Universität Marburg **Wintersemester 2016/17**
Fachbereich Mathematik u. Informatik
Prof. S. Dahlke, Prof. G. Pfander

Praktikum zur Numerik

1 Adaptive Polynominterpolation
2 Regression Bruttowertschöpfung mit QR
3 Regression bei Kollinearität (Rangdefekt)
4 Unterbestimmte dünne Gleichungssysteme
5 Iterative Regularisierung
6 Sekantenverfahren+ inverse Interpolation
7 Nichtlineare Systeme: Werner vs Newton
8 Quasi-Newtonverfahren
9 Sekantenverfahren

Aufgabe 1 (Adaptive Polynominterpolation): Die Möglichkeit bei der Newton-Darstellung schrittweise neue Interpolationsknoten hinzunehmen zu können, läßt sich zu einem einfachen adaptiven Verfahren zur Approximation einer gegebenen Funktion $f \in C[a,b]$ ausbauen. Dazu startet man mit einem kleinen Gitter, etwa $x_0 = a$, $x_1 = b$ für $n = 1$ und wählt als nächste Stützstelle eine Stelle, wo der Fehler des aktuellen Polynoms nahezu maximal ist. Auf einem feineren Testgitter $\{\xi_j\}$ bestimmt man dazu bei Polynomgrad n den Knoten x_{n+1} so, dass

$$|p_n(x_{n+1}) - f(x_{n+1})| = \max\{|p_n(\xi_j) - f(\xi_j)| : \xi_j = a + \frac{(b-a)j}{N},\ j = 0, \ldots, N\}$$

gilt (etwa mit $N = 8n$). Beim nächsten Polynom p_{n+1} verschwindet dann der Fehler dort. Testen Sie das Verfahren anhand der Beispielfunktionen

$$\frac{1}{1+25x^2}, \quad e^{-9x^2}, \quad \sqrt{1+x^2}, \qquad \text{mit } x \in [-1,1],$$

und protokollieren Sie bei doppelter Genauigkeit den jeweils kleinsten erreichbaren Maximalfehler, sowie den zugehörigen Polynomgrad. Vergleichen Sie diese Fehler mit denen der Tschebyscheff-Interpolation gleichen Grades und stellen sie beide in Abhängigkeit von n in einem logarithmischen Diagramm dar. Zur Präsentation der Arbeitsweise des Verfahrens bietet sich auch die graphische Darstellung einiger Fehlergraphen $p_n - f$ an.

Literatur: Stoer/Bulirsch, Numerische Mathematik 1, Springer.

Aufgabe 2 (Bruttowertschöpfung/QR): Bei Meßgrößen y, deren Wert von vielen Variablen abhängt, läßt sich der Einfluß der einzelnen Variablen $w_2, \ldots, w_n \in \mathbb{R}$ durch ein affin lineares Modell

$$y(w_2, \ldots, w_n) = x_1 + x_2 w_2 + \ldots + x_n w_n$$

schätzen (d.h. $w_1 \equiv 1$), in dem die x_i die unbekannten Koeffizienten sind. Dazu zieht man $m \geq n$ Messungen $(y_k, w_{k2}, \ldots, w_{kn})$, $k = 1, \ldots, m$, aller Größen heran und minimiert den Defekt

$$\sum_{k=1}^{m} (y_k - x_1 - w_{k2}x_2 - \ldots - w_{kn}x_n)^2.$$

Man löst also das Kleinste-Quadrate-Problem

$$\min\{\|Ax - b\|_2^2 : x \in \mathbb{R}^n\} \quad \text{mit} \quad A = \Big(w_{ij}\Big)_{i,j=1}^{m,n}, \; w_{i1} \equiv 1.$$

Programmieren Sie dazu die Methode der QR-Zerlegung mit Householder-Spiegelungen und bestimmen Sie den Einfluß der verschiedenen Wirtschaftsbereiche der Bundesrepublik auf die Bruttowertschöpfung WSb95 der Jahre 2000-2004.

