

# 9. Nichtlineare Gleichungssysteme

## 9.1 Problemstellung, Allgemeines

Gesucht ist eine Nullstelle  $x^*$  einer Funktion

$$f: \mathbb{R}^n \supset D \rightarrow \mathbb{R}^n,$$

also eine Lösung des (nicht linearen)  
Gleichungssystems

$$f(x) = 0 \quad (9.1)$$

Dabei  $x = (x_1, \dots, x_n)^T$ ,  $f = (f_1, \dots, f_n)^T$ , also

„Genauso viele Gleichungen wie  
„Unbekannte““

### Voraussetzungen: (9.2)

①  $f$  ist hinreichend oft stetig differenzierbar  
(wenigstens eine  $C^2$ -Funktion)

② Die Jacobi-Matrix

$$Jf(x) = f'(x) = \left( \frac{\partial f_i}{\partial x_j}(x) \right) \in \mathbb{R}^{(n,n)}$$

ist in einer Umgebung von  $x^*$  regulär!

# Anmerkungen (zur Analysis)

a) Eine Funktion  $f: \mathbb{R}^n \supset D \rightarrow \mathbb{R}^n$  heißt in einem Punkt  $x_0 \in D^\circ$  differenzierbar, wenn es eine Matrix  $A \in \mathbb{R}^{(n,n)}$  gibt mit

$$\lim_{x \rightarrow x_0} \frac{f(x) - f(x_0) - A(x - x_0)}{\|x - x_0\|} = 0$$

Man schreibt hierfür auch:

$$f(x) = f(x_0) + A(x - x_0) + o(\|x - x_0\|) \quad (9.3)$$

( $o =$  Landau-Symbol)

b) Ist  $f$  in  $x_0$  dffb., so ist  $f$  auch partiell dffb. und es gilt  $A = Jf(x_0)$ .

Umgekehrt: Ist  $f$  auf einem Gebiet  $D \subset \mathbb{R}^n$  stetig partiell dffb., so ist  $f$  dort auch dffb.

c) Differentiationsregeln: (9.4)

- $J(\alpha f + \beta g)(x_0) = \alpha Jf(x_0) + \beta Jg(x_0)$
- $J(g \circ f)(x_0) = Jg(f(x_0)) \cdot Jf(x_0)$
- $J(f^{-1})(f(x_0)) = Jf(x_0)^{-1}$



### d) Mittelwertsatz (9.5)

Ist  $f$  eine  $C^1$ -Funktion und  $D$  konvex, so gilt für jede Komponente von  $f$ :

$$f_i(y) - f_i(x) = \nabla f_i(x + \theta_i(y-x))^T (y-x),$$

$$0 < \theta_i < 1$$

Dabei ist

$$\nabla f_i(x) := \left( \frac{\partial f_i}{\partial x_1}(x), \dots, \frac{\partial f_i}{\partial x_n}(x) \right)^T \quad \underline{\text{Gradient}}$$

### e) Mittelwert - Abschätzungssatz (9.6)

$$\|f(y) - f(x)\| \leq \|Jf(x + \theta(y-x))\| \|y-x\|,$$

$$0 < \theta < 1$$

### f) Satz von Taylor (9.7)

Ist  $f$  eine  $C^2$ -Funktion,  $D$  konvex, so gilt für jede Komponente von  $f$ :

$$f_i(y) = f_i(x) + \nabla f_i(x)^T (y-x) +$$

$$+ \frac{1}{2!} (y-x)^T \nabla^2 f_i(x) (y-x) + o(\|y-x\|^2)$$

Dabei:

$$\nabla^2 f_i(x) = \left( \frac{\partial^2 f_i}{\partial x_j \partial x_k}(x) \right)_{1 \leq j, k \leq n} \quad \underline{\text{Hesse-Matrix}}$$

Die Hesse-Matrix  $\nabla^2 f_i(x)$  einer  $C^2$ -Funktion ist stets symmetrisch (Satz von Schwarz).

### g) Umkehrsatz (9.8)

Ist  $f$  auf  $D$  eine  $C^1$ -Funktion und ist  $Jf(x_0)$  für ein  $x_0 \in D$  regulär, so gibt es (offene) Umgebungen  $U$  von  $x_0$  und  $V$  von  $f(x_0)$ , so dass  $f|_U : U \rightarrow V$  bijektiv ist, die Umkehrfkt.  $f^{-1}$  eine  $C^1$ -Funktion ist und  $Jf^{-1}(f(x)) = Jf(x)^{-1}$  gilt.

### Folgerung (9.9)

Ist  $Jf(x^*)$  regulär in einer Nullstelle  $x^*$  von  $f$  (vgl. Vorauss. 9.2), so gilt in der entsprechenden Umgebung  $U$  von  $x^*$ :

$$\forall x \in U : ( f(x) = 0 \implies x = x^* ),$$

d.h.  $x^*$  ist eine isolierte Nullstelle von  $f$ .



## Kondition

Wie wirken sich Fehler in der Funktion  $f(x)$  auf die Nullstelle  $x^*$  aus?

$$\begin{array}{ccc} f(x) & \longmapsto & \tilde{f}(x) = f(x) + \Delta f(x) \\ x^* & \longmapsto & \tilde{x}^* \end{array}$$

Mit dem Taylorschen Satz finden wir

$$\begin{aligned} 0 = \tilde{f}(\tilde{x}^*) &= f(x^* + \Delta x^*) + \Delta f(x^* + \Delta x^*) \\ &\approx \underbrace{f(x^*)}_{=0} + Jf(x^*) \Delta x^* + \Delta f(x^*) \end{aligned}$$

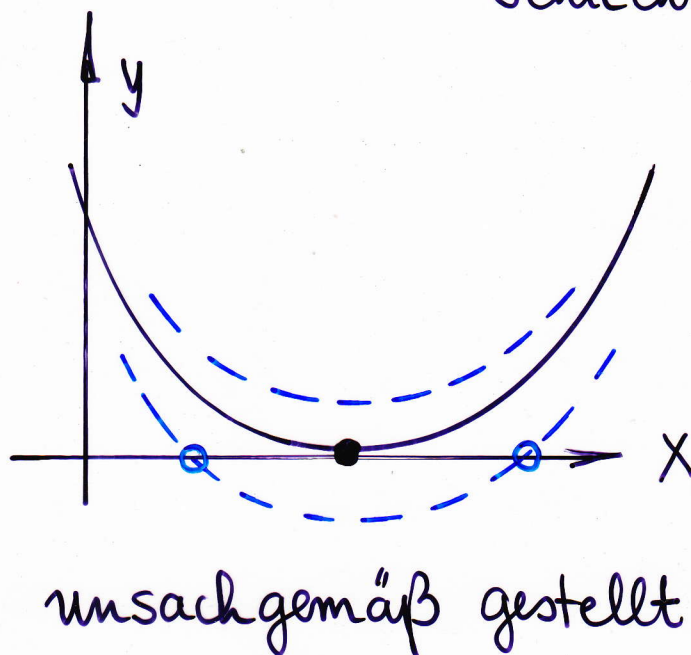
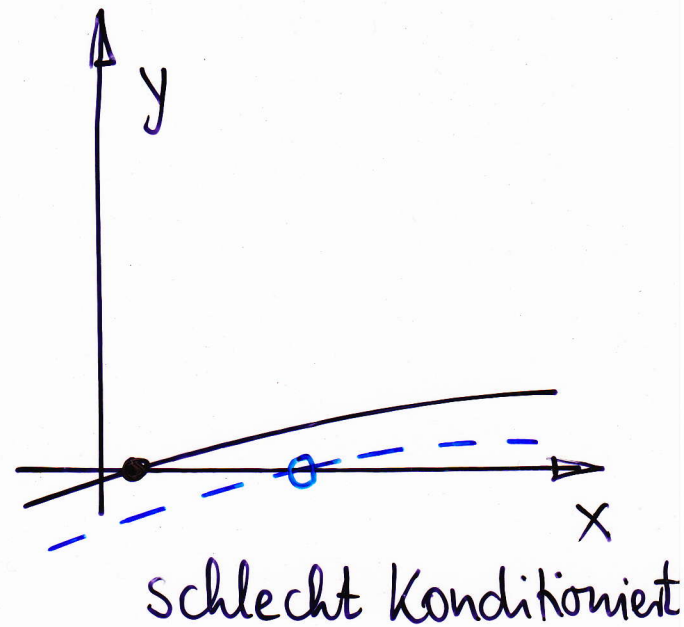
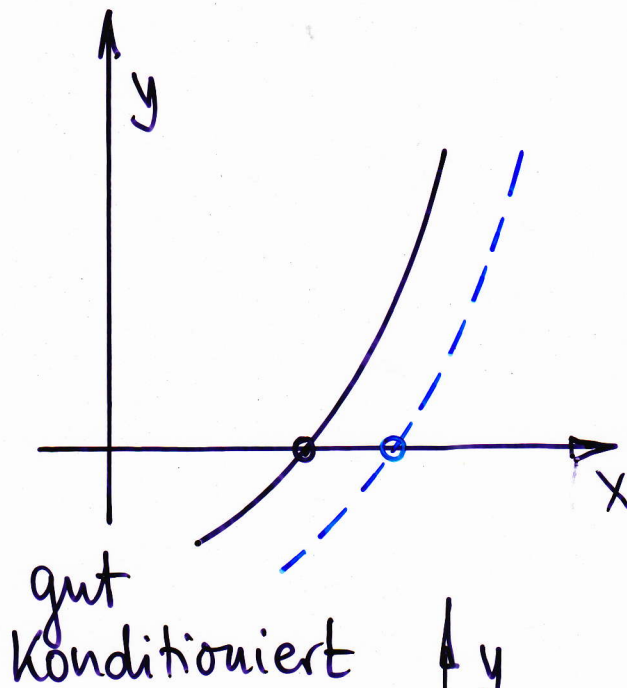
$\Rightarrow \Delta x^*$  lässt sich näherungsweise berechnen aus dem linearen Gleichungssystem

