac{1}{g'(\xi)}\right| < 1,$$

d.h. für die Rückwärtsiteration $x_k = g^{-1}(x_{k+1})$, $k = -1, -2, \ldots$ ist ξ anziehender Fixpunkt.

1.3. Der Banachsche Fixpunktsatz

Ein rigoroser mathematischer Satz Schwarz, S. 187

Möglichst schwache Voraussetzungen

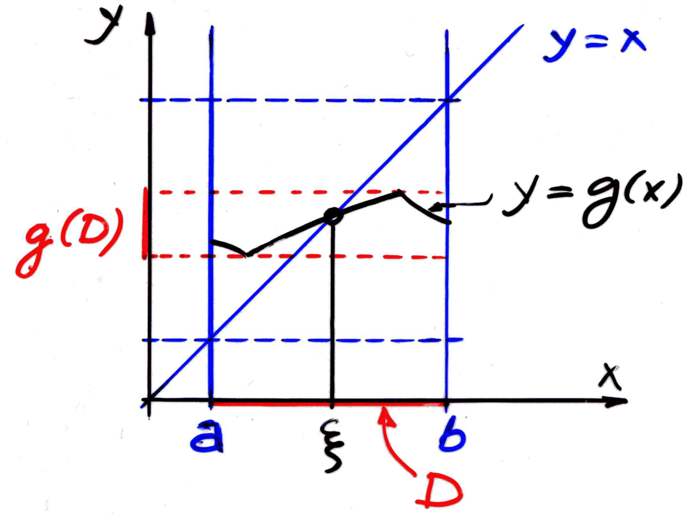
SATZ. Voraussetzungen:

(1) Sei g definiert und stetig im abgeschlossenen Intervall $D = [a, b]$

(2) Sei $g(D) \subset D$

(d.h. Bildbereich in D enthalten)

Sonst kann man nicht iterieren!



(3) Sei g kontrahierend, d.h. es existiere eine Konstante L, $0 < L < 1$ (sog. Lipschitzkonstante) so, dass für jedes Paar $x, y \in D$ gilt

$$(*) \qquad |g(y) - g(x)| < L\,|y - x|$$

(Lipschitz-Stetigkeit)

<u>Behauptung</u>:

Dann hat g in D genau einen Fixpunkt ξ. Er kann durch Iteration $x_{k+1} = g(x_k)$ beginnend mit einem beliebigen Startwert $x_0 \in D$ gefunden werden. Dabei gilt

$$|x_k - \xi| \le \frac{L^k}{1-L}\,|x_1 - x_0|, \qquad k = 1, 2, \ldots$$

<u>Bemerkungen</u>:

(i) Gleichung $(*)$ bedeutet: $L = \max\limits_{\substack{x \in D \\ y \in D}} \left| \frac{g(y) - g(x)}{y - x} \right|$
(Maximale Sekantensteigung)

(ii) Asymptotische Konvergentzgeschwindigkeit aus kleinem Intervall $[a, b] \ni \xi$: $L = g'(\xi)$

1.4. Newton-Verfahren (Newton-Raphson)

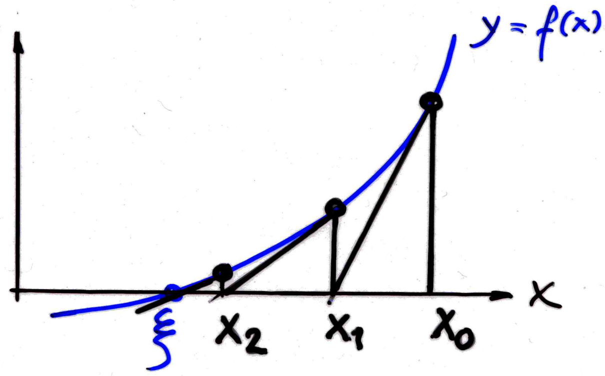
Zweite Standardform eines Gleichungsproblems:

$$f(x) = 0, \qquad \text{z.B. } f(\alpha) := \alpha - \sin\alpha - 2\pi p = 0$$

Gegeben: differenzierbare Funktion $f: x \mapsto f(x)$

Gesucht: Nullstelle ξ : $f(\xi) = 0$

Bekannt:



$$\xi = \lim_{k\to\infty} x_k$$

Beginn mit Startwert x_0, "genügend nahe" bei ξ

Suche Korrektur Δ mit

$$0 = f(x_0 + \Delta) \underset{\substack{\uparrow\\ \text{Taylor-Reihe}}}{=} f(x_0) + f'(x_0)\cdot\Delta + \underbrace{\tfrac{1}{2!} f''(x_0)\cdot\Delta^2 + \cdots}_{\text{vernachlässigen!}}$$

Setze $\Delta := -\dfrac{f(x_0)}{f'(x_0)}$; $\quad x_1 = x_0 + \Delta = x_0 - \dfrac{f(x_0)}{f'(x_0)}$

$$x_2 = x_1 - \frac{f(x_1)}{f'(x_1)}$$

Def.: Newtonsche Iterationsfunktion:

$$N(x) := x - \frac{f(x)}{f'(x)}$$

Newton-Iteration

$$x_{k+1} = N(x_k), \quad k = 0, 1, 2, \cdots$$

Falls x_0 genügend nahe bei ξ, gilt

$$\lim_{k\to\infty} x_k = \xi, \quad \text{wobei } f(\xi) = 0.$$

Konvergenztheorie

Funktion f, Nullstelle ξ: $f(\xi)=0$, $f'(\xi)\neq 0$, $f''(\xi)\neq 0$

Newton-Iterationsfunktion in ξ entwickeln:

Sei $x = \xi + e$ (e: Fehler)

$$\Rightarrow f(x) = \cancelto{0}{f(\xi)} + f'(\xi)e + \tfrac{1}{2}f''(\xi)e^2 + \mathcal{O}(e^3)$$

$$f'(x) = f'(\xi) + f''(\xi)e + \mathcal{O}(e^2)$$

$$\Rightarrow N(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)} = \xi + e - \frac{f'(\xi)e + \frac{1}{2}f''(\xi)e^2 + \mathcal{O}(e^3)}{f'(\xi) + f''(\xi)e + \mathcal{O}(e^2)}$$

$$\underset{\text{gleichnamig}}{=} \xi + \frac{\frac{1}{2}f''(\xi)e^2 + \mathcal{O}(e^3)}{f'(\xi) + \mathcal{O}(e)} \underset{\text{Potenzreihen-division}}{=} \xi + \frac{f''(\xi)}{2f'(\xi)}e^2 + \mathcal{O}(e^3)$$

Für die Iteration $x_{k+1} = N(x_k)$ mit $x_k = \xi + e_k$, $k \geq 0$ ergibt sich somit das asymptotische Fehlergesetz

$$(*) \quad \boxed{e_{k+1} = c \cdot e_k^2 + \mathcal{O}(e_k^3)} \quad \text{mit } c := \frac{f''(\xi)}{2f'(\xi)}$$

quadratische Konvergenz

Definition

Sei die Folge $\{x_k\}$ konvergent,

$$x_k \to \xi, \quad e_k := x_k - \xi \to 0 \quad \text{für } k \to \infty$$

Falls exist. $p \geq 1$, so dass der Grenzwert

$$c := \lim_{k\to\infty} \frac{|e_{k+1}|}{|e_k|^p} \quad \text{existiert mit } 0 < c < \infty,$$

so heisst die Folge konvergent mit Ordnung p.

Speziell: $p = 2$: quadratische Konvergenz (2. Ordnung)

$p = 1$: lineare Konv., nur mit $|c| < 1$.

Konvergenzbedingung (a posteriori, leider!)