Datentabelle:

Quartal	WSb95	LdFF	ProdG	Bau	HandGV	FinVerm	DienstÖP
2000.1	433.63	5.27	112.21	23.51	78.62	139.09	97.85
2000.2	443.76	5.84	114.00	24.75	83.64	140.27	98.17
2000.3	453.75	5.78	115.60	26.13	85.56	142.41	101.59
2000.4	455.05	5.65	121.49	23.17	85.63	140.46	108.63
2001.1	441.67	5.57	117.31	21.45	82.23	141.85	99.56
2001.2	448.35	6.20	116.71	23.42	86.99	142.77	99.48
2001.3	457.57	6.01	116.32	25.27	89.11	143.89	103.16
2001.4	458.27	5.79	120.03	22.72	89.48	147.48	111.84
2002.1	437.00	5.44	113.20	20.53	83.57	145.64	103.29
2002.2	452.15	5.76	119.24	22.73	88.54	146.93	103.49
2002.3	462.19	5.51	120.46	24.46	90.97	150.17	106.26
2002.4	460.00	5.37	124.13	21.31	90.47	149.02	113.76
2003.1	439.71	5.29	118.21	18.44	83.75	147.71	104.07
2003.2	448.87	5.75	118.02	21.37	88.98	149.13	103.91
2003.3	462.61	5.54	120.15	23.57	92.28	154.23	108.36
2003.4	461.55	5.46	126.32	20.63	91.50	152.46	113.64
2004.1	446.06	5.48	121.90	18.63	86.27	152.67	104.81
2004.2	461.15	5.95	126.25	21.20	92.18	155.47	105.56

Die in der Datentabelle verwendeten Größen bedeuten dabei:

y	WSb95	Bruttowertschöpfung in Preisen von 95 (bereinigt)
w_2	LdFF	Land- und Forstwirtschaft, Fischerei
w_3	ProdG	Produzierendes Gewerbe ohne Baugewerbe
w_4	Bau	Baugewerbe
w_5	HandGV	Handel, Gastgewerbe und Verkehr
w_6	FinVerm	Finanzierung, Vermietung und Unternehmensdienstleister
w_7	DienstÖP	Öffentliche und private Dienstleister

Möglicherweise haben einzelne Variable keinen merklichen Einfluß auf die Ergebnisvariable $y = WSb95$, erkennbar an einem kleinen Betrag des zugehörigen Koeffizienten x_i. Identifizieren Sie solche Variablen anhand der ersten Lösung und wiederholen Sie die Rechnung mit entsprechend reduzierten Modellen (geht das ohne vollständige Neuberechnung der QR-Zerlegung?). Dadurch wird der Beitrag dieser Variablen im konstanten Term x_1 versteckt. Die Güte der verschiedenen Approximationen ist an den Residuen $\|Ax - b\|_2$ erkennbar.

Literatur: 1. Skript Num.1
2. Golub/vanLoan: Matrix Computations, §12.6

Aufgabe 3 (Regression bei Kollinearität (Rangdefekt)): Eine Standardmethode der statistischen Analyse von Meßgrößen y, ist der Rückschluß auf den Einfluß verschiedener Variablen $w_2, \ldots, w_n \in \mathbb{R}$ durch Schätzung eines affin linearen Modells

$$y(w_2, \ldots, w_n) = x_1 + x_2 w_2 + \ldots + x_n w_n$$

(d.h. $w_1 \equiv 1$), wobei die $x_i \in \mathbb{R}$ die unbekannten Koeffizienten dieses Modells sind. Mit m Messungen $(y_k, w_{k2}, \ldots, w_{kn})$, $k = 1, \ldots, m$, aller auftretenden Größen minimiert man den Defekt

$$\sum_{k=1}^{m} (y_k - x_1 - w_{k2}x_2 - \ldots - w_{kn}x_n)^2$$

und löst so das Kleinste-Quadrate-Problem

$$\min\{\|Ax - b\|_2^2 : x \in \mathbb{R}^n\} \quad \text{mit} \quad A = \Big(w_{ij}\Big)_{i,j=1}^{m,n},\ w_{i1} \equiv 1.$$

