

b) Zentraler Differenzenquotient zur Approximation der ersten Ableitung

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}$$

Fehler hat h^2 -Entwicklung (Taylorentwicklung von $f(x+h)$ und $f(x-h)$).

6 Iterationsverfahren für lineare und nichtlineare Gleichungssysteme

6.1 Nullstellen reeller Funktionen

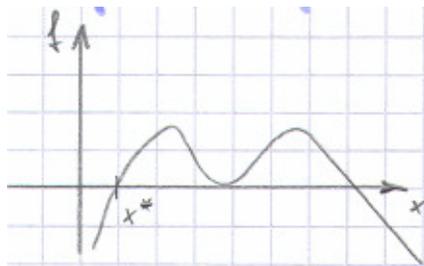
Bemerkung 6.1 (Problemstellung)

geg.: $f \in C[a, b]$

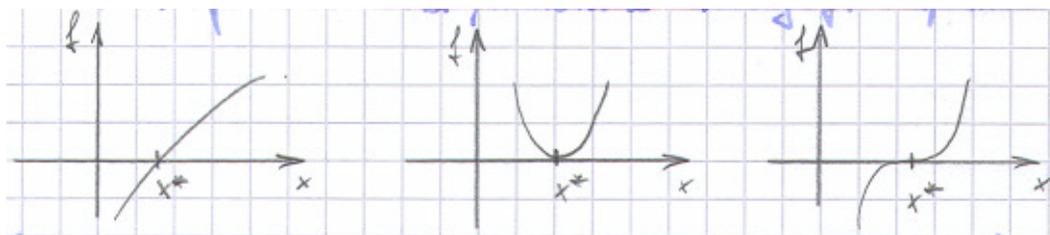
ges.: $x^* \in [a, b]$ mit $f(x^*) = 0$

Lösungstheorie

- f linear $\Rightarrow f(x) = 0$ genau dann eindeutig lösbar in \mathbb{R} , falls $f' \neq 0$.
- f nichtlinear \Rightarrow i. Allg. nur Aussagen über lokale Eindeutigkeit der Lösung



- Satz über die implizite Funktion: Ist $f(x^*) = 0$, $f \in C^1[a, b]$ und $f'(x^*) \neq 0$, so ist $y = f(x)$ in einer Umgebung von x^* eindeutig nach x auflösbar: $x = x(y)$.
- $f'(x^*) = 0 \Rightarrow$ mehrfache Nullstelle, numerische Bestimmung oft kompliziert



- $f(a) \cdot f(b) < 0 \Rightarrow$ es existiert ein x^* mit $f(x^*) = 0$ (Zwischenwertsatz)

Bemerkung 6.2 (Bisektionsverfahren)

geg.: $f \in C[a, b]$, Intervallenden a, b mit $f(a) \cdot f(b) < 0$, Abbruchschranke TOL

```
Initialisierung:  $f_a := f(a), f_b := f(b)$ .
repeat
   $c := \frac{a+b}{2}, f_c := f(c)$ 
  if  $f_a \cdot f_c < 0$  then  $b := c, f_b := f_c$ 
  else  $a := c, f_a := f_c$ 
until  $|b - a| \leq \text{TOL}$ 
Ergebnis:  $x^* \approx x_{\text{bi}} := \frac{a+b}{2}$ 
```

Konvergenz stets gesichert: Werden mindestens $1 + \log_2 \frac{b-a}{\text{TOL}}$ Iterationsschritte ausgeführt, so gilt

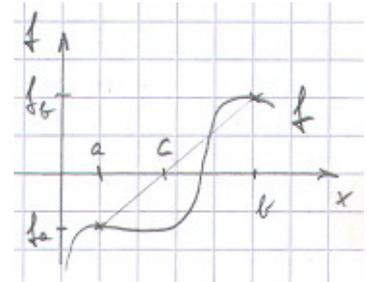
$$|x_{\text{bi}} - x^*| \leq \text{TOL}.$$

beachte Wegen der Rundungsfehler bei der Auswertung von f kann x^* außerhalb des numerisch bestimmten Intervalls $[a, b]$ liegen.

praktisch sehr robust, einfach zu implementieren, aber sehr langsame Konvergenz

Bemerkung 6.3 (Regula falsi)

Idee Bestimme wie im Bisektionsverfahren immer kleinere Intervalle, die x^* enthalten, berücksichtige bei der Wahl von c jedoch den Lösungsverlauf.



praktisch Wähle c als Nullstelle des (linearen) Interpolationspolynoms zu den Stützpunkten (a, f_a) und (b, f_b) .

geg.: $f \in C[a, b]$, Intervallenden a, b mit $f(a) \cdot f(b) < 0$, Abbruchschranke TOL

```
Initialisierung:  $f_a := f(a), f_b := f(b)$ .
repeat
   $c := \frac{af_b - bf_a}{f_b - f_a}, f_c := f(c)$ 
  if  $f_a \cdot f_c < 0$  then  $b := c, f_b := f_c$ 
  else  $a := c, f_a := f_c$ 
until  $|b - a| \leq \text{TOL}$ 
Ergebnis:  $x^* \approx x_{\text{rf}} := \frac{a+b}{2}$ 
```

Regula falsi konvergiert i. Allg. deutlich schneller als das Bisektionsverfahren.

Problem Langsame Konvergenz, wenn eines der beiden Intervallenden stets unverändert bleibt wie z. B. für $f(x) := x^{10} - 1/2$, ($x \in [0, 1]$).