Sei ξ bekannt $\Rightarrow$ $c := \dfrac{f''(\xi)}{2 f'(\xi)}$ bekannt

$$(*) \Rightarrow \quad c\, e_{k+1} = (c\, e_k)^2 + \mathcal{O}(e_k^3)$$

Notwendig für Konvergenz:

$$|c\, e_0| \lesssim 1 \quad \text{oder} \quad \boxed{|x_0 - \xi| < \left|\frac{2 f'(\xi)}{f''(\xi)}\right|}$$

($\mathcal{O}(e_k^3)$ vernachlässigt!)

Praktische Aspekte

(i) Das Newton-Verfahren ist selbstkorrigierend

Frühe Schritte dürfen ungenau, fehlerhaft sein

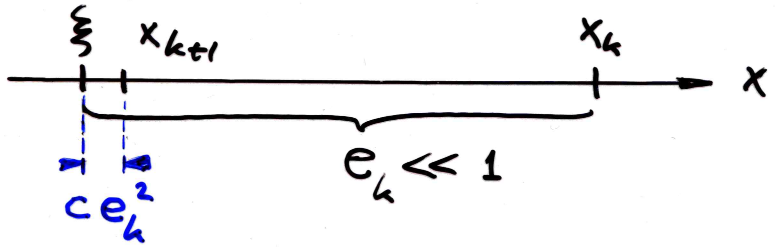
(ii) Abbrechkriterium. Sei $tol > 0$ geg. Toleranz

Ideal: Abbruch falls $|x_{k+1} - \xi| < tol$

Leider: ξ unbekannt

Versuche $|x_{k+1} - x_k| < \delta$, $\delta = ?$

Wie genau ist nun x_{k+1}?



Es gilt näherungsweise: $|e_k| \lesssim \delta$

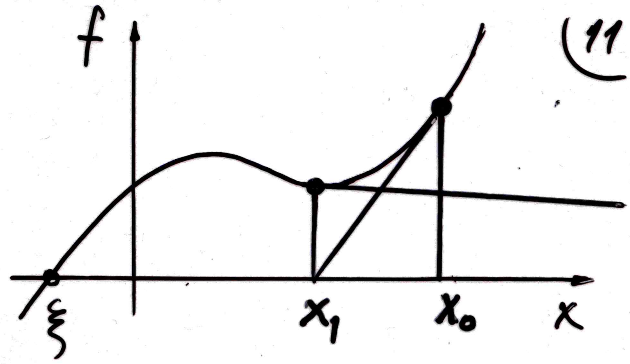
$$\Rightarrow |e_{k+1}| = |x_{k+1} - \xi| < |c|\, \delta^2 < tol$$

Abbrechkrit: $\boxed{\delta \approx \sqrt{\dfrac{tol}{|c|}}}$

Matlab: $tol = 10^{-16}$

z.B. $\delta = 10^{-9}$

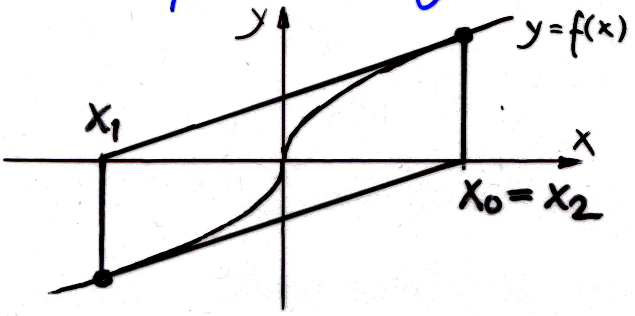
(iii) Technische Probleme



– $f'(x_k) \approx 0$

– Zyklus, z. B.

$f(x) = \text{sign}(x)\sqrt{|x|}$, $\xi = 0$, $f(\xi) = 0$



sei $x_0 > 0$ beliebig

$$x_1 = x_0 - \frac{\sqrt{x_0}}{\frac{1}{2\sqrt{x_0}}} = -x_0$$

$$x_2 = x_0$$

– Zu hohe Genauigkeitsforderung, z.B. tol = 10^{-20} in Matlab.
Abbruchbedingung wird ev. nie erfüllt, wegen Ungenauigkeit in den letzten Stellen.