Selbst wenn man mehr Messungen $m > n$ als Parameter zur Verfügung hat, kann die Lösung problematisch sein, nämlich wenn verschiedene Eingabevariablen w_j miteinander gekoppelt sind. Bei einer solchen Kollinearität sind dann Spalten von A (beinahe) linear abhängig. Diese Problematik kann man mit einer *Rang-bestimmenden QR-Zerlegung* entschärfen, bei der zusätzlich zu den Householder-Spiegelungen noch eine Spalten-Pivotisierung durchgeführt wird. Wenn dabei der untere Rest-Teil des Dreieckfaktors zu kleine Einträge besitzt, vernachlässigt man diesen. Im Anschluß betrachte man zwei Alternativen zum weiteren Vorgehen:

1. die restlichen Variablen werden nicht weiter berücksichtigt,
2. mit zusätzlichen Householder-Spiegelungen von rechts berechnet man die Lösung kleinster Norm.

Damit ist auch der Fall $m < n$ handhabbar. Programmieren Sie dieses Verfahren und wenden Sie es an auf die folgenden finanzwirtschaftlichen Daten der Bundesrepublik. Dabei soll das Bruttoinlandsprodukt (BIP) durch die restlichen Daten (Spalten 16/17 und 20/21 alternativ) erklärt werden.

	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
	SEinnahm	SAusgab	BIP	Schulden	ZinsAus	NeLöhne	BrLöhne	LohnSt	Abzüge	SBArNe	SBArGe	UE+Verm
Jahr	Mill. Eu	Mill. Eu	Mill. Euro	Mill. Eur	Mill. Eu	Mrd. Eu	Mrd. Eu	Mrd. Eu	Mrd. Eu	Mrd. Eu	Mrd. Eu	Mrd. Eu
1991	678929	722762	1534.60	606597	41231	481.05	692.99	112.84	211.94	99.10	154.02	345.56
1992	750842	791541	1646.62	694938	51768	512.27	749.85	128.73	237.58	108.85	167.32	352.61
1993	778258	829188	1694.37	778871	54330	526.88	769.08	129.12	242.20	113.08	169.69	348.89
1994	824959	865852	1780.78	856889	56620	524.89	780.23	134.69	255.34	120.65	181.63	379.14
1995	845206	904337	1848.45	1027697	64602	529.12	805.34	150.26	276.22	125.96	191.68	400.20
1996	873982	936462	1876.18	1096174	65328	526.59	814.23	157.21	287.64	130.43	192.39	411.11
1997	885409	936022	1915.58	1142697	64781	517.89	812.82	158.77	294.93	136.16	197.87	427.93
1998	909742	952470	1965.38	1184984	65962	529.85	829.81	161.84	299.96	138.12	202.44	433.84
1999	944980	974280	2012.00	1224322	63200	547.52	854.55	167.09	307.03	139.94	204.96	427.75
2000	967000	990717	2062.50	1231046	65050	569.60	883.36	171.29	313.76	142.47	216.70	424.37
2001	952610	1012220	2113.16	1241540	64470	590.02	902.02	167.38	312.00	144.62	218.59	440.24
2002	956480	1034820	2143.18	1293026	62650	591.92	908.16	169.82	316.24	146.42	220.16	447.80
2003	965400	1052680	2163.80	1381007	64300	588.95	908.28	170.03	319.33	149.30	223.80	467.53
2004	960010	1043570	2211.20	1451108	62390	603.53	914.33	160.45	310.80	150.35	222.74	530.03
2005	978720	1054290	2244.60	1521496	62520	602.76	911.91	157.32	309.15	151.83	217.99	561.25
2006	1019950	1057210	2322.20	1569037	64860	605.44	925.98	162.39	320.54	158.15	223.38	601.87
2007	1065970	1065740	2423.80	1576305	67140	621.70	955.67	171.55	333.97	162.42	225.36	643.18
srate jährl.	**2.86%**	**2.46%**	**2.90%**	**6.15%**	**3.09%**	**1.62%**	**2.03%**	**2.65%**	**2.88%**	**3.14%**	**2.41%**	**3.96%**