$$Jf(x^*) \Delta x^* = -\Delta f(x^*). \quad \underline{(9.10)}$$

$\Rightarrow$  Die (absolute) Kondition ist gegeben durch

$$\kappa_{\text{abs}} = \| Jf(x^*)^{-1} \| \quad \underline{(9.11)}$$

Das Nullstellenproblem ist damit nur für reguläre  $Jf(x^*)$  sachgemäß gestellt und nur gut konditioniert, wenn  $\kappa_{\text{abs}}$  klein ist.



## 9.2 Eine skalare Gleichung

Verfahren zur Nullstellenbestimmung einer skalaren Funktion hatten wir bereits in Abschnitt 2.5 kennengelernt:

- a) Bisektionsverfahren
- b) Newton-Verfahren



## A: Bisektion (9.12)

Start :  $x_0, x_1$  mit  $f(x_0) f(x_1) < 0$   
Iteration : Für  $k = 1, 2, \dots$   
 $x_{k+1} := (x_k + x_{k-1}) / 2$   
 falls  $f(x_{k+1}) \cdot f(x_k) > 0$  :  $x_k = x_{k-1}$   
 Abbruch, falls  $|x_{k+1} - x_k|$  klein

### Fehlerbetrachtung:

Es gilt  $|x_k - x^*| \leq |x_k - x_{k-1}| =: \delta_k$   
 sowie für das Fehlermaß :  $\delta_{k+1} = \frac{1}{2} \delta_k$   
 Man spricht von linearer Konvergenz.

## B: Newton-Verfahren (9.13)

Start :  $x_0$  Näherung für  $x^*$   
Iteration : Für  $k = 0, 1, 2, \dots$   
 $x_{k+1} := x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}$   
 Abbruch, falls  $|x_{k+1} - x_k|$  klein

## Fehlerbetrachtung:

Es gibt eine Umgebung  $U$  von  $x^*$ , so dass für alle  $x_0 \in U$  gilt:

$$|x_{k+1} - x^*| \leq C |x_k - x^*|^2 \quad (9.14)$$

Man spricht von quadratischer Konvergenz.

## Beweis zu (9.14)

Taylor-Entwicklung von  $f$  um  $x_k$ :

$$f(x) = f(x_k) + f'(x_k)(x - x_k) + \frac{1}{2!} f''(\tilde{x}_k)(x - x_k)^2$$

$\tilde{x}_k$ : Zwischenwert

Mit  $x = x^*$  folgt:

$$0 = f(x_k) + f'(x_k)(x^* - x_k) + \frac{f''(\tilde{x}_k)}{2} (x^* - x_k)^2$$

$$(9.2) \quad \Rightarrow -\frac{f(x_k)}{f'(x_k)} = x^* - x_k + \frac{f''(\tilde{x}_k)}{2 f'(x_k)} (x^* - x_k)^2$$

$$\Rightarrow (x_{k+1} - x^*) = \underbrace{\frac{f''(\tilde{x}_k)}{2 f'(x_k)}}_{|\dots| \leq C} \cdot (x_k - x^*)^2$$

für  $x_k \in U$ ,  $\tilde{x}_k = x_k + \theta_k(x^* - x_k)$ ,  $0 < \theta_k < 1$ .





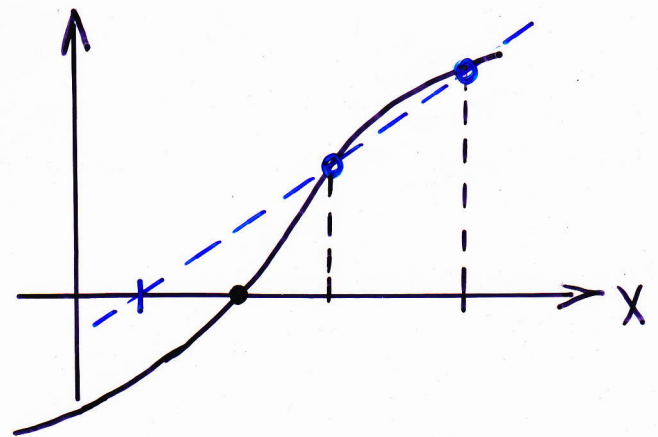
Bem.: Für konvexe Funktionen ( $f'' > 0$ )  
 und Startwerten  $x_0 > x^*$ ,  $f(x_0) > 0$   
 lässt sich mit obiger Beweisidee auch die  
monotone Konvergenz zeigen:

$$x^* < \dots < x_{k+1} < x_k < x_{k-1} < \dots < x_0.$$

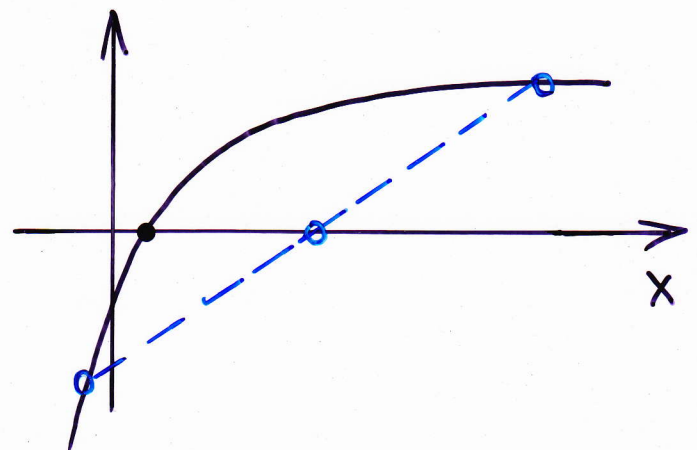
## C. Interpolationstechniken

Zur Beschleunigung des Bisektionsverfahrens  
 werden auch häufig Interpolationstechniken  
 verwendet. Zu diesen Verfahren gehören