Abhilfe (genügt meist schon):
Beschränkung der Anzahl der Iterationen (z.B. auf 10 ... 15).

Bemerkung: Das "sichere" Abbrechkriterium ist nicht einfach!

Probleme: Es muss die Genauigkeit tol garantieren, falls z.B. $x_k \approx 10^{-10}$[m] (H-Atom) oder $x_k \approx 10^{16}$ [m] (Sonnensystem)

Verwende relative Toleranz $\frac{|x_{k+1} - x_k|}{|x_{k+1}|} < \delta$

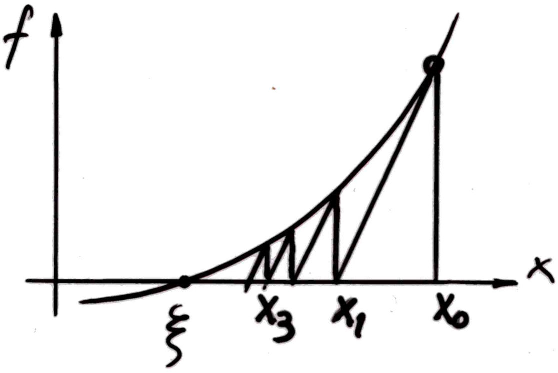
Aber: es könnte ja $x_{k+1} = 0$! $|x_{k+1} - x_k| < \delta_{rel} |x_{k+1}| + \delta_{abs}$

1.5. Quasi-Newton- und Sekantenmethode

Hinderlich (am Newton-Verfahren):
Für die Lösung von $f(x)=0$ braucht man $f'(x)$

Def: Quasi-Newton-Verfahren $:=$
Newton-Verfahren mit approximativer Abl. $\tilde{f}'(x)$

Mögliche Strategien:



(i) $\tilde{f}'(x) := f'(x_0)$
(fest)

Nur lineare Konvergenz, dafür keine wiederholte Berechnung von $f'(x_k)$

(ii) $\tilde{f}'(x) := \dfrac{f(x+h) - f(x)}{h}$ Differenzenquotient, h klein, fest

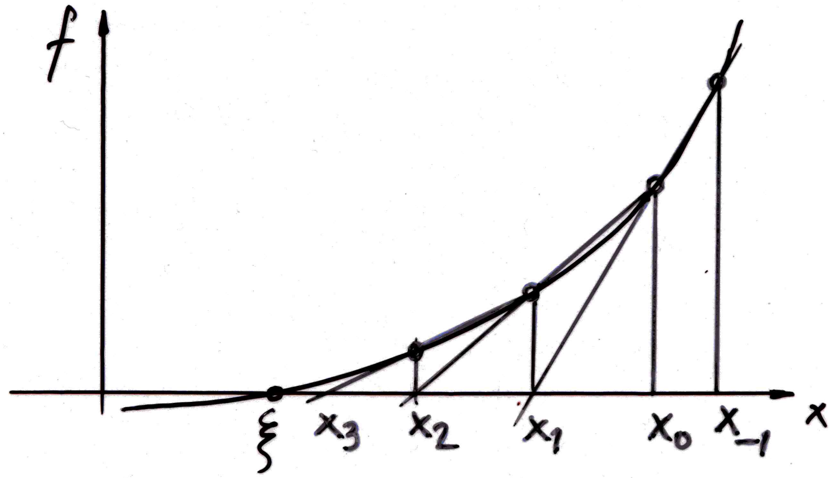
Gutes Verfahren, das nur Werte von f braucht. Auch geeignet für n Dimensionen.

(iii) $\tilde{f}'(x_k) := \dfrac{f(x_k) - f(x_{k-1})}{x_k - x_{k-1}}$

Sekanten-Verfahren: Die Ableitung $f'(x_k)$ wird durch die Sekantensteigung aus den beiden letzten Punkten approximiert.