	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25
	H-Eink	Konsum	Sparen	SparQ	Preisl	Erwerb	Arblos	Quote%	RenteW	RenteO	Diskont	AufEing
Jahr	Mrd. Eu	Mrd. Eu	Mrd. Eu	%	2005=100	1000	1000	(V/U)*100	1990=100	1990=100	DBB/EZB	2000=100
1991	1182.08	879.86	130.22	12.9	75.9	38622	2767	7.16	102.35	123.625	6.91667	79.125
1992	1270.24	946.60	137.46	12.7	79.8	38055	2994	7.87	106.2024	157.0555	8.20833	76.142
1993	1301.20	986.54	135.24	12.1	83.3	37558	3444	9.17	110.0529	189.0761	6.87500	69.917
1994	1357.24	1031.10	132.46	11.4	85.6	37513	3695	9.85	114.306	212.484	4.77083	75.150
1995	1402.20	1067.19	131.73	11	87.1	37600	3624	9.64	116.5017	224.8484	3.83333	77.433
1996	1414.45	1091.50	128.71	10.5	88.3	37492	3981	10.62	117.347	239.0086	2.62500	77.342
1997	1436.87	1115.78	125.45	10.1	90.0	37458	4400	11.75	118.8745	247.1183	2.50000	82.925
1998	1466.59	1137.51	127.53	10.1	90.9	37908	4267	11.26	120.1108	254.92	2.50000	85.975
1999	1503.31	1175.01	122.72	9.5	91.4	38423	4094	10.66	121.181	259.6213	1.70833	87.792
2000	1558.46	1214.16	123.24	9.2	92.7	39144	3881	9.91	122.3535	263.9828	3.06250	99.942
2001	1599.32	1258.57	130.94	9.4	94.5	39316	3861	9.82	123.8914	267.5657	3.22917	98.267
2002	1597.55	1263.46	139.30	9.9	95.9	39094	4075	10.42	126.4141	274.2657	2.20833	98.242
2003	1614.98	1284.60	147.15	10.3	96.9	38727	4383	11.32	128.4291	279.8275	1.25000	98.975
2004	1632.34	1307.53	151.80	10.4	98.5	38879	4388	11.29	129.0935	281.4827	1.00000	105.058
2005	1654.21	1326.40	156.15	10.5	100.0	38846	4860	12.51	129.0935	281.4827	1.02083	111.783
2006	1708.35	1357.50	158.42	10.5	101.6	39088	4485	11.47	129.0935	281.4827	1.79167	123.833
2007	1760.72	1374.39	167.97	10.9	103.9	39765	3775	9.49	129.4421	282.2427	2.85417	137.467
srate jährl.	**2.52%**	**2.83%**	**1.60%**	**-1.05%**	**1.98%**	**0.18%**	**1.96%**	**1.77%**	**1.48%**	**5.29%**	**-5.38%**	**3.51%**

Literatur:

1. Skript Numerik 1
2. Golub/vanLoan: Matrix computations §5.5
3. Chan: Rank revealing QR facorizations, Lin.Alg.Appl.88/89 (1987)

Aufgabe 4 (Unterbestimmte Systeme direkt und iterativ): Zur Bestimmung der Kleinste-Quadrate-Lösung von Gleichungssystemen $Ax = b$ mit Matrix $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ wird üblicherweise eine QR-Zerlegung verwendet. Bei dünnbesetzten Matrizen wird dabei aber ein erheblicher Anteil der Nullelemente zerstört. Hier haben Iterationsverfahren Vorteile.