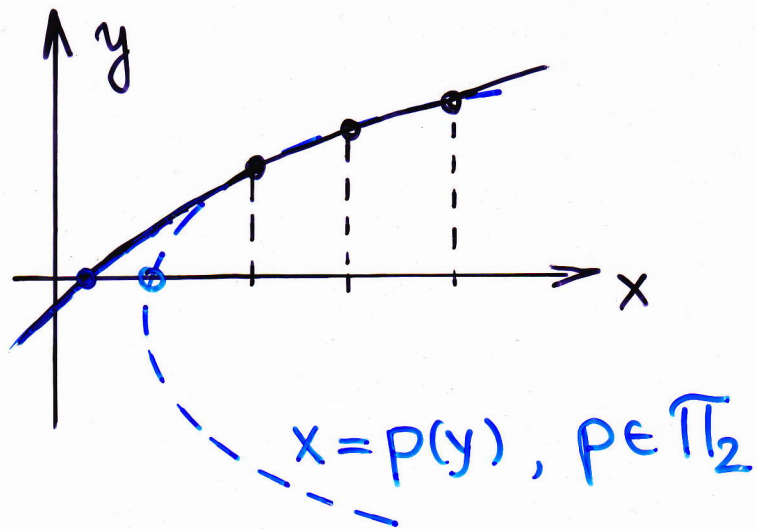
Sekantenverfahren:



Regula falsi:



## Inverse Interpolation:



## 9.3. Fixpunktiteration

Für ein nichtlineares Gleichungssystem (9.1) werde irgendein Iterationsverfahren der Form

$$x_{k+1} = \phi(x_k) \quad (9.15)$$

angewendet.  $\phi$  heißt dabei die Verfahrensfunktion. Wir nehmen an, dass  $\phi$  stetig ist. Konvergiert das Verfahren, so folgt damit für den Grenzwert  $x^*$ :

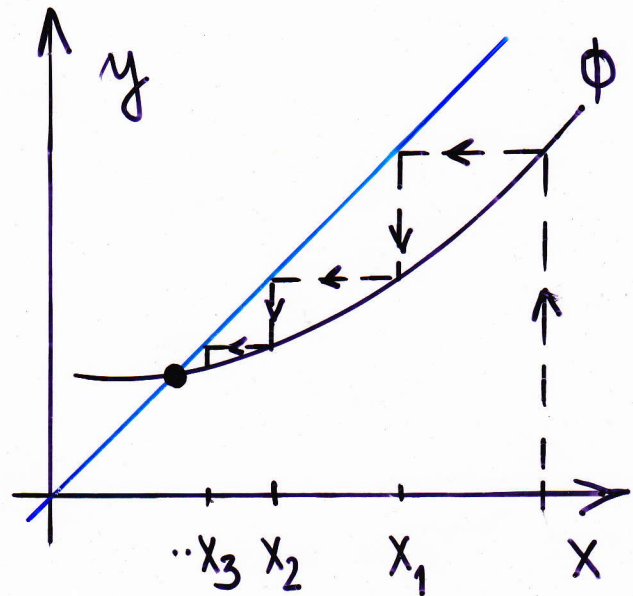
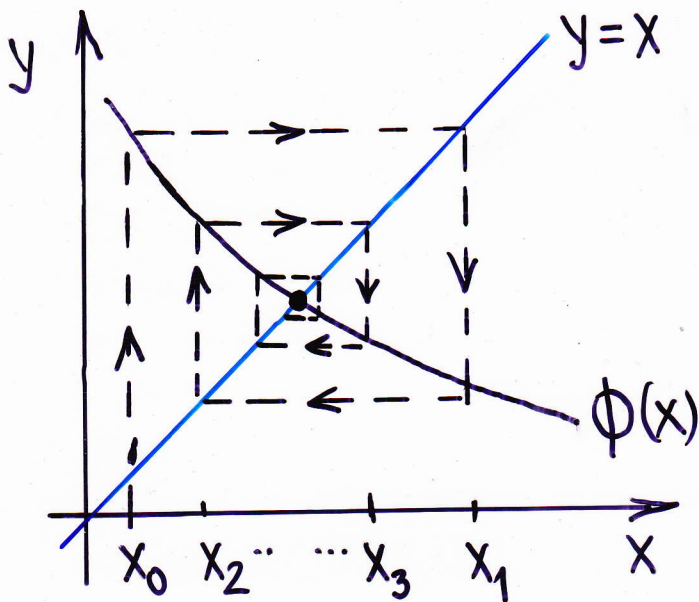
$$x^* = \lim_{k \rightarrow \infty} x_{k+1} = \lim_{k \rightarrow \infty} \phi(x_k) = \phi(x^*)$$





$\Rightarrow$  Der Grenzwert  $x^*$  ist ein Fixpunkt der Verfahrensfunktion  $\phi$ .

Man nennt daher die Iteration (9.15) auch Fixpunktiteration.

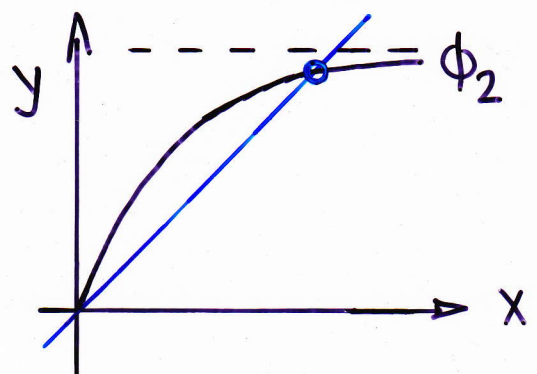
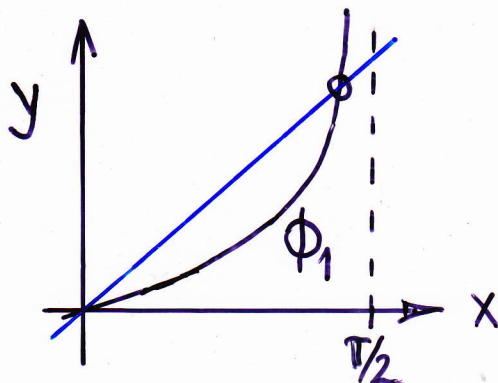


### Beispiel (9.16)

Gesucht ist die Nullstelle  $x^* \in ]0, \frac{\pi}{2}[$  von  $f(x) := 2x - \tan x$ . Umformungen:

$$x = \frac{1}{2} \tan x =: \phi_1(x)$$

$$x = \arctan(2x) =: \phi_2(x)$$



| $k$ | $x_k = \phi_1(x_{k-1})$  |
|-----|--------------------------|
| 0   | 1.2                      |
| 1   | 1.2860                   |
| 2   | 1.7083 $> \frac{\pi}{2}$ |
| 3   | -3.6107                  |
| 4   | -0.2534                  |

↓  
0

| $k$ | $x_k = \phi_2(x_{k-1})$ |
|-----|-------------------------|
| 0   | 1.2                     |
| 5   | 1.1656                  |
| 10  | 1.1655614               |
| 15  | 1.165561186             |
| 20  | 1.165561185             |

## Satz (9.17) (Banachscher Fixpunksatz)

Sei  $D \subset \mathbb{R}^n$  abgeschlossen,  $\phi: D \rightarrow D$  eine Kontrahierende Abbildung, also

$$\forall x, y \in D: \|\phi(x) - \phi(y)\| \leq L \|x - y\|$$

mit  $0 < L < 1$  (Kontraktionskonstante)

Dann gelten:

a)  $\phi$  hat in  $D$  genau einen Fixpunkt  $x^*$ .

b) Für  $x_0 \in D$  kvgt.  $x_{k+1} = \phi(x_k)$  gegen  $x^*$ .

c) Fehlerabschätzung:

$$\|x_k - x^*\| \leq \frac{L}{1-L} \|x_k - x_{k-1}\| \leq \frac{L^k}{1-L} \|x_1 - x_0\|$$



## Zusatz (9.18) Kugelbedingung

Ist  $\phi: K \rightarrow \mathbb{R}^n$  auf einer kompakten Kugel

$$K = \{x \in \mathbb{R}^n \mid \|x - y_0\| \leq r\}$$

Kontrahierend mit Kontraktionskonstanter  $L$

und gilt  $\|\phi(y_0) - y_0\| \leq (1-L)r$ ,

so folgt  $\phi(K) \subset K$  und der Fixpkt.satz lässt sich mit  $D = K$  anwenden.