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{\dfrac{f(x_k) - f(x_{k-1})}{x_k - x_{k-1}}}, \quad k = 0, 1, \dots$$

Braucht 2 Startwerte, x_0, x_{-1}; z.B. $x_{-1} = x_0 - h$.



Eigenschaften

- Nur eine Auswertung von f pro Schritt
- Fehlergesetz: Für $e_k := x_k - \xi$ gilt

$$e_{k+1} = c \cdot e_k \cdot e_{k-1} + \mathcal{O}(e_k^3) \quad \text{mit } c = \frac{f''(\xi)}{2f'(\xi)}$$

$$\Rightarrow \quad c \cdot e_{k+1} \sim (c \cdot e_k)^{\phi} \quad \text{mit } \phi = \frac{\sqrt{5}+1}{2} = 1.618\ldots$$

"asymptotisch"

bei geeigneten Startwerten

1.6. Quasi-Newton-Verfahren in n Dimensionen

Nichtlineare Gleichungssysteme, z.B.

$$(*) \qquad \begin{cases} f_1(x^1, x^2) = 0 \\ f_2(x^1, x^2) = 0 \end{cases}$$

Definiere Vektor $\underline{x} = \begin{pmatrix} x^1 \\ x^2 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^2$

und Abbildung $\underline{f}: \underline{x} \in \mathbb{R}^2 \mapsto \underline{f}(\underline{x}) \in \mathbb{R}^2$

Gleichungssystem (*) $\Rightarrow \underline{f}(\underline{x}) = 0$

Sei also $\underline{x} \in \mathbb{R}^n$, $\underline{f}: \underline{x} \in \mathbb{R}^n \mapsto \underline{f}(\underline{x}) \in \mathbb{R}^n$

Gesucht: Nullstelle $\underline{\xi} \in \mathbb{R}^n$ mit $\underline{f}(\underline{\xi}) = 0$.

Analog zu S. 8: Gesucht Korrekturvektor $\underline{\Delta}$:

$$(*) \qquad 0 = \underline{f}(\underline{x}_0 + \underline{\Delta}) = \underline{f}(\underline{x}_0) + J(\underline{x}_0) \cdot \underline{\Delta} + O(\Delta^2)$$

vgl. S. 8!

n-dim. Taylor-Reihe — Matrix mal Vektor

Dabei ist $\underline{x}_0$ ein geeigneter Startvektor, und

$$J(\underline{x}_0) = \left(\frac{\partial \underline{f}}{\partial x^1}, \dots, \frac{\partial \underline{f}}{\partial x^n} \right) \Bigg|_{\underline{x} = \underline{x}_0}$$

ist die Jacobi-Matrix der Abbildung $\underline{f}$ im Punkt $\underline{x}_0$.

Vernachlässigung der Terme $O(\Delta^2)$, Auflösg von (*):

$$\underline{\Delta} = -\left(J(\underline{x}_0)\right)^{-1} \underline{f}(\underline{x}_0) = -J(x_0) \backslash \underline{f}(\underline{x}_0)$$

(Matlab)

Erster Newton-Schritt

$$\underline{x}_1 = \underline{x}_0 - \left(J(\underline{x}_0)\right)^{-1} \underline{f}(\underline{x}_0) \qquad (= \underline{x}_0 + \underline{\Delta})$$

<u>Praktisch</u>

Berechnung von $J(\underline{x}_0)$ kann sehr mühsam sein: n^2 partielle Ableitungen!

Approximation der Jacobi-Matrix durch Differenzenquotienten:

$$\tilde{J}(\underline{x}_0) = \left(\frac{\underline{f}\left(\underline{x}_0 + \begin{pmatrix} h \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}\right) - \underline{f}(\underline{x}_0)}{h}, \dots, \frac{\underline{f}\left(\underline{x}_0 + \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ h \end{pmatrix}\right) - \underline{f}(\underline{x}_0)}{h} \right)$$

Erste Kolonne — Letzte Kolonne