Bezeichnet man mit $a_i = A^\mathsf{T} e^{(i)}$ die Zeilenvektoren der Matrix A, dann ist die Lösungsmenge des Gleichungssystems der Durchschnitt der Hyperebenen

$$\mathbb{L} = \bigcap_{i=1}^{m} U_i, \quad U_i := \{x \in \mathbb{R}^n : \ a_i^\mathsf{T} x = b_i\}, \ i = 1, \dots, m.$$

Ein spezielles Iterationsverfahren verbessert eine aktuelle Näherung iterativ dadurch, dass es diese orthogonal auf die einzelnen Hyperebenen projiziert. Wählt man die Hyperebenen zyklisch und führt noch einen Parameter $\omega > 0$ ein, lautet die Iterationsvorschrift

$$x^{(k+1)} := x^{(k)} + \omega \frac{b_i - a_i^\mathsf{T} x^{(k)}}{\|a_i\|_2^2} a_i, \quad i = 1 + (k \, mod \, m),$$

ausgehende von $x^{(0)} := 0$. Für $m < n$ und $Rang(A) = m$ konvergiert die Folge gegen die Lösung minimaler Euklidnornorm in $\mathbb{L}$.

Vergleichen Sie diese Iteration mit der Berechnung über die QR-Zerlegung für $n = 2m$ und $m = 250, 1000$.Bestimmen Sie dazu die Rechenzeit für die QR-Lösung und dann die Genauigkeit, welche die Iteration in (ungefähr) der gleichen Rechenzeit erreicht (Einholpunkt). Erzeugen Sie dabei Matrizen $A = (a_{ij})$ mit $a_{ij} \in [-1, 1]$ zufällig so, dass jeweils $10\%, 20\%, \ldots, 90\%$ der Einträge verschwinden. Fassen Sie die Ergebnisse in einem Diagramm zusammen, das die durch die Iteration erreichte Genauigkeit (Einholpunkte) in Abhängigkeit vom Besetzungsgrad der Matrix darstellt.

Literatur: A. Dax, SIAM Review 32 (1990), 611-635.

Aufgabe 5 (Iterative Regularisierung): Für sehr schlecht konditionierte Lineare Gleichungssysteme $Ay = b$, $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $b \in \mathbb{R}^n$, kann man die Lösung der Normalengleichung auch mit dem Relaxationsverfahren approximeren. Die zugehörige Iteration lautet

$$y^{(m+1)} := y^{(m)} + \omega A^{\mathsf{T}}(b - Ay^{(m)}),\ m \in \mathbb{N},\ y^{(0)} := 0.$$

Man sieht leicht, dass diese Iteration für jedes positive ω mit $\omega < 2/\|A\|_2$ konvergiert.

In manchen Anwendungen (z.B. der Computer-Tomographie) hat man mit Problemen zu tun, die sehr empfindlich auf Störungen reagieren. Dies gilt auch für die folgende *Fredholm-Integralgleichung*

$$\int_0^1 k(x,t) f(t)\, dt = g(x), \quad x \in [0,1],$$

wobei $f \in C[0,1]$ gesucht ist und die gegebene Funktion g i.d.R. glatter ist. Die Funktion $k \in C([0,1]^2)$ ist der sogenannte Integralkern der Gleichung und bekannt. Eine einfache numerische Näherung des Problems bekommt man durch Approximation des Integrals durch eine Riemannsumme mit $n \in \mathbb{N}$ Punkten $x_i = (i - 1/2)/n$, $i = 1, \ldots, n$. Denn dann reduziert sich die Integralgleichung auf ein LGS $A\hat{y} = \hat{b}$ für $\hat{y} = (f(x_i))_{i=1}^n$ mit rechter Seite $\hat{b} = (g(x_i))_{i=1}^n$ und der $n \times n$-Matrix $A = (a_{ij})$ mit den Elementen

$$a_{ij} = \frac{1}{n} k(x_i, x_j), \quad i, j = 1, \ldots, n.$$

Leider reagiert dieses Problem sehr empfindlich auf Störungen und wenn die Werte der rechten Seite $b_i \cong \hat{b}_i = g(x_i)$ nur ungenau bekannt sind, führen nur die ersten Iterationsschritte zu einer Verbessserung, die Näherungen entfernen sich später aber wieder von der (unbekannten) Lösung $\hat{y} = (\hat{f}(x_i))_{i=1}^n$.