### Beweis zu (9.17):

- Da  $\phi: D \rightarrow D$  ist die Folge  $(x_k)$  für  $x_0 \in D$  wohldefiniert.

- Für  $l \geq k$  gilt:

$$\begin{aligned} \|x_{l+1} - x_l\| &= \|\phi(x_l) - \phi(x_{l-1})\| \leq L \|x_l - x_{l-1}\| \\ &\leq L^2 \|x_{l-1} - x_{l-2}\| \leq \dots \\ &\leq L^{l-k+1} \|x_k - x_{k-1}\| \quad \underline{(1)} \end{aligned}$$

- Für  $l \geq k$  gilt:

$$\begin{aligned} \|x_{l+1} - x_k\| &= \|x_{l+1} - x_l + x_l - x_{l-1} + \dots + x_{k+1} - x_k\| \\ &\leq \|x_{l+1} - x_l\| + \|x_l - x_{l-1}\| + \dots + \|x_{k+1} - x_k\| \end{aligned}$$



$$\stackrel{(1)}{\leq} \sum_{j=1}^{l-k+1} L^j \|x_k - x_{k-1}\|$$

$$\text{Geom. Reihe} \stackrel{(1)}{\leq} \frac{L}{1-L} \|x_k - x_{k-1}\| \quad (2)$$

$$\stackrel{(1)}{\leq} \frac{L^k}{1-L} \|x_1 - x_0\| \quad (3)$$

- Wegen  $L < 1$  ist  $(x_k)$  daher eine Cauchy-Folge und somit ( $D$  abgeschlossen) in  $D$  kvgt.

Der Grenzwert  $x^*$  ist nach Früherem ein Fixpunkt (jede kontrah. Abb. ist stetig)

Die Fehlerabschätzungen folgen aus (2), (3) für  $l \rightarrow \infty$ .

- Sind  $x^*$  und  $\tilde{x}^*$  Fixpunkte, so folgt:

$$\|\tilde{x}^* - x^*\| = \|\phi(\tilde{x}^*) - \phi(x^*)\| \leq L \|\tilde{x}^* - x^*\|$$

$$\text{und daher wegen } L < 1: \|\tilde{x}^* - x^*\| = 0$$

### Beweis zu (9.18):

Für  $x \in K$  gilt:

$$\begin{aligned} \|\phi(x) - y_0\| &= \|\phi(x) - \phi(y_0) + \phi(y_0) - y_0\| \\ &\leq L \|x - y_0\| + (1-L)r \leq r \end{aligned}$$

## fixpkt1.txt

| n  | $x_n = 0.1 * \exp(x_{(n-1)})$ | $D = L/(1-L) *  x_n - x_{(n-1)} $ |
|----|-------------------------------|-----------------------------------|
| 0  | 1                             |                                   |
| 1  | 2.718281828459045e-001        | 2.718281828459045e-001            |
| 2  | 1.312361495721459e-001        | 5.248332334088302e-002            |
| 3  | 1.140237016004385e-001        | 6.425445676770510e-003            |
| 4  | 1.120778688818010e-001        | 7.263837456612186e-004            |
| 5  | 1.118599961381958e-001        | 8.133238693214044e-005            |
| 6  | 1.118356275486597e-001        | 9.096849474371191e-006            |
| 7  | 1.118329023053617e-001        | 1.017339474077045e-006            |
| 8  | 1.118325975339095e-001        | 1.137718709832835e-007            |
| 9  | 1.118325634505315e-001        | 1.272340192219617e-008            |
| 10 | 1.118325596389001e-001        | 1.422890625066354e-009            |
| 11 | 1.118325592126356e-001        | 1.591255035984483e-010            |
| 12 | 1.118325591649653e-001        | 1.779540921272014e-011            |
| 13 | 1.118325591596342e-001        | 1.990110421280445e-012            |
| 14 | 1.118325591590380e-001        | 2.225589846001466e-013            |
| 15 | 1.118325591589714e-001        | 2.488246748218119e-014            |
| 16 | 1.118325591589639e-001        | 2.787167917013008e-015            |



## Bemerkungen (9.19)

a) Ist  $\phi: \tilde{D} \rightarrow \mathbb{R}^n$  eine  $C^1$ -Funktion,  $\tilde{D} \subset \mathbb{R}^n$  offen und konvex, so ist

$$L := \sup_{x \in \tilde{D}} \|\mathcal{J}\phi(x)\|$$

eine Lipschitz-Konstante für  $\phi$  auf  $D \subset \tilde{D}$ .

b) Der Fixpunktsatz gilt sinngemäß für vollständige metrische Räume.

## 9.4 Newton-Verfahren

Ist  $f: \mathbb{R}^n \supset D \rightarrow \mathbb{R}^n$  eine  $C^2$ -Funktion,  $x_0 \in D$ , so liefert die Taylor-Entwicklung (9.7) :

$$f(x) = f(x_0) + \mathcal{J}f(x_0)(x-x_0) + o(\|x-x_0\|)$$

Wir vernachlässigen das Restglied und setzen für  $x$  eine Näherung  $x_1$  der Nullstelle  $x^*$  ein:

$$0 \approx f(x_0) + \mathcal{J}f(x_0)(x_1 - x_0) \quad \Rightarrow$$



# Algorithmus (9.20)

Start :  $x_0 \in D \subset \mathbb{R}^n$  (offen + konvex)  
Iteration : Für  $k = 0, 1, 2, \dots$   
 Löse das lin. Gleichungssystem:  
 $Jf(x_k) \Delta x_k = -f(x_k)$   
 $x_{k+1} = x_k + \Delta x_k$   
 Abbruch, falls  $\|\Delta x_k\|$  klein

Das Newton-Verfahren hat - wie im eindim. Fall - die Eigenschaft der schnellen lokalen Konvergenz. Dazu:

## Definition (9.21)

Für eine konvergente Folge  $(x_k) \in (\mathbb{R}^n)^{\mathbb{N}_0}$  sagt man

a)  $(x_k)$  linear konvergent :  $\Leftrightarrow \exists C < 1$  :  
 $\forall k \in \mathbb{N}_0 : \|x_{k+1} - x^*\| \leq C \|x_k - x^*\|$

b)  $(x_k)$  superlinear konvergent :  $\Leftrightarrow \exists C_k > 0$   
 $C_k \rightarrow 0 (k \rightarrow \infty) \wedge \forall k : \|x_{k+1} - x^*\| \leq C_k \|x_k - x^*\|$

c)  $(x_k)$  konvergiert mit der Ordnung  $p > 1$

$$: \iff \exists C > 0 \forall k: \|x_{k+1} - x^*\| \leq C \|x_k - x^*\|^p$$

Fixpunkt iterationen sind häufig nur linear konvergent, vgl. (9.17).

Je näher  $C \approx L$  bei 1 liegt, desto langsamer ist die Konvergenz.

### Satz (9.22) (Quadratische Konvergenz)

$f: \mathbb{R}^n \supset D \rightarrow \mathbb{R}^n$   $C^1$ -Funktion,  $D$  offen + konvex,  
 $x^* \in D$  Nullstelle,  $\forall x \in D: Jf(x)$  regulär,

Lipschitz-Bedingung:  $\exists L > 0$ :

$$\forall x, y \in D: \|Jf(x)^{-1}(Jf(y) - Jf(x))\| \leq L \|y - x\|$$

Für  $r := 2/L$  gelte  $K_r(x^*) \subset D$ .