Alternative Bleibt eines der beiden Intervallenden a bzw. b über mehr als einen Iterationsschritt unverändert, so ersetze $f_a := \frac{1}{2}f_a$ bzw. $f_b := \frac{1}{2}f_b$.

Bemerkung 6.4 (Sekantenverfahren)

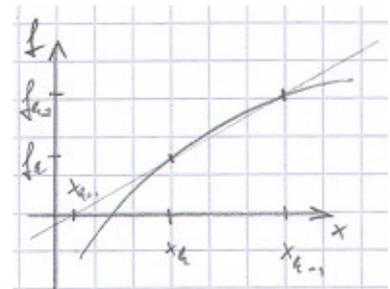
Verzichtet man auf eine Einschließung der Nullstelle x^* , so ergibt sich ausgehend von $(x_{k-1}, f(x_{k-1}))$, $(x_k, f(x_k))$ in der Regel eine wesentlich bessere Näherung für f :

Betrachte das (lineare) Interpolationspolynom

$$f(x) \approx f_k(x) := f_{k-1} + \frac{x - x_{k-1}}{x_k - x_{k-1}} (f_k - f_{k-1})$$

und bestimme aus $f_k(x) \stackrel{!}{=} 0$ die neue Näherung

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



Konvergenzordnung des Sekantenverfahrens $q := (1 + \sqrt{5})/2$, d. h.

$$0 \leq \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\|x_{k+1} - x^*\|}{\|x_k - x^*\|^q} < \infty$$

praktisch Schnelle Konvergenz für gute Startwerte, jedoch Gefahr der Divergenz für schlechte Startwerte

Verallgemeinerung Inverse Interpolation.

Hinzunahme weiterer Stützpunkte $(x_i, f(x_i))$, Bestimmung des Interpolationspolynoms $\pi(y)$ zu den Stützstellen $y = f_k, f_{k-1}, f_{k-2}, \dots$ und Stützwerten $\pi = x_k, x_{k-1}, x_{k-2}, \dots$ und Wahl von c als $c := \pi(0)$.

Bemerkung 6.5 (Newtonverfahren)

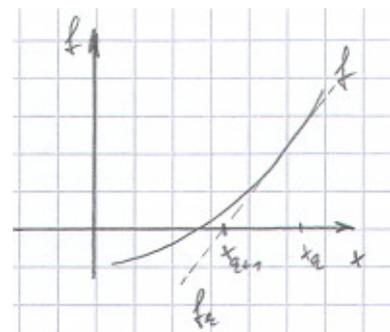
geg.: $f \in C^1[a, b]$

Linearisierung von f in x_k :

$$f(x) \approx f_k(x) := f(x_k) + f'(x_k)(x - x_k)$$

Bestimmung von x_{k+1} als Nullstelle von $f_k(x)$:

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

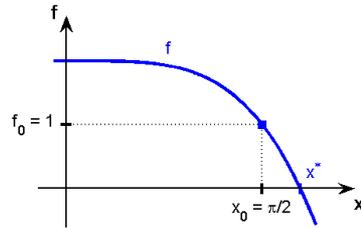


Beispiel 6.6: Newtonverfahren

gesucht

Kleinste positive Lösung von

$$f(x) = \cos x \cosh x + 1 = 0$$



Newtonverfahren

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}, \quad \text{Startwert } x_0 := \frac{\pi}{2}$$

k	x_k	$f(x_k)$	$f'(x_k)$	$ x_k - x^* $
0	1.570796326794897	1.0000E+00	-2.5092	3.0431E-01
1	1.969333142133283	-4.1751E-01	-4.7298	9.4229E-02
2	1.881060554590512	-2.4757E-02	-4.1744	5.9565E-03
3	1.875129963043149	-1.0716E-04	-4.1383	2.5894E-05
4	1.875104069204172	-2.0368E-09	-4.1381	4.9221E-10
5	1.875104068711961	2.2204E-16	-4.1381	< 1.0E-16
6	1.875104068711961			



Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, FB Mathematik und Informatik
Martin Arnold: Numerische Mathematik für Fachrichtung Informatik und Lehramt (WiS 2005/06)

Abbildung 6.1: Quadratische Konvergenz des Newtonverfahrens.

Quadratisch konvergent für einfache Nullstellen, d. h.

$$0 \leq \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\|x_{k+1} - x^*\|}{\|x_k - x^*\|^2} < \infty,$$

linear konvergent für mehrfache Nullstellen.

Beispiel 6.6 (Newtonverfahren)

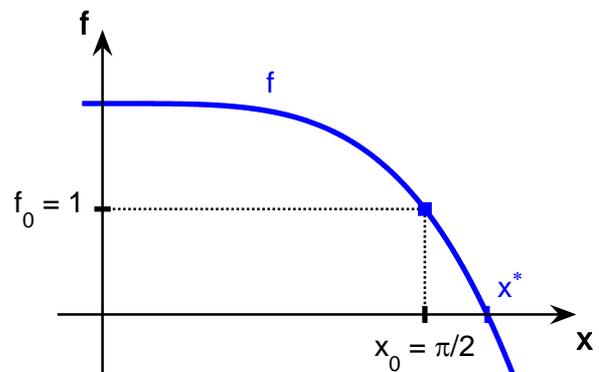
Berechnung der kleinsten positiven Lösung von $f(x) = \cos x \cosh x + 1 = 0$.