Demonstrieren Sie dieses Verhalten bei dem Kern $k(x,t) := \exp(-|x-t|)$ mit $n = 100$, indem Sie zu der gegebenen Lösung $f(x) = 4x(1-x)$ die exakte rechte Seite $\hat{b} = A\hat{y}$ bestimmen, das Gleichungssystem aber mit gestörten rechten Seiten $b_i = \hat{b}_i + \epsilon_i$, $i = 1, \ldots, n$, lösen. Erzeugen Sie dazu für $\varepsilon \in [10^{-3}, 1]$ zufällige Störungen der Größe $\sum_i \epsilon_i^2 = \varepsilon^2$ und protokollieren Sie die

Residuen $\|b - Ay^{(m)}\|_2$ und Fehler $\|\hat{y} - y^{(m)}\|_2$ der Iteration in Abhängigkeit von m. Kann man daraus eine grobe Regel für die beste Anzahl $m(\varepsilon)$ der Iterationen in Abhängigkeit vom Störniveau ε ableiten?

Literatur A.Rieder: Keine Probleme mit inversen Problemen; Vieweg

Aufgabe 6 (Sekantenverfahren und inverse Interpolation): Beim Sekantenverfahren zur Berechnung einer einfachen Nullstelle z einer Funktion $f : [a, b] \to \mathbb{R}$ interpoliert man die Funktionswerte in vorhandenen Näherungen x_{k-1}, x_k linear und verwendet die Nullstelle dieser Sekante (iterativ) als neue Näherung,

$$x_{k+1} := x_k - f(x_k)\frac{x_k - x_{k-1}}{f(x_k) - f(x_{k-1})}.$$

Dieses Verfahren besitzt die Konvergenzordnung $\frac{1}{2}(1 + \sqrt{5}) > 1$ in einer Umgebung von z. Zur Erhöhung der Konvergenzordnung könnte man den Grad der Interpolierenden von f erhöhen, verlagert dabei aber das Problem nur, da dann algebraische Gleichungen zu lösen sind. Ein Ausweg ist die formale Betrachtung der (lokalen) Umkehrfunktion $\phi = f^{-1}$ in einer Umgebung von $0 = f(z)$ und $z = \phi(0)$. Mit $y_k = f(x_k) \iff x_k = \phi(y_k)$ lautet der Sekantenschritt nämlich

$$x_{k+1} := \phi(y_k) + (0 - y_k)\frac{\phi(y_k) - \phi(y_{k-1})}{y_k - y_{k-1}} = p_1(0).$$

Die rechte Seite stellt also einfach den Wert des linearen Interpolationspolynoms $p_1(y)$ durch (y_{k-1}, x_{k-1}) und (y_k, x_k) im Punkt $y = 0$ dar. Hier ist eine Verbesserung einfacher durch das Verfahren $x_{k+1} := p_m(0)$, wobei $p_m(y)$ die Wertepaare $(y_k, x_k), \ldots, (y_{k-m}, x_{k-m})$ der Umkehrfunktion interpoliert. $p_m(0)$ läßt sich einfach mit dem Neville-Algorithmus berechnen.

Testen Sie diese Verfahren für $m = 1, 2, 3, 4$ bei der Nullstellensuche für

$$f(x) = \frac{\sqrt{x^4 + 4}}{x^2 + 1} - 1, \quad x \in [0, 2].$$

Stellen Sie anhand der Daten die Konvergenz (-geschwindigkeit) der Verfahren graphisch dar und schätzen Sie damit deren Konvergenzordnung.

