**Lösung** zu Blatt 5Abgabe bis 22. Mai, 23:59

**Nullstellensuche im $\mathbb{R}^n$** Thema der nächsten beiden Wochen ist die Nullstellensuche im $\mathbb{R}^n$. Dabei meinen wir Funktionen $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ und nicht skalar-wertige Funktionen $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$. Vielleicht das größte Problem ist der Mangel an Anschauung. Es ist sehr schwer, sich ein Bild selbst einer einfachen Funktion wie

$$f(x, y) = \begin{pmatrix} x^3 y - x \sin(y)^2 + 4 \\ 4 - \exp(x + y) \end{pmatrix}$$

zu machen. Das Nullstellenproblem ist aber einfach definiert: wir suchen einen Punkt $z \in \mathbb{R}^n$ (hier $z \in \mathbb{R}^2$) mit $f(z) = 0$.
Im $\mathbb{R}$ war die Interpretation des Newton-Verfahrens einfach: In jedem Schritt bilden wir die Tangente zur aktuellen Iteration $x^{(k)}$ und bestimmen den jeweils nächsten Punkt als Nullstelle $x^{(k+1)}$ dieser Tangente. Bei Funktionen $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ ist der Begriff der Tangente nicht sinnvoll definiert und wir benötigen also eine alternative Herleitung. Hier mache man sich nochmal klar, dass es uns nicht um Funktionen $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ geht, wo die Tangentialebene (oder Verallgemeinerungen für $n > 2$) sinnvoll definiert ist.

**Vorbereitung: Newton-Verfahren im $\mathbb{R}$** Man mache sich noch einmal mit dem Newton-Verfahren im $\mathbb{R}$ und dem einfachen Beweis hierzu vertraut, Satz im 6.10 Buch. Eigentlich sollte dies bekannt sein :-)

**Newton-Verfahren im $\mathbb{R}^n$** Man lese Abschnitt *6.7.1 Newton-Verfahren im $\mathbb{R}^n$* im Buch.
Der Konvergenzbeweis nach *Kantorovich* ist einer der klassischen Sätze der Analysis. Der Beweis ist länglich und auch aufwändig, aber ein wichtiges Resultat und sollte ausführlich studiert werden. Die Beweisidee hat einige wichtige Unterschiede zum Beweis von Satz 6.10. Der Unterschied liegt jedoch nicht in der Dimension. Satz 6.45 (Kantorovich) kann auf den eindimensionalen Fall angewendet werden und Satz 6.10 kann auf Funktionen im $\mathbb{R}^n$ erweitert werden. Die Unterschiede liegen hingegen in den Voraussetzungen, die bei Kantorovich schwächer sind und im Resultat, welches bei Kantorovich (leicht) stärker ist.
Man beantworte die folgenden Fragen:

1. Was ist die Konstruktionsidee vom Newton-Verfahren im $\mathbb{R}^n$?

---

Die Funktion $f(x)$ wird um die letzte Iteration herum $x_k$ mit der linearen Taylor-Approximation genähert, d.h.

$$f(x^k + w^k) = f(x^k) + Df(x^k)w^k + \mathcal{O}(|w^k|^2).$$

Das quadratische Restglied wird vernachlässigt und die nächste Iteration wird als NS der linearen Approximation gesucht. Hierzu muss ein LGS gelöst werden

$$Df(x^k)w^k = -f(x^k)$$

2. In welcher Hinsicht ist die Voraussetzung von Newton-Kantorovich schwächer als die von Satz 6.10? In welcher Hinsicht ist das Resultat stärker?

---

Bei Kantorovich muss $f$ nur einmal stetig diffbar mit Lipschitz-stetiger Ableitung sein. Der klassische Beweis erfordert 2-mal stetige Diff.barkeit. Kantorovich liefert unter den Bedingungen die Existenz eine NS, der klassische Beweis setzt diese voraus.