Newtonverfahren

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

mit Startwert $x_0 := \pi/2$ und

$$f'(x) = \cos x \sinh x - \sin x \cosh x.$$



k	x_k	$f(x_k)$	$f'(x_k)$	$ x_k - x^* $
0	1.570796326794897	1.0000 _E + 00	-2.5092	3.0431 _E - 01
1	1.969333142133283	-4.1751 _E - 01	-4.7298	9.4229 _E - 02
2	1.881060554590512	-2.4757 _E - 02	-4.1744	5.9565 _E - 03
3	1.875129963043149	-1.0716 _E - 04	-4.1383	2.5894 _E - 05
4	1.875104069204172	-2.0368 _E - 09	-4.1381	4.9221 _E - 10
5	1.875104068711961	2.2204 _E - 16	-4.1381	< 1.0 _E - 16
6	1.875104068711961			

Ergebnis Folge (x_k) konvergiert quadratisch gegen $x^* = 1.875104068711961 \dots$

Beispiel 6.8: Vereinfachtes Newtonverfahren

gesucht Kleinste positive Lösung von $f(x) = \cos x \cosh x + 1 = 0$.

Vereinfachtes Newtonverfahren
$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_0)}$$

Startwert $x_0 = 2.0$: (x_k) konvergiert linear mit $\alpha \approx 0.16$.

k	x_k	$f(x_k)$	$f'(x_k)$	$ x_k - x^* $
0	2.0000000000000000	-5.6563E-01	-4.9303	1.2490E-01
1	1.885274674997890	-4.2402E-02		1.0171E-02
2	1.876674249774155	-6.5051E-03		1.5702E-03
3	1.875354824372530	-1.0379E-03		2.5076E-04
4	1.875144317977280	-1.6656E-04		4.0249E-05
5	1.875110534418510	-2.6756E-05		6.4657E-06
6	1.875105107508024	-4.2987E-06		1.0388E-06
7	1.875104235610924	-6.9065E-07		1.6690E-07
8	1.875104095527000	-1.1096E-07		2.6815E-08
9	1.875104073020237	-1.7828E-08		4.3083E-09
10	1.875104069404156	-2.8644E-09		6.9220E-10



Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, FB Mathematik und Informatik
Martin Arnold: Numerische Mathematik für Fachrichtung Informatik und Lehramt (WiS 2005/06)

Abbildung 6.2: Lineare Konvergenz des vereinfachten Newtonverfahrens, einmalige Auswertung der Ableitung $f'(x_k)$, Startwert $x_0 = 2.0$.

6.2 Das Newtonverfahren

Bemerkung 6.7 (Newton–Raphson–Verfahren)

Beispiel 6.8 (Vereinfachtes Newtonverfahren)

Betrachte zur Funktion $f(x)$ aus Beispiel 6.6 das vereinfachte Newtonverfahren

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_0)}.$$

Startwert $x_0 = 2.0$ (x_k) konvergiert linear mit $\alpha \approx 0.16$

Beispiel 6.8: Vereinfachtes Newtonverfahren (II)

gesucht Kleinste positive Lösung von $f(x) = \cos x \cosh x + 1 = 0$.

Vereinfachtes Newtonverfahren
$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_0)}$$

Startwert $x_0 = \pi/2$: (x_k) konvergiert linear mit $\alpha \approx 0.65$.

k	x_k	$f(x_k)$	$f'(x_k)$	$ x_k - x^* $
0	1.570796326794897	1.0000E+00	-2.5092	3.0431E-01
1	1.969333142133283	-4.1751E-01		9.4229E-02
2	1.802938787863725	2.8309E-01		7.2165E-02
3	1.915761753759818	-1.7332E-01		4.0658E-02
4	1.846688134029678	1.1515E-01		2.8416E-02
5	1.892580923809663	-7.3253E-02		1.7477E-02
6	1.863386753854851	4.8072E-02		1.1717E-02
7	1.882545193155160	-3.0961E-02		7.4411E-03
8	1.870206143078939	2.0195E-02		4.8979E-03
9	1.878254787141379	-1.3068E-02		3.1507E-03
10	1.873046598671781	8.5012E-03		2.0575E-03



Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, FB Mathematik und Informatik
Martin Arnold: Numerische Mathematik für Fachrichtung Informatik und Lehramt (WiS 2005/06)

Abbildung 6.3: Lineare Konvergenz des vereinfachten Newtonverfahrens, einmalige Auswertung der Ableitung $f'(x_k)$, Startwert $x_0 = \pi/2$.

Beispiel 6.8: Vereinfachtes Newtonverfahren (III)

gesucht Kleinste positive Lösung von $f(x) = \cos x \cosh x + 1 = 0$.