Für Startwerte  $x_0 \in K_r(x^*)$  ist das Newton-Verfahren (9.20) dann wohldefiniert,  $x_k \in K_r(x^*)$  und quadratisch konvergent

$$\|x_{k+1} - x^*\| \leq \frac{1}{2} \|x_k - x^*\|^2$$

Ferner ist  $x^*$  die einzige Nullstelle von  $f$  in  $K_r(x^*)$ .



Beweis:

Die Hilfsfunktion  $\varphi(t) := Jf(x)^{-1} f(x+t(y-x))$ ,  
 $t \in [0,1]$  ist stetig diffb. mit

$$\varphi'(t) = Jf(x)^{-1} Jf(x+t(y-x)) (y-x)$$

Damit folgt für  $t \in [0,1]$ :

$$\begin{aligned} \|\varphi'(t) - \varphi'(0)\| &= \|Jf(x)^{-1} [Jf(x+t(y-x)) - Jf(x)] (y-x)\| \\ &\leq \|Jf(x)^{-1} [Jf(x+t(y-x)) - Jf(x)]\| \cdot \|y-x\| \\ &\leq L \cdot t \cdot \|y-x\|^2. \end{aligned} \quad \underline{(1)}$$

$\Rightarrow$

$$\begin{aligned} \|Jf(x)^{-1} \{f(y) - f(x) - Jf(x)(y-x)\}\| &= \\ &= \|\varphi(1) - \varphi(0) - \varphi'(0)\| \\ &= \left\| \int_0^1 (\varphi'(t) - \varphi'(0)) dt \right\| \\ &\leq \int_0^1 \|\varphi'(t) - \varphi'(0)\| dt \\ &\stackrel{(1)}{\leq} L \|y-x\|^2 \int_0^1 t dt \\ &= \frac{L}{2} \|y-x\|^2. \end{aligned} \quad \underline{(2)}$$

Damit folgt weiter:



$$\begin{aligned}
 X_{k+1} - X^* &= X_k - Jf(X_k)^{-1} f(X_k) - X^* \\
 &= -Jf(X_k)^{-1} (f(X_k) - f(X^*)) + (X_k - X^*) \\
 &= Jf(X_k)^{-1} \{ f(X^*) - f(X_k) - Jf(X_k)(X^* - X_k) \}
 \end{aligned}$$

Ist daher  $0 < \|X_k - X^*\| < r = \frac{2}{L}$ , so folgt mit (2):

$$\|X_{k+1} - X^*\| \leq \frac{1}{2} \|X_k - X^*\|^2 < \|X_k - X^*\| < r \quad \underline{(3)}$$

Die Folge  $(X_k)$  verläuft damit ganz in  $K_r(X^*)$ ,  $\|X_k - X^*\|$  ist streng monoton fallend und nicht-negativ, also Kvgz. Sei  $d := \lim_{k \rightarrow \infty} \|X_k - X^*\| \geq 0$ .

Dann folgt mit (3):

$$0 \leq d < r \quad \& \quad d \leq \frac{1}{2} d^2$$

und damit  $d=0$ , d.h.  $\lim_{k \rightarrow \infty} X_k = X^*$ .

Aus (3) folgt zugleich die quadratische Kvgz.

Eindeutigkeit: Wäre  $\tilde{x} \in K_r(X^*)$  weitere

Nullstelle, so folgt:

$$\begin{aligned}
 \|\tilde{x} - X^*\| &= \|Jf(X^*)^{-1} [f(\tilde{x}) - f(X^*) - Jf(X^*)(\tilde{x} - X^*)]\| \\
 &\stackrel{(2)}{\leq} \frac{1}{2} \|\tilde{x} - X^*\|^2 < \|\tilde{x} - X^*\| \\
 &\qquad \qquad \qquad \text{Widerspruch! } \blacktriangle
 \end{aligned}$$

# Gedämpftes Newton-Verfahren

Zur Vergrößerung des Einzugsbereichs (Konvergenzbereich) wird die Newton-Korrektur  $\Delta x_k = -Jf(x_k)^{-1} f(x_k)$  mit einem Dämpfungsfaktor  $\lambda_k \in ]0, 1]$  reduziert.

$\lambda_k$  wird so gewählt, dass eine Testfunktion  $T_k(x)$  in jedem Iterationsschritt fällt.

(i) Klassische Testfunktion:  $T_k(x) := \|f(x)\|_2$

(ii) Skalierte Testfunktion:

$$T_k(x) := \|Jf(x_k)^{-1} f(x)\|_2$$

Die skalierte Testfunktion hat den Vorteil, invariant gegenüber Skalierungen

$$f(x) \longrightarrow g(x) = S f(x), \quad S \in \mathbb{R}^{(n,n)} \text{ regulär}$$

Für die Testfunktion (ii) gilt:

$$T_k(x_k) = \|\Delta x_k\|_2$$

$$T_k(x_{k+1}) = \|\overline{\Delta x_{k+1}}\|_2$$

wobei  $\overline{\Delta x_{k+1}} = -Jf(x_k)^{-1} f(x_{k+1})$  die vereinfachte Newton-Korrektur bezeichnet.



Da für die Berechnung von  $\Delta X_k$  bereits eine LR-Zerlegung von  $Jf(x_k)$  vorliegt, lässt sich  $\overline{\Delta X_{k+1}}$  mittels Vorwärts- / Rückwärtssubst. berechnen.

Die Berechnung von  $\lambda_k$  erfolgt zumeist mit einer einfachen Halbierungsstrategie. Um die quadratische Konvergenz zu sichern, ist darauf zu achten, dass in der Nähe von  $x^*$  tatsächlich  $\lambda_k = 1$  gewählt wird.

## Algorithmus (9.23)

Start :  $x_0 \in D$ ,  $\lambda_{-1} = 1$ ,  $\lambda_{\min} = 10^{-3}$

Iteration : Für  $k = 0, 1, 2, \dots$

(1) Löse  $Jf(x_k) \Delta X_k = -f(x_k)$ ;  $\lambda_k := \lambda_{k-1}$

(2) Löse  $Jf(x_k) \overline{\Delta X_{k+1}} = -f(x_k + \lambda_k \Delta X_k)$

(3) Falls  $\|\overline{\Delta X_{k+1}}\|_2 > (1 - \lambda_k/2) \|\Delta X_k\|_2$ :

$$\lambda_k = \lambda_k/2$$

Falls  $\lambda_k < \lambda_{\min}$  : Abbruch!

Gehe zu (2)

Sonst :  $x_{k+1} = x_k + \lambda \Delta X_k$

Falls  $(\lambda_k = \lambda_{k-1})$  :  $\lambda_k = \min(2\lambda_k, 1)$

Abbruch, falls  $\|\Delta X_k\|_2$  klein!



## Anmerkung:

a) Die Existenz einer Schrittlänge  $\lambda > 0$  mit  $T_k(x_k + \lambda \Delta x_k) < T_k(x_k)$  kann für beide Testfunktionen unter schwachen Voraussetzungen gezeigt werden (Übungsaufgabe!).

b) Anstelle der exakten Jacobi-Matrix genügt es i. Allg. mit einer Näherung zu arbeiten (Numerische Differentiation, Broyden-Approximationen). Allerdings verliert man dann ev. die quadr. Konvergenz.