3. Warum benötigt der Beweis die Konvexität des Definitionsbereichs $D$?

---

Z.B. für den Trick, Funktionsunterschiede über den Hauptsatz der Differential- und Integralrechnung darzustellen, d.h.

$$f(x) - f(y) = \int_0^1 \frac{d}{ds} f(y + s(x - y))ds$$

hierzu muss die "Linie" von $x$ nach $y$ im Gebiet liegen. Auf die Anwendung des Banachschen Fixpunktsatzes erfordert die Konvexität.

4. Wieso bedeutet die Fehlerabschätzung am Ende des Satzes quadratische Konvergenz? Können wir hieraus eine Abschätzung der Art

$$\|x^{(k+1)} - z\| \leqslant c\|x^{(k)} - z\|^2$$

ableiten?

---

Die Abschätzung ist $\|x^{(k)} - z\| \leqslant 2\alpha q^{2^k-1}$. Damit ergibt sich

$$\|x^{(k-1)} - z\|^2 \leqslant (2\alpha)^2(q^{2^{k-1}-1})^2 = 4\alpha^2 q^{-1} q^{2^k-1}$$

Somit haben die Folgen $\|x^{(k)} - z\|$ und $\|x^{(k-1)} - z\|^2$ die selbe Majorante (mit einer anderen Konstanten). Somit existiert ein $c > 0$, sodass $\|x^{(k)} - z\| \leqslant c\|x^{(k-1)} - z\|^2$. Hiermit sehen wir die quadratische Konvergenz.

5. Wieso müssen wir in Schritt $(v)$ noch einmal die Eindeutigkeit der Nullstelle beweisen? Es ist doch klar, dass eine konvergente Folge nur einen Grenzwert hat?

---

Wir konstruieren eine spezielle Folge, deren Konvergenz wir nachweisen. Hieraus können wir folgern, dass es mindestens eine Nullstelle gibt. Aber es könnte ja noch eine weitere Folge basierend auf einer anderen Methode geben, die gegen eine andere NS konvergiert. Die Eindeutigkeit kann nicht konstruktiv gezeigt werden.

6. Worin besteht der wesentliche Aufwand in jedem Schritt des Verfahrens?

---

Jeweils im Ausrechnung der Jakobi-Matrix und insbesondere im Lösen des LGS. Z.b. bei Gauss-Elimination $O(n^3)$.

*Bis Sonntag, 17. Mai folgt auf der Homepage noch ein kurzes Videos mit Details zum Beweis.*

**Analyse des Newton-Verfahrens** Das Newton-Verfahren im $\mathbb{R}^n$ hat die gleichen Eigenschaften wie das Newton-Verfahren im $\mathbb{R}$: wenn die Iteration im Einzugsbereich der quadratischen Konvergenz ist, dann ist die Konvergenz extrem schnell. Wenn wir jedoch noch nicht nahe genug an der Nullstelle sind, dann konvergiert das Verfahren oft gar nicht. Unter dem Stichwort *Globalisierung der Konvergenz* beschreibt man Methoden, um den Konvergenzbereich zu vergrößern. Im besten Fall, dann spricht man von *globaler Konvergenz*, konvergiert das Verfahren für beliebige Startwerte.
Man lese Abschnitt *6.7.2 Globalisierung des Newton-Verfahrens*. Wichtig ist hier nur der Begriff des *gedämpften Newton-Verfahrens* und die übliche Realisierung der Dämpfung, das *Line-Search Verfahren*. Der Beweis zu Satz 6.49 ist wieder recht aufwending und er greift viele Punkte aus dem Beweis zu 6.45 auf. Es ist nicht notwendig, diesn Beweis entsprechend genau durchzuarbeiten.
Man gebe kurze Antworten:

1. Was heißt es, das Newton-Verfahren zu dämpfen. Wie sieht die Iterationsvorschrift des gedämpften Newton-Verfahrens aus?

---

Die Schrittweite wird verkürzt. D.h. wir iterieren

$$Df(x^k)w = -f(x^k), \quad x^{k+1} = x^k + \omega w,$$

mit einem $\omega \in [0,1]$.

2. Warum ist das Line-Search Verfahren sinnvoll? D.h., warum startet man bei $\omega = 1$ und macht den Dämpfungsparameter schrittweise kleiner?