Vereinfachtes Newtonverfahren

mit Neuberechnung von $f'(x_k)$ in jedem fünften Iterationsschritt

Deutlich besseres Konvergenzverhalten: $\alpha \approx 0.025$ für $k \geq 5$

k	x_k	$f(x_k)$	$f'(x_k)$	$ x_k - x^* $
0	1.570796326794897	1.0000E+00	-2.5092	3.0431E-01
1	1.969333142133283	-4.1751E-01		9.4229E-02
2	1.802938787863725	2.8309E-01		7.2165E-02
3	1.915761753759818	-1.7332E-01		4.0658E-02
4	1.846688134029678	1.1515E-01		2.8416E-02
5	1.892580923809663	-7.3253E-02	-4.2450	1.7477E-02
6	1.875324505147979	-9.1234E-04		2.2044E-04
7	1.875109582992217	-2.2819E-05		5.5143E-06
8	1.875104207501406	-5.7433E-07		1.3879E-07
9	1.875104072205700	-1.4458E-08		3.4937E-09
10	1.875104068799909	-3.6394E-10	-4.1381	8.7948E-11



Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, FB Mathematik und Informatik
Martin Arnold: Numerische Mathematik für Fachrichtung Informatik und Lehramt (WiS 2005/06)

Abbildung 6.4: Lineare Konvergenz des vereinfachten Newtonverfahrens, Auswertung der Ableitung $f'(x_k)$ in jedem fünften Iterationsschritt, Startwert $x_0 = \pi/2$.

k	x_k	$f(x_k)$	$f'(x_k)$	$ x_k - x^* $
0	2.0000000000000000	$-5.6563_{\text{E}} - 01$	-4.9303	$1.2490_{\text{E}} - 01$
1	1.885274674997890	$-4.2402_{\text{E}} - 02$		$1.0171_{\text{E}} - 02$
2	1.876674249774155	$-6.5051_{\text{E}} - 03$		$1.5702_{\text{E}} - 03$
3	1.875354824372530	$-1.0379_{\text{E}} - 03$		$2.5076_{\text{E}} - 04$
4	1.875144317977280	$-1.6656_{\text{E}} - 04$		$4.0249_{\text{E}} - 05$
5	1.875110534418510	$-2.6756_{\text{E}} - 05$		$6.4657_{\text{E}} - 06$
6	1.875105107508024	$-4.2987_{\text{E}} - 06$		$1.0388_{\text{E}} - 06$
7	1.875104235610924	$-6.9065_{\text{E}} - 07$		$1.6690_{\text{E}} - 07$
8	1.875104095527000	$-1.1096_{\text{E}} - 07$		$2.6815_{\text{E}} - 08$
9	1.875104073020237	$-1.7828_{\text{E}} - 08$		$4.3083_{\text{E}} - 09$
10	1.875104069404156	$-2.8644_{\text{E}} - 09$		$6.9220_{\text{E}} - 10$

Startwert $x_0 = \pi/2$ (x_k) konvergiert linear mit $\alpha \approx 0.65$

k	x_k	$f(x_k)$	$f'(x_k)$	$ x_k - x^* $
0	1.570796326794897	$1.0000_{\text{E}} + 00$	-2.5092	$3.0431_{\text{E}} - 01$
1	1.969333142133283	$-4.1751_{\text{E}} - 01$		$9.4229_{\text{E}} - 02$
2	1.802938787863725	$2.8309_{\text{E}} - 01$		$7.2165_{\text{E}} - 02$
3	1.915761753759818	$-1.7332_{\text{E}} - 01$		$4.0658_{\text{E}} - 02$
4	1.846688134029678	$1.1515_{\text{E}} - 01$		$2.8416_{\text{E}} - 02$
5	1.892580923809663	$-7.3253_{\text{E}} - 02$		$1.7477_{\text{E}} - 02$
6	1.863386753854851	$4.8072_{\text{E}} - 02$		$1.1717_{\text{E}} - 02$
7	1.882545193155160	$-3.0961_{\text{E}} - 02$		$7.4411_{\text{E}} - 03$
8	1.870206143078939	$2.0195_{\text{E}} - 02$		$4.8979_{\text{E}} - 03$
9	1.878254787141379	$-1.3068_{\text{E}} - 02$		$3.1507_{\text{E}} - 03$
10	1.873046598671781	$8.5012_{\text{E}} - 03$		$2.0575_{\text{E}} - 03$

Startwert $x_0 = \pi/2$, Neuberechnung von $f'(x_k)$ in jedem 5. Iterationsschritt
Deutliche Verbesserung des Konvergenzverhaltens: $\alpha \approx 0.025$ für $k \geq 5$.

k	x_k	$f(x_k)$	$f'(x_k)$	$ x_k - x^* $
0	1.570796326794897	$1.0000_{\text{E}} + 00$	-2.5092	$3.0431_{\text{E}} - 01$
1	1.969333142133283	$-4.1751_{\text{E}} - 01$		$9.4229_{\text{E}} - 02$
2	1.802938787863725	$2.8309_{\text{E}} - 01$		$7.2165_{\text{E}} - 02$
3	1.915761753759818	$-1.7332_{\text{E}} - 01$		$4.0658_{\text{E}} - 02$
4	1.846688134029678	$1.1515_{\text{E}} - 01$		$2.8416_{\text{E}} - 02$
5	1.892580923809663	$-7.3253_{\text{E}} - 02$	-4.2450	$1.7477_{\text{E}} - 02$
6	1.875324505147979	$-9.1234_{\text{E}} - 04$		$2.2044_{\text{E}} - 04$
7	1.875109582992217	$-2.2819_{\text{E}} - 05$		$5.5143_{\text{E}} - 06$
8	1.875104207501406	$-5.7433_{\text{E}} - 07$		$1.3879_{\text{E}} - 07$
9	1.875104072205700	$-1.4458_{\text{E}} - 08$		$3.4937_{\text{E}} - 09$
10	1.875104068799909	$-3.6394_{\text{E}} - 10$	-4.1381	$8.7948_{\text{E}} - 11$