## 9.5 Nichtlineare Ausgleichsprobleme

Wir untersuchen in diesem Abschnitt nicht-lineare Ausgleichsaufgaben, vgl. auch Abschnitt 8.1:

Minimiere  $g(x) := \|F(x)\|_2$ ,  $x \in \mathbb{R}^n$  (9.24)

mit

$$F(x) := \begin{bmatrix} \phi(t_1; x_1, \dots, x_n) - y_1 \\ \vdots \\ \phi(t_m; x_1, \dots, x_n) - y_m \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^m$$

$\Phi(t; x)$  : Modellfunktion

$y_j$  : Messdaten,  $j=1, \dots, m$ ,  $m \gg n$

Wir nehmen an, dass die Modellfunktion – und damit auch  $F$  – nichtlinear in den Modellparametern  $x_1, \dots, x_n$  ist.

Zur Gewinnung eines numerischen Verfahrens übertragen wir die Grundidee des Newton-Verfahrens :

„ Linearisierung der Zielfunktion um eine aktuelle Iterierte  $x_k$  „

Wir linearisieren hier  $F(x)$ , d.h. es wird  
„ unter der Norm“ linearisiert !

(eine andere Möglichkeit wäre,  $g(x)$  zu linearisieren)

Man erhält damit das so genannte

Gauß-Newton-Verfahren (9.25) :

(1.)  $x_k \in \mathbb{R}^n$  sei aktuelle Näherung

(2.) Bestimme  $\Delta x_k \in \mathbb{R}^n$  mit

$\| F(x_k) + JF(x_k) \Delta x_k \|_2$  minimal !

(Lineares Ausgleichsproblem !)



(3) Bestimme Schrittlänge  $\lambda_k \in ]0,1]$ , so dass eine Testfunktion fällt:

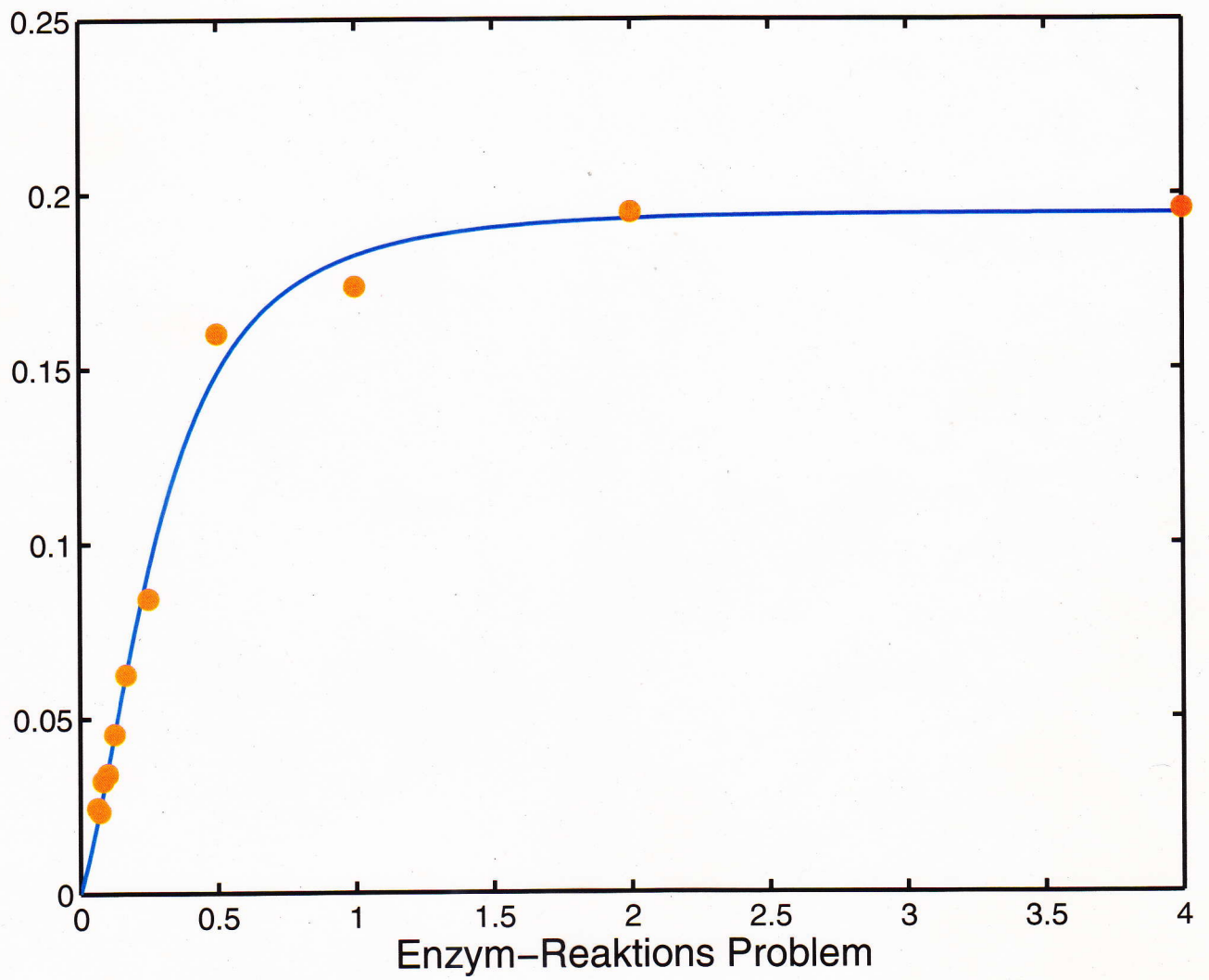
$$T_k(x_k + \lambda_k \Delta x_k) < T_k(x_k)$$

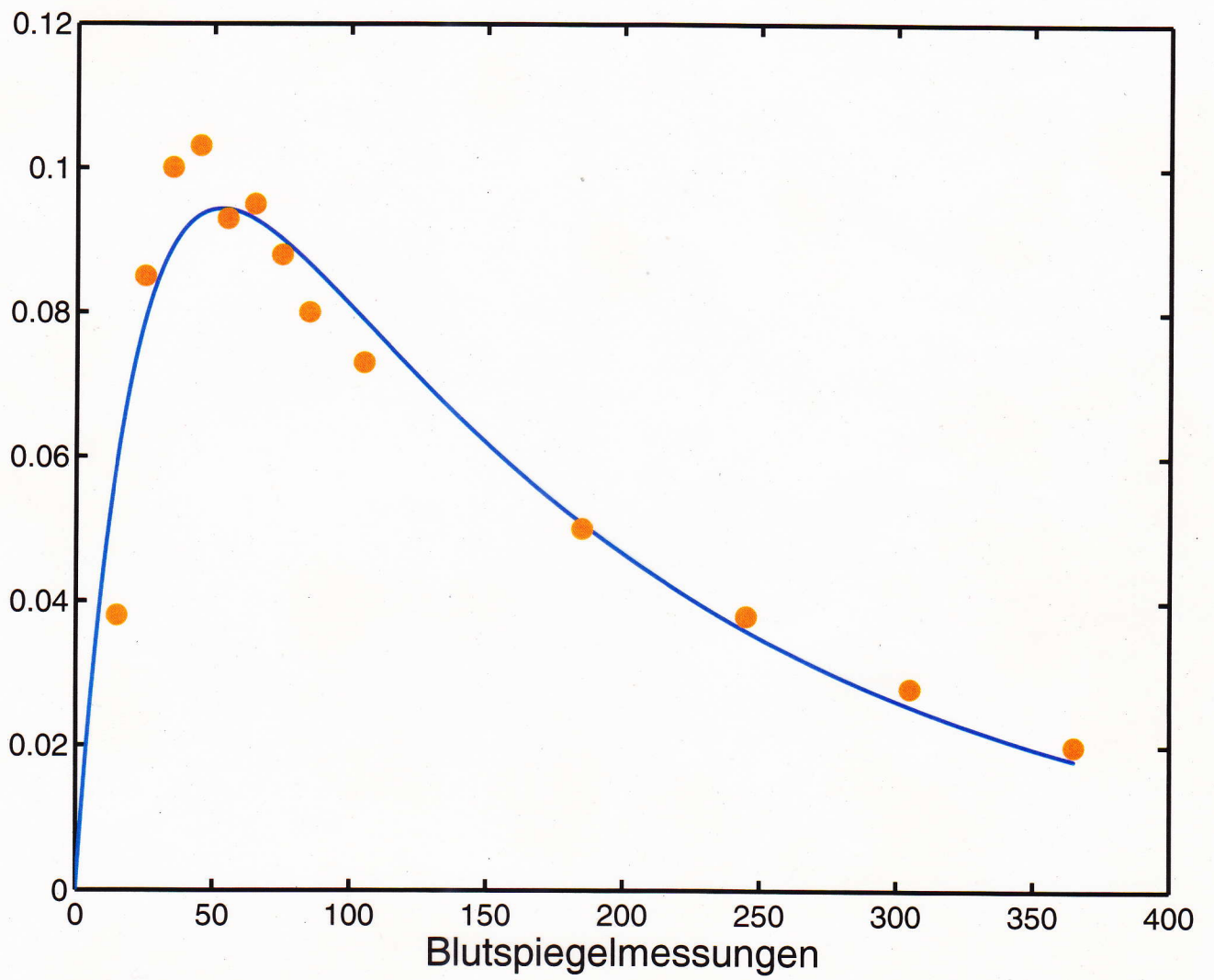
(4)  $x_{k+1} = x_k + \lambda_k \Delta x_k$ ,  
 $k := k+1$ , gehe zu (1).