Literatur: Skript, Stoer-Bulirsch: Numerische Mathematik 1

Aufgabe 7 (Werner-Iteration): Das folgende Iterationsverfahren zur Lösung eines nichtlinearen Gleichungssystems $F(x) = 0$, mit der Vorschrift $x_0 = y_0 \in \mathbb{R}^n,\ k = 0, 1, \ldots,$

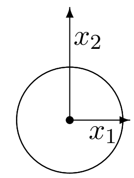
$$\begin{aligned} F'\left(\frac{x_k + y_k}{2}\right)(x_{k+1} - x_k) + F(x_k) &= 0, \\ F'\left(\frac{x_k + y_k}{2}\right)(y_{k+1} - x_{k+1}) + F(x_{k+1}) &= 0, \end{aligned}$$

hat eine höhere Konvergenzordnung als das Newtonverfahren (bezogen auf den Aufwand). Man vergleiche die Konvergenzgeschwindigkeit dieses Verfahrens mit der des Newtonverfahrens

$$F'(x_k)(x_{k+1} - x_k) + F(x_k) = 0$$

bei dem unten beschriebenen Problem dadurch, dass als Startwert x_0 alle Punkte eines quadratischen Gitters verwendet werden. Am Startwert wird markiert, wieviele Schritte das jeweilige Verfahren benötigt, um die Nullstelle mit vorgegebener Genauigkeit (z.B. 10^{-7}) zu bestimmen. Dabei empfiehlt sich eine Graphik in Falschfarbendarstellung.

Als Anwendung soll der "optimale" Eimer berechnet werden, d.h. derjenige, der bei fester Mantelfläche π das größte Volumen hat. Die Radien x_1, x_2 dieses Eimers sind Nullstellen des Systems



$$\begin{aligned} f_1(x_1,x_2) &= (1-4x_1^2)(x_1+2x_2-2x_2^3)+4x_1x_2^2(x_1^2-1)+3x_1x_2^4 \\ f_1(x_1,x_2) &= 2x_1(1-x_1^2)^2+x_2(1-2x_1^2+4x_1^4)+6x_1x_2^2(x_1^2-x_2^2)-3x_2^5. \end{aligned}$$

Man untersuche den Bereich $[0.1,1]\times[0.1,1]$.

Literatur: W.Werner, Numerische Mathematik 32 (1979), 333-342.

Aufgabe 8 (Quasi-Newtonverfahren): Bei der Lösung nichtlinearer Gleichungssysteme $f(x)=0$, $f:\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}^n$, ist der aufwändigste Teil im Newtonverfahren

$$A_{k-1}=f'(x^{(k-1)}),\quad A_{k-1}(x^{(k)}-x^{(k-1)})=-f(x^{(k-1)}),\quad k\in\mathbb{N},$$

die Berechnung und Zerlegung der Ableitungsmatrix A_{k-1} für die Auflösung des linearen Gleichungssystems. Im Eindimensionalen konnte man die Ableitung $f'(x^{(k)})$ durch den Differenzenquotienten, d.h., die Sekantensteigung ersetzen. Für $n>1$ liefert der Mittelwertsatz dagegen nur eine einzelne Nebenbedingung an die Ableitungsmatrix, die Sekantengleichung

$$\Delta^{(k)}:=f(x^{(k)})-f(x^{(k-1)})\cong A_k\delta^{(k)},\quad \delta^{(k)}:=x^{(k)}-x^{(k-1)}.$$

Im Lauf der Iteration kann man damit aber ein Modell für f' aufbauen, indem man die kleinste Änderung einer Vorgängermatrix A_{k-1} sucht, welche die Gleichung $A_k\delta^{(k)}=\Delta^{(k)}$ exakt erfüllt. Bei Verwendung der Frobeniusnorm hat diese Änderung den Rang 1, nämlich

$$A_k=A_{k-1}+\frac{1}{\|\delta^{(k)}\|^2}(\Delta^{(k)}-A_{k-1}\delta^{(k)}){\delta^{(k)}}^T.$$