Lemma 6.9 (Kontrahierende Abbildungen)

Satz 6.10 (Banachscher Fixpunktsatz)

Sei $E \subset \mathbb{R}^n$ kompakt und $\Phi : E \rightarrow E$ kontrahierend. Dann gilt:

- a) Φ hat genau einen Fixpunkt x^* in E : $\Phi(x^*) = x^*$.
- b) Für jeden Startwert $x_0 \in E$ konvergiert die Fixpunktiteration $x_{k+1} = \Phi(x_k)$ gegen x^* und es gilt:

$$(i) \quad \|x_k - x^*\| \leq \frac{\alpha^k}{1 - \alpha} \|x_1 - x_0\|,$$

$$(ii) \quad \|x_{k+1} - x^*\| \leq \frac{\alpha}{1 - \alpha} \|x_{k+1} - x_k\|.$$

Beweis Wegen $\Phi : E \rightarrow E$ folgt mittels vollständiger Induktion $x_k \in E$ und

$$\|x_{k+1} - x_k\| = \|\Phi(x_k) - \Phi(x_{k-1})\| \leq \alpha \|x_k - x_{k-1}\| \leq \dots \leq \alpha^k \|x_1 - x_0\|, \quad (k \geq 0).$$

Aus der Dreiecksungleichung folgt

$$\begin{aligned} \|x_{k+m} - x_k\| &= \|x_{k+m} - x_{k+m-1} + x_{k+m-1} - x_{k+m-2} + x_{k+m-2} - \dots - x_k\| \\ &\leq \|x_{k+m} - x_{k+m-1}\| + \|x_{k+m-1} - x_{k+m-2}\| + \dots + \|x_{k+1} - x_k\| \\ &\leq (\alpha^{k+m-1} + \alpha^{k+m-2} + \dots + \alpha^k) \|x_1 - x_0\| \\ &\leq \alpha^k \sum_{i=0}^{\infty} \alpha^i \cdot \|x_1 - x_0\| = \frac{\alpha^k}{1 - \alpha} \|x_1 - x_0\|, \end{aligned}$$

also ist $(x_k)_k$ eine Cauchy-Folge, denn wählt man zu vorgegebenem $\varepsilon > 0$ ein k_0 mit

$$\frac{\alpha^{k_0}}{1 - \alpha} \|x_1 - x_0\| \leq \varepsilon,$$

so gilt für alle $k \geq k_0$ und alle $m \geq 0$ die Abschätzung $\|x_{k+m} - x_k\| \leq \varepsilon$. Als Cauchy-Folge im Kompaktum E hat $(x_k)_k$ einen Häufungspunkt $x^* = \lim_{k \rightarrow \infty} x_k \in E$ mit

$$\|x^* - x_k\| = \lim_{m \rightarrow \infty} \|x_{k+m} - x_k\| \leq \frac{\alpha^k}{1 - \alpha} \|x_1 - x_0\|.$$

Dieser Häufungspunkt ist Fixpunkt von Φ , denn

$$\begin{aligned} \|x^* - \Phi(x^*)\| &= \|x^* - x_{k+1} + \Phi(x_k) - \Phi(x^*)\| \\ &\leq \|x^* - x_{k+1}\| + \|\Phi(x_k) - \Phi(x^*)\| \leq \|x^* - x_{k+1}\| + \alpha \|x_k - x^*\| \rightarrow 0. \end{aligned}$$

Der Fixpunkt ist eindeutig bestimmt, denn aus $x_1^* = \Phi(x_1^*)$ und $x_2^* = \Phi(x_2^*)$ folgt

$$\|x_2^* - x_1^*\| = \|\Phi(x_2^*) - \Phi(x_1^*)\| \leq \alpha \|x_2^* - x_1^*\|,$$

also $\underbrace{(1 - \alpha)}_{>0} \|x_2^* - x_1^*\| \leq 0$ und $x_2^* = x_1^*$.

Zum Beweis von (ii) verwendet man

$$\begin{aligned}\|x_{k+1+m} - x_{k+m}\| &= \|\Phi(x_{k+m}) - \Phi(x_{k+m-1})\| \\ &\leq \alpha \|x_{k+m} - x_{k+m-1}\| \leq \dots \leq \alpha^m \|x_{k+1} - x_k\|, \quad (m \geq 1),\end{aligned}$$

um wie oben unter Verwendung der Dreiecksungleichung die Abschätzung

$$\|x_{k+1+m} - x_{k+1}\| \leq (\alpha^m + \alpha^{m-1} + \dots + \alpha) \|x_{k+1} - x_k\| \leq \frac{\alpha}{1 - \alpha} \|x_{k+1} - x_k\|, \quad (m \geq 1),$$

zu zeigen, aus der die Behauptung durch Grenzübergang $m \rightarrow \infty$ folgt. ■

Bemerkung 6.11 (Konvergenz des Newtonverfahrens)

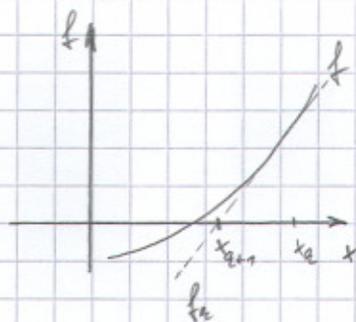
Bemerkung 6.12 (Gedämpftes Newtonverfahren)

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

Quadratische Konvergenz für einfache Nullstellen, d.h.

$$0 \equiv \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\|x_{k+1} - x^*\|}{\|x_k - x^*\|^2} < \infty,$$

linear konvergent für mehrfache Nullstellen.