### Anmerkungen:

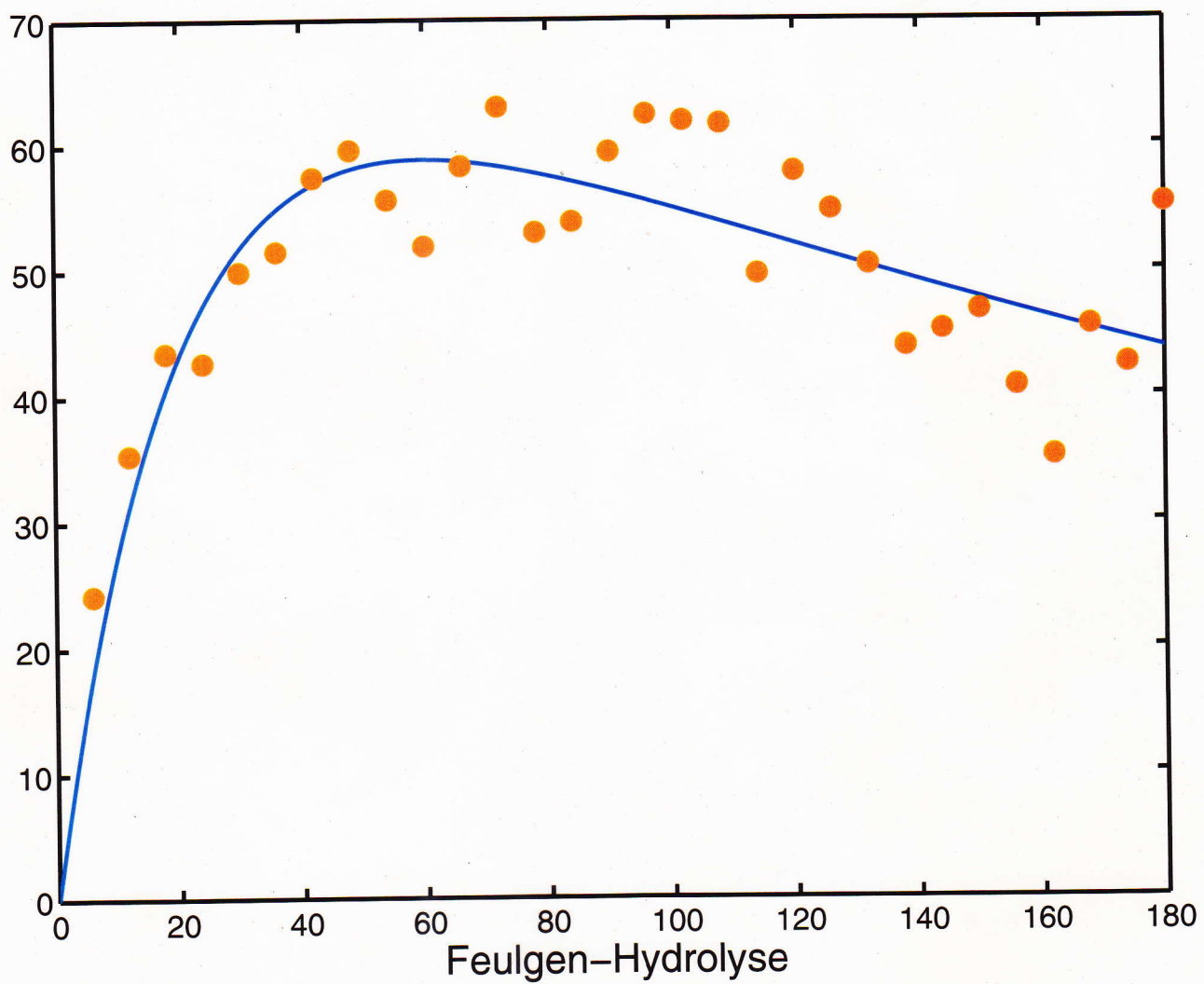
- a) Als Testfunktion lässt sich  $T_k(x) = g(x)$  selbst verwenden.
- b) Schrittlänge  $\lambda_k = 1$  in der Konvergenzphase
- c) Unter geeigneten Vorausss. lässt sich die lokale Kvgt. des Verfahrens zeigen.  
 I. Allg. hat man jedoch nur lineare Konvergenz ( $\rightarrow$  Deuffhard, Hohmann, Satz 4.14).











## 9.6 Fortsetzungsmethoden

Wir betrachten ein parameterabhängiges, nichtlineares Gleichungssystem

$$f(x, \lambda) = 0$$

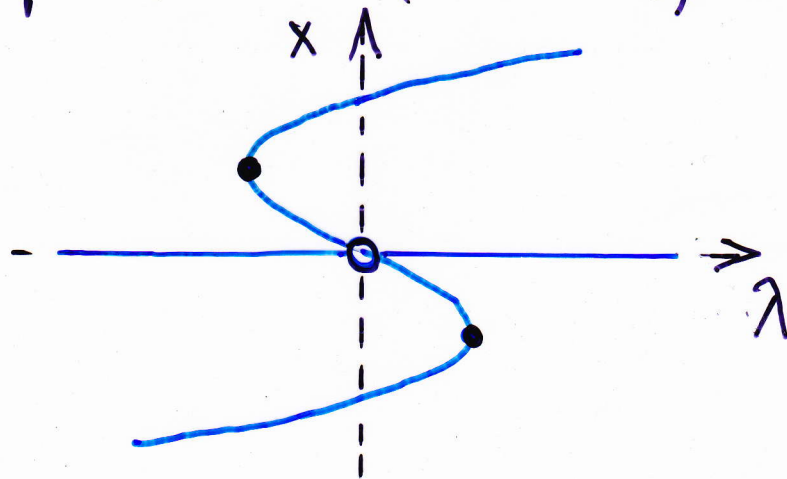
mit  $f: D \times \mathbb{R}^1 \rightarrow \mathbb{R}^n$   $C^2$ -Funktion,  
 $D \subset \mathbb{R}^n$  offen u. konvex,

Zu bestimmen ist die Lösungsmenge

$$S = \{(x, \lambda) : x \in D, \lambda \in [\lambda_{\min}, \lambda_{\max}], f(x, \lambda) = 0\}$$

### Beispiel (9.26)

$$f(x, \lambda) = x(x^3 - x - \lambda) = 0$$



Die Lösungsmenge besteht aus zwei Zweigen.