---

Falls möglich wollen wie die schnelle quadratische Konvergenz des Newton-Verfahrens erreichen. Dies ist nur für $\omega = 1$ möglich. Daher ist es sinnvoll, zunächst zu prüfen, ob das ungedämpfte Verfahren konvergiert. Falls keine Konvergenz vorliegt dann haben wir für gewisse Fälle nachgewiesen, dass wir durch Dämpfung Konvergenz erzwingen können. Das schrittweise Verringern von $\omega$ ist sinnvoll, da für $\omega = 0$ einfach $x^{k+1} = x^k$ gilt. Das ist zwar keine Konvergenz, aber so wird im Extremfall immerhin Divergenz verhindert.

3. Angenommen, $f$ habe eine Nullstelle $z$ und hier sei $Df(z)$ regulär und Liptschitz-stetig. Weiter angenommen, durch Line-Search kann für beliebigen Startwert konvergenz gegen $z$ erreicht werden. Wird dann irgendwann definitiv quadratische Konvergenz erreicht? Warum?

---

Ja. Denn $x^k$ konvergiert gegen $z$. Wenn wir nun jedes $x^k$ als neuen Startwert im newton-Verfahren betrachten bedeutet dies, dass $\alpha$ aus (6.27) schrittweise kleiner wird. Denn es muss ja $\|f(x^k)\| \to 0$ gelten, wobei $\|Df(x^{(k)})^{-1}\| \leqslant \beta$ auf dem ganzen Gebiet beschränkt wird. Also muss $\alpha \to 0$ gelten und somit ist die Bedingung $q < 1/2$ irgendwann erfüllt und quadratische Konvergenz liegt vor.

## Übungsaufgaben

**Aufgabe 5.1**

Es sei $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ eine symmetrische Matrix. Wir formulieren die Suche nach (reellen) Eigenwert $\lambda \in \mathbb{R}$ und Eigenvektor $w \in \mathbb{R}^n$ als mehrdimensionales Nullstellenproblem

$$f(x,s) = \begin{pmatrix} Ax - sx \\ \|x\|^2 - 1 \end{pmatrix} \overset{!}{=} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

**a**) Man spezifiziere für die Matrix

$$A = \begin{pmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 2 \end{pmatrix}$$

die Funktion $f : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}^3$ und gebe ihre Jakobimatrix $Df$ an. Weiter formuliere man die Newton-Iteration zur Suche einer Nullstelle.

**b**) Man berechne die Eigenwerte und Eigenvektoren der Matrix.

**c**) Man führe für die Startwerte $(x^{(0)}, \lambda^{(0)}) = (0.5, 1; 2)$ drei Schritte der Newton-Iteration durch. Gegen welchen Eigenwert konvergiert das Verfahren? Können Sie bereits quadratische Konvergenz ablesen?

---

**a**) Wir suchen $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \lambda) \in \mathbb{R}^3$ als Nullstelle von

$$F(\mathbf{x}) = F(x_1, x_2, \lambda) = \begin{pmatrix} 2x_1 - x_2 - \lambda x_1 \\ -x_1 + 2x_2 - \lambda x_2 \\ x_1^2 + x_2^2 - 1 \end{pmatrix}$$

und suchen davon die nullstelle. Die Jacobi-matrix ist

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

Dann ist die Iteration

$$\begin{pmatrix} 2-\lambda^k & -1 & -x_1^k \\ -1 & 2-\lambda^k & -x_2^k \\ 2x_1^k & 2x_2^k & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1^{k+1} - x_1^k \\ x_2^{k+1} - x_2^k \\ \lambda^{k+1} - \lambda^k \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} 2x_1^k - x_2^k - \lambda x_1^k \\ -x_1^k + 2x_2^k - \lambda x_2^k \\ (x_1^k)^2 + (x_2^k)^2 - 1 \end{pmatrix}$$

(muss man nun nicht so genau hinschreiben.