Arnold

5.2. Das Newtonverfahren

Bemerkung 5.6: Newton-Raphson-Verfahren.

geg.: $F: D \rightarrow \mathbb{R}^n$ mit $D \subset \mathbb{R}^n$, F stetig differenzierbar

Anfangsnäherung $x_0 \in D$

ges.: $x^* \in D$ mit $F(x^*) = 0$

Algorithmus:

Schritt 0

$k := 0$

↗ Jacobimatrix

↗ Bem. 2.5

Schritt 1

Berechne $J := F_x(x_k)$ und LU-Zerlegung von J

Schritt 2

Berechne $F := F(x_k)$

Schritt 3

Berechne p_k mit $J \cdot p_k = -F$ mittels Gaußsches und Rückwärts substitution.

Schritt 4

$x_{k+1} := x_k + p_k$, $k := k+1$

if konvergent then stop

else go to Schritt 1

x_{k+1} ist Nullstelle der linearisierten Funktion $F(x_k) + F_x(x_k)(x - x_k)$.

praktisch: Berechne Ableitungen $F_x(x_k)$ analytisch unter Verwendung mathematischer Hilfsprogramme (Maple, Mathematica) oder numerisch mittels Differenzquotienten. ↗ vgl. Beispiel 4.7

Ver Einfachtes Newtonverfahren: Vermeidung der häufigen Neuberechnung und LU-Zerlegung der Jacobimatrix, indem f über mehrere Iterationschritte konstant gehalten wird.

Arnold

? Auswirkungen auf das Konvergenzverhalten und auf die Konvergenzgeschwindigkeit

? Kriterium für die Neuberechnung der Jacobimatrix

Lemma 5.7: Kontrahierende Abbildungen.

Sei $D \subset \mathbb{R}^n$ eine konvexe offene Menge und $\Phi: D \rightarrow \mathbb{R}^n$ stetig differenzierbar. Existiert $\bar{\alpha} := \sup_{x \in D} \|\Phi'_x\|$ und ist $\bar{\alpha} < 1$, so ist Φ kontrahierend.

d.h., es gibt ein $\bar{\alpha} \in [0, 1)$ so, dass $\|\Phi(y) - \Phi(x)\| \leq \bar{\alpha} \|y - x\|$, $(x, y \in D)$.

Beweis: Für $\varphi(\vartheta) := \Phi(x + \vartheta(y-x))$, $(\vartheta \in [0, 1])$ ist $\varphi'(\vartheta) = \Phi'_x(x + \vartheta(y-x)) \cdot (y-x)$ und $\varphi(1) - \varphi(0) = \int_0^1 \varphi'(\vartheta) d\vartheta$, also

$$\|\Phi(y) - \Phi(x)\| \leq \int_0^1 \|\Phi'_x(x + \vartheta(y-x))\| \cdot \|y-x\| d\vartheta \leq \bar{\alpha} \cdot \|y-x\|.$$

Satz 5.8: Banachsches Fixpunktsatz.

Sei $E \subset \mathbb{R}^n$ kompakt und $\Phi: E \rightarrow E$ kontrahierend. Dann gilt:

a) Φ hat genau einen Fixpunkt x^* in E : $\Phi(x^*) = x^*$.

b) Für jeden Startwert $x_0 \in E$ konvergiert die Fixpunktiteration $x_{k+1} = \Phi(x_k)$

gegen x^* und es gilt:

(i) $\|x^* - x_k\| \leq \frac{\alpha^k}{1-\alpha} \|x_1 - x_0\|$

(ii) $\|x^* - x_{k+1}\| \leq \frac{\alpha}{1-\alpha} \|x_{k+1} - x_k\|$

Beweis: Liegen $\Phi: E \rightarrow E$ folgt mittels vollständiger Induktion $x_k \in E$ und

$$\|x_{k+1} - x_k\| = \|\Phi(x_k) - \Phi(x_{k-1})\| \leq \alpha \|x_k - x_{k-1}\| \leq \dots \leq \alpha^k \|x_1 - x_0\|,$$

($k \geq 0$).

Aus der Dreiecksungleichung folgt

Arnold

$$\begin{aligned}\|x_{k+m} - x_k\| &= \|x_{k+m} - x_{k+m-1} + x_{k+m-1} - x_{k+m-2} + x_{k+m-2} - \dots - x_k\| \\ &\leq \|x_{k+m} - x_{k+m-1}\| + \|x_{k+m-1} - x_{k+m-2}\| + \dots + \|x_{k+1} - x_k\| \\ &\leq (\alpha^{k+m-1} + \alpha^{k+m-2} + \dots + \alpha^k) \|x_1 - x_0\| \\ &\leq \alpha^k \sum_{i=0}^{\infty} \alpha^i \cdot \|x_1 - x_0\| = \frac{\alpha^k}{1-\alpha} \|x_1 - x_0\|,\end{aligned}$$

also ist $(x_k)_k$ eine Cauchy-Folge, denn wählt man zu vorgegebenem $\varepsilon > 0$ ein k_0 mit $\frac{\alpha^{k_0}}{1-\alpha} \|x_1 - x_0\| \leq \varepsilon$, so gilt für alle $k \geq k_0$ und alle $m \geq 0$

$\|x_{k+m} - x_k\| \leq \varepsilon$. Als Cauchy-Folge im Kompaktum E hat $(x_k)_k$ einen Häufungspunkt $x^* = \lim_{k \rightarrow \infty} x_k \in E$ mit $\|x^* - x_k\| \leq \frac{\alpha^k}{1-\alpha} \|x_1 - x_0\|$.