Dabei ist / sind

o ein Verzweigungspunkt, charakterisiert durch

$$f = 0, \quad Jf(x, \lambda) = (4x^3 - 2x - \lambda, x) = 0$$



- : Umkehrpunkte, charakterisiert durch

$$f=0, f_x=0, f_\lambda \neq 0$$

Für die numerische Bestimmung der Lösungsmenge stellen Verzweigungspunkte und Umkehrpunkte besondere Schwierigkeiten dar.

Wir schließen diese im Folgenden aus und fordern:

$$\forall (x, \lambda) \in S : f_x(x, \lambda) \in \mathbb{R}^{(n, n)} \text{ regulär} \quad (9.27)$$

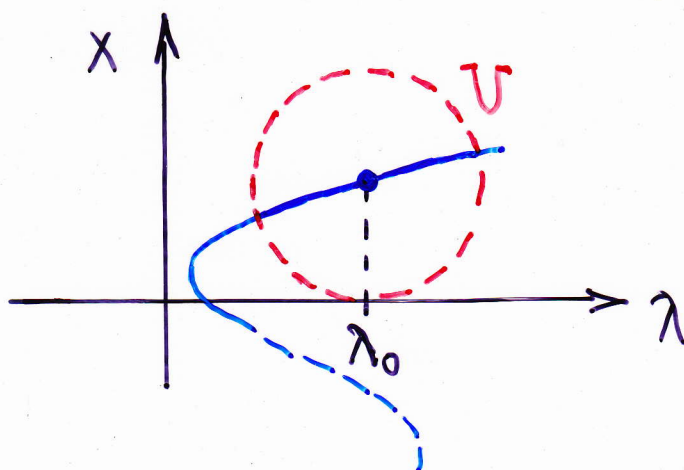
Satz über implizite Funktionen  $\Rightarrow$

$x$  lässt sich lokal bzgl.  $\lambda$  parametrisieren

D.h.:  $\forall (x_0, \lambda_0) \in S^0 \exists U$  Umgeb. von  $(x_0, \lambda_0)$

$\exists x: ]\lambda_0 - \varepsilon, \lambda_0 + \varepsilon[ \rightarrow D$   $C^1$ -Fkt. :  $x(\lambda_0) = x_0 \wedge$

$$S \cap U = \{ (x(\lambda), \lambda) \mid \lambda_0 - \varepsilon < \lambda < \lambda_0 + \varepsilon \}$$



Im Folgenden soll ein solcher glatter Lösungspfad

$$x(\lambda), \quad \lambda_{\min} \leq \lambda \leq \lambda_{\max}$$

numerisch berechnet werden.

Dies geschieht mittels so genannter Fortsetzungsmethoden oder Homotopieverfahren.

Hierbei werden aus einer Lösung  $x^j = x(\lambda^j)$  eine solche zu einem benachbarten  $\lambda_{j+1}$  berechnet. Ausgangspunkt ist z.B. die Lösung  $x^0 = x(\lambda^0)$ .

Die „Homotopiekette“

$$\lambda_{\min} = \lambda^0 < \lambda^1 < \dots < \lambda^m = \lambda_{\max}$$

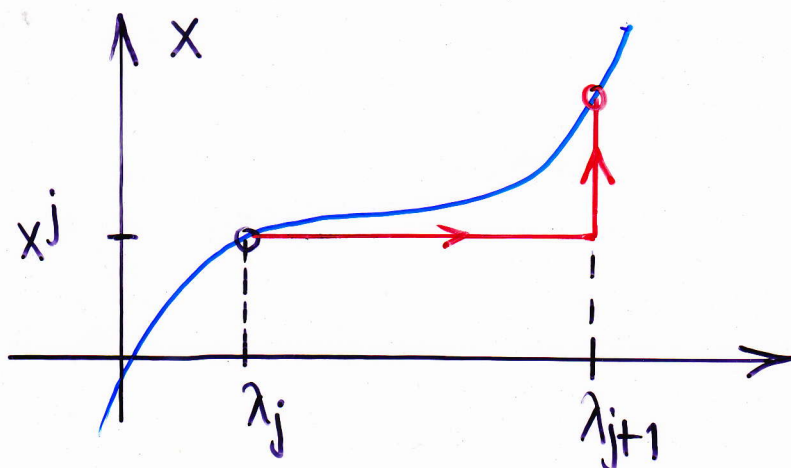
soll dabei ebenfalls „automatisch“ bestimmt werden.

### Klassische Fortsetzungsmethode

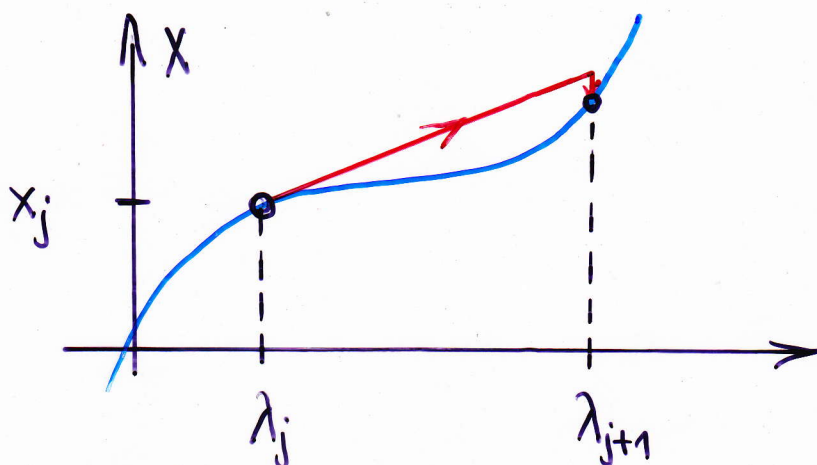
Man bestimmt  $x^{j+1}$  durch Anwendung eines Nullstellenverfahrens (z.B. Newton-Verfahren) auf das nichtlineare Gleichungssystem  $f(x, \lambda_{j+1}) = 0$ ; Startvektor ist  $x^j$

$$x_0 := x^j ; \quad x_{k+1} = \phi(x_k, \lambda_{j+1}), \quad k=0,1,2,\dots$$





## Tangentiale Fortsetzungsmethode



Implizites Differenzieren von  $f(x(\lambda), \lambda) = 0$   
 $\Rightarrow f_x(x^j, \lambda_j) \dot{x}(\lambda_j) = -f_\lambda(x^j, \lambda_j) \quad (9.28)$

Dies ist ein lin. Gleichungssystem für  $\dot{x}(t_j)$ !

a) Löse (9.28)

b)  $x_0 := x^j + (\lambda_{j+1} - \lambda_j) \dot{x}(\lambda_j)$

c) Iteration:  $x_{k+1} = \phi(x_k, \lambda_{j+1}), k=0,1,2..$

## Homotopieschrittweite

Verwendet man als Nullstellenverfahren das ungedämpfte Newton-Verfahren, so kann der Monotonietest (vgl. (9.23))

$$\|\overline{\Delta X}_{k+1}\| \leq \frac{1}{2} \|\Delta X_k\| \quad (9.29)$$

dazu verwenden, die Homotopieschrittweite  $(\lambda_{j+1} - \lambda_j)$  zu steuern.

Mit einem Faktor  $\beta \in ]0, 1[$  (etwa  $\beta = \frac{1}{2}$ ) geht man folgendermaßen vor:

a) Falls (9.29) verletzt ist, setze man

$$\lambda_{j+1}^{\text{neu}} = \lambda_j + \beta (\lambda_{j+1} - \lambda_j)$$

und starte die Iteration neu

b) gilt im ersten Iterationsschritt bereits  $\|\overline{\Delta X}_1\| \leq \frac{1}{8} \|\Delta X_0\|$ ,  
so vergrößere man die Homotopieschrittweite im nächsten Homotopieschritt:

$$\lambda_{j+2} - \lambda_{j+1} = \frac{1}{\beta} (\lambda_{j+1} - \lambda_j).$$