**b**) Die Eigenwerte sind 1 und 3 mit

$$\begin{pmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = 1 \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix} = 3 \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

**c)**. Es ist

$$x^0 = \begin{pmatrix} 0.5 \\ 1 \\ 2. \end{pmatrix}$$

Dann ergibt sich:

$$x^1 = \begin{pmatrix} 1.125 \\ 0.5626 \\ 0.875 \end{pmatrix}$$

und

$$x^2 \approx \begin{pmatrix} 0.775 \\ 0.745 \\ 0.988 \end{pmatrix}$$

$$x^2 \approx \begin{pmatrix} 0.709 \\ 0.709 \\ 0.999 \end{pmatrix}$$

Konvergiert gegen den Eigenwert $\lambda = 1$ mit dem normierten Eigenvektor $1/\sqrt{2}(1,1)^\mathsf{T}$. Fehler:

$$\|x - x^0\| \approx 1.06, \quad \|x - x^1\| \approx 0.46, \quad \|x - x^2\| \approx 0.08, \quad \|x - x^3\| \approx 0.0029$$

Verfahren konvergiert quadratisch, etwa wie

$$\|x - x^{k+1}\|^2 \leqslant 2.2\|x - x^k\|^2$$

**Programmieraufgabe 5.2**

Wir betrachten das Newton-Verfahren zur Suche der Extremstellen der Funktion

$$g(x, y) = \sqrt{\epsilon + \frac{x^2}{2} + y^2 - xy}$$

mit einem $\epsilon \in \mathbb{R}$ bei $\epsilon > 0$. Wir suchen also Nullstellen des Gradienten, d.h.

$$f(x) := \operatorname{grad} g(x) = \frac{1}{2g(x, y)} \begin{pmatrix} x - y \\ -x + 2y \end{pmatrix} \stackrel{!}{=} 0$$

**a**) Man implementiere Funktionen zur Auswertung von $g(x)$, von $f(x)$ sowie von $Df(x)$, also der Jakobimatrix von $f(x)$. Bei $\epsilon = 0.1$ ist für $x = (0.5, -0.25)$ ist das richtige Ergebnis:

```
eps   =  0.1
x     = [-0.25  0.5 ]
g(x)  =  0.7115124735378854
f(x)  = [-0.52704628  0.87841046]
Df(x) = [[ 0.31232372 -0.05205395]
         [-0.05205395  0.32099938]]
```

**b**) Man implementiere das Newton-Verfahren und teste das Verfahren für Startwert $(2, 1)$ bei $\epsilon = 10$, $\epsilon = 1$, $\epsilon = 0.1$. Das Newton-Verfahren soll abgebrochen werden, wenn

- die Toleranz $\|f(x)\| < 10^{-9}$ erreicht ist,
- die Iterationsanzahl $10$ Schritten übersteigt,
- oder das Verfahren divergiert, z.B. wenn $\|x\| > 1000$ gilt

Man gebe in jedem Schritt das Residuum aus.
*Hinweis: die Invertierung der Jakobi-Matrix kann mit dem* `numpy`*-Befehl* `np.linalg.inv(Df)` *erfolgen. D.h. das Lösen von $Ax = b$ erfolgt einfach mit* `x=np.dot(np.linalg.inv(A),b)`.

**c**) (**Zusatz**) Implementieren Sie die Line-Search Methode. Dämpfen Sie mit $\omega = 2^{-k}$ für $k = 0, 1, \ldots$. Falls für $k = 5$ das Line-Search Kriterium nicht erreicht wird, so fahren Sie dennoch weiter mit der Konvergenz. Dokumentieren Sie das Konvergenzverhalten für Testfälle aus Aufgabe **b**).
*Hinweis: Die Funktion ist eigentlich sehr günstig. Die Jacobi-Matrix ist für alle $x, y$ und $\epsilon > 0$ positiv definit. Das Newton-Vefahren konvergiert daher bei guter Dämpfung immer!*

---

Abgabe per Mail an Henry von Wahl (henry.vonwahl@ovgu.de). Abgabe der Kurzfragen in 2er Gruppen, der Übungsaufgaben in den 5er Gruppen. Die theoretische Gruppenaufgabe ist freiwillig.