Dieser Häufungspunkt ist Fixpunkt von Φ^* , denn

$$\begin{aligned}\|x^* - \Phi(x^*)\| &\stackrel{!}{=} \|x^* - x_{k+1} + \Phi(x_k) - \Phi(x^*)\| \\ &\leq \|x^* - x_{k+1}\| + \|\Phi(x_k) - \Phi(x^*)\| \leq \|x^* - x_{k+1}\| + \alpha \|x_k - x^*\| \rightarrow 0.\end{aligned}$$

Der Fixpunkt ist eindeutig bestimmt, denn aus $x_1^* = \Phi(x_1^*)$ und $x_2^* = \Phi(x_2^*)$ folgt $\|x_2^* - x_1^*\| = \|\Phi(x_2^*) - \Phi(x_1^*)\| \leq \alpha \|x_2^* - x_1^*\|$,

also $\underbrace{(1-\alpha)}_{>0} \|x_2^* - x_1^*\| \leq 0$ und $x_1^* = x_2^*$.

Die zweite Fehlerschranke folgt wie oben. ■

↑ 8.1.04

Satz 5.9: Konvergenz des Newtonverfahrens.

(Vereinfachtes) Newtonverfahren entspricht Fixpunktabbildung $x_{k+1} = \Phi(x_k)$

mit $\Phi(x) := \tilde{\Phi}(x) := x - (F_x(x))^{-1} F(x)$

bzw. $\Phi(x) = \tilde{\Phi}_z(x) := x - (F_x(x_z))^{-1} F(x)$.

Konvergenz:

Arnold

$$a) \frac{\partial}{\partial x} \tilde{\Phi}(x) = I - (F_x(x))^{-1} F_x(x) - \frac{\partial}{\partial x} \left((F_x(x))^{-1} v \right) \Big|_{v=F(x)}$$
$$= \sigma(\|F(x)\|),$$

falls F zweimal stetig differenzierbar und $\|F_{xx}(x)\|$ und $\|(F_x(x))^{-1}\|$ gleichmäßig beschränkt \Rightarrow konvergiert für $\|x - x^*\| \ll 1$ wegen $F(x^*) = 0$.
 \nearrow sehr schnelle Konvergenz für $\|x_k - x^*\| \ll 1$

$$b) \frac{\partial}{\partial x} \tilde{\Phi}_{\frac{1}{2}}(x) = I - (F_x(x_{\frac{1}{2}}))^{-1} F_x(x) = (F_x(x_{\frac{1}{2}}))^{-1} (F_x(x_{\frac{1}{2}}) - F_x(x)).$$

Da $(F_x(x_{\frac{1}{2}}))^{-1} F_x(x)$ Lipschitz-stetig mit Konstante L und $\|x - x_{\frac{1}{2}}\| \leq \Delta_0$, so folgt

$$\left\| \frac{\partial}{\partial x} \tilde{\Phi}_{\frac{1}{2}}(x) \right\| \leq L \cdot \Delta_0 < 1, \text{ falls } \Delta_0 \text{ hinreichend klein.}$$

Ergebnis: Für hinreichend gute Startwerte x_0 konvergiert das Newtonverfahren sehr schnell, man zeigt: $\|x_{k+1} - x^*\| \leq C \cdot \|x_k - x^*\|^2$ mit $C > 0$ und C ist eine Konstante \nearrow quadratische Konvergenz.
Das vereinfachte Newtonverfahren konvergiert, sofern $\tilde{J} = F_x(x_{\frac{1}{2}})$ verwendet wird, falls $\|x_{\frac{1}{2}} - x^*\| > \Delta_0$.

Praktisch: Abschätzung der Konvergenzgeschwindigkeit mit Banach'schem Fixpunktsatz, Neuberechnung der Jacobimatrix, falls $\alpha > \alpha_0$ mit einem $\alpha_0 \in (0, 1)$, z.B. $\alpha_0 = 1/4$.

Schätzwert für α :

$$\|x_{k+2} - x_{k+1}\| = \|\tilde{\Phi}(x_{k+1}) - \tilde{\Phi}(x_k)\| \leq \alpha \|x_{k+1} - x_k\|$$

$$\Rightarrow \alpha \approx \alpha_k := \frac{\|x_{k+2} - x_{k+1}\|}{\|x_{k+1} - x_k\|}$$

Abbruch der Iteration, falls $\frac{\alpha_k}{1 - \alpha_k} \|x_{k+1} - x_k\| \leq \text{ATOL} + \text{RTOL} \|x_k\|$ \nearrow vgl. Banach'sches Fixpunktsatz

und $\alpha_k \leq \alpha_0$ mit vorgegebenen Fehlergrenzen ATOL, RTOL für den absoluten und relativen Fehler.