Wegen der Rang-1-Eigenschaft können dann sogar die Inversen $B_k=A_k^{-1}$ auseinander hergeleitet werden in der Form

$$B_k=B_{k-1}+\frac{\delta^{(k)}-B_{k-1}\Delta^{(k)}}{{\delta^{(k)}}^T B_{k-1}\Delta^{(k)}}\,{\delta^{(k)}}^T B_{k-1}. \tag{1}$$

Mit einer Startmatrix $B^{(0)}:=I$ erhält man so ein Quasi-Newton-Verfahren

$$x^{(k)}=x^{(k-1)}-B_{k-1}f(x^{(k-1)}),\ B_k \text{ aus } (1).$$

Testen Sie dieses Verfahren bei der Suche nach einer Näherungslösung für das nichtlineare Randwertproblem

$$u''(t)+e^{u(t)}=0,\ u(0)=u(1)=0.$$

Dieses approximiert man für $h = 1/(n+1)$, $n \in \mathbb{N}$, durch das System

$$f_i(x) := x_{i-1} - 2x_i + x_{i+1} + h^2 e^{x_i} \overset{!}{=} 0, \;\; i = 1, \dots, n-1,$$

es gilt $x_i \cong u(i/(n+1))$. Testen Sie das Quasi-Newton-Verfahren mit $n \in \{8, 16, 32\}$, Startvektor $x_j^{(0)} = 0.5 \sin(j\pi/n)$, $j = 1, \dots, n-1$ und Startmatrix $B_0 = I$. Überwachen Sie die Regularität der Matrizen anhand des Nenners $|{\delta^{(k)}}^T B_{k-1} \Delta^{(k)}|$ und stellen Sie den Verlauf der Residuen $\|f(x^{(k)}\|$ und Korrekturen $\|\delta^{(k)}\|$ in Diagrammen graphisch dar.

Literatur: C.T. Kelley, Iterative methods for linear and nonlinear equations.

Aufgabe 9 (Sekantenverfahren): Das Sekantenverfahren zur Bestimmung der Nullstellen einer reellen Funktion soll programmiert werden. Als Beispiel ist die folgende, durch Rekursion definierte Funktion $f(x)$ zu betrachten:

$$\begin{aligned} d_0 &:= -\frac{\alpha}{2}(u_0^2 - 1), \quad u_0 := x, \\ d_k &:= d_{k-1} + \alpha(u_{k-1}^2 - 1), \quad u_k := u_{k-1} + d_k, \quad k = 1, 2, \dots, n \\ f(x) &:= u_n, \end{aligned}$$

mit $n := 20$, $\alpha := 100/n^2 = 0.25$. Diese Funktion beschreibt näherungsweise, wie der Wert $u(1) \approx f(x)$ der Lösung u des Anfangswertproblems

$$u''(t) = 100(u^2(t) - 1), \quad u'(0) := 0, \;\; u(0) := x$$

vom Wert $u(0)$ abhängt. Wenn eine Nullstelle $f(\hat{x}) = 0$ bestimmt wurde, hat man auch eine Lösung des Randwertproblems

$$u''(t) = 100(u^2(t) - 1), \;\; 0 \le t \le 1, \quad u'(0) := 0, \;\; u(1) = 0$$

gefunden.

Die Funktion f besitzt 5 einfache Nullstellen im Intervall $(0, 1)$, die möglichst alle bestimmt werden sollen. Dazu ist das Interval $[0, 1]$ zu durchsuchen, bis ein Vorzeichenwechsel von f entdeckt wird. Mit diesen Werten kann dann das Sekantenverfahren gestartet werden. Da die Funktion f aber teilweise sehr empfindlich auf Änderungen des Arguments reagiert, muß das Verfahren überwacht werden. Dies kann dadurch geschehen, dass keine Iterierte x_k akzeptiert wird, die eine schlechtere Approximation der Nullstelle darstellt als frühere. Konvergenz kann auch mit Hilfe des "Illinois-Algorithmus" garantiert werden (vgl. [1],S.171).

Literatur: 1. Björck, Dahlquist: Numerische Methoden