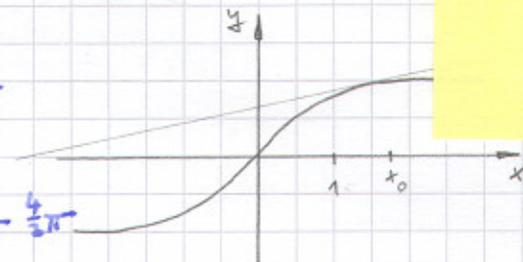
Bemerkung 5.10: Gedämpftes Newtonverfahren.

Arnold

Trotz des sehr guten lokalen Konvergenzverhaltens divergiert das Newtonverfahren häufig, wenn man geeigneten Startwerte x_0 wählt.

Beispiel: $f(x) = \arctan x$, $x_0 = \sqrt{3}$, $\arctan x_0 = \frac{\pi}{3}$

$$x_{k+1} = x_k - \frac{\arctan x_k}{\frac{1}{1+x_k^2}}, \quad x_1 = \sqrt{3} - \frac{4}{3}\pi$$



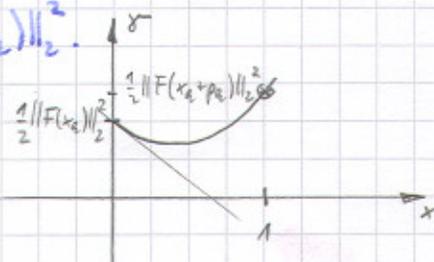
Satz: Modifiziere das Verfahren so, dass $\|F(x_{k+1})\|_2 < \|F(x_k)\|_2$.

Betrachte hierzu $\gamma(\lambda) := \frac{1}{2} \|F(x_k + \lambda p_k)\|_2^2$.

~~Wegen $\gamma'(\lambda) = F(x_k + \lambda p_k)^T p_k$ ist~~

$$\gamma'(0) = F(x_k)^T p_k = 0$$

~~Wegen $\gamma'(\lambda) = F(x_k)^T F(x_k) p$~~



Wegen $\gamma'(\lambda) = F^T(x_k + \lambda p_k) F_x(x_k + \lambda p_k) p_k$ ist

$$\gamma'(0) = F^T(x_k) \cdot (-F(x_k)) = -\|F(x_k)\|_2^2 < 0, \text{ falls } F(x_k) \neq 0.$$

Für hinreichend kleines $\lambda > 0$ ist also stets $\|F(x_k + \lambda p_k)\|_2 < \|F(x_k)\|_2$.

praktisch:

$$\lambda_k^{(0)} := 1, \quad l := 0$$

while $\|F(x_k + \lambda_k^{(l)} p_k)\|_2 > (1 - \frac{1}{2} \lambda_k^{(l)}) \|p_k\|_2$ do

$$\lambda_k^{(l+1)} := c \cdot \lambda_k^{(l)}, \quad l := l+1$$

$$\lambda_k := \lambda_k^{(l)}, \quad x_{k+1} := x_k + \lambda_k p_k$$

typischer Wert: $c = \frac{1}{2}$

↑ 12.01.06
3'

Ist x^* einfache Nullstelle, so ergibt sich für ein $\delta_0 > 0$

$$\lambda_k = 1, \quad (k \geq k_0),$$

d.h., für große k fallen gedämpftes und klassisches Newtonverfahren

zusammen \Rightarrow beide Konvergenzgeschwindigkeit bei vorhandenem globalem Konvergenz

5.3. Freie Minimierungsprobleme

Amold

Bemerkung 5.11: Problemstellung.

geg.: $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, f stetig differenzierbar

ges.: x^* mit $f(x^*) = \min f(x)$

Notwendige Bedingung für lokalen Extremwert:

$$\text{in } \mathbb{R}^1: f'(x^*) = 0$$

$$\text{in } \mathbb{R}^n: \nabla f(x^*) = 0 \text{ mit dem Gradienten } \nabla f(x) := \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_1}(x) \\ \vdots \\ \frac{\partial f}{\partial x_n}(x) \end{pmatrix}$$

Nichtlineares Gleichungssystem $F(x^*) = 0$ mit $F(x) := \nabla f(x)$.

$$\text{Newtonverfahren in } \mathbb{R}^1: x_{k+1} = x_k - \frac{f'(x_k)}{f''(x_k)}$$

$$\text{in } \mathbb{R}^n: x_{k+1} = x_k - (\nabla^2 f(x_k))^{-1} \nabla f(x_k)$$

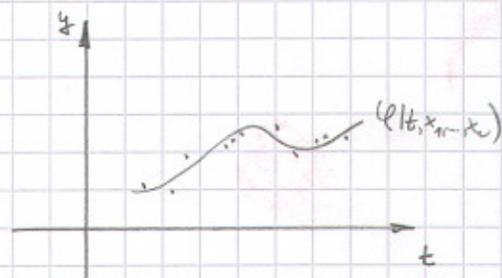
$$\text{mit der Hesse-Matrix } \nabla^2 f(x) = \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}(x) \right)_{i,j=1}^n.$$

Bemerkung 5.12: Nichtlineare Ausgleichsprobleme.

→ vgl. Abschnitt 2.2

ziel: zurückführen auf den linearen Fall

geg.: Daten (t_k, y_k) , $(k=1, \dots, m)$, die
über (vermuteten) funktionalen
Zusammenhang $y = \varphi(t, x_1, \dots, x_n)$
gegeben



ges.: Parameter x_1, \dots, x_n , für die $\varphi(t_k, x_1, \dots, x_n)$
„möglichst gut“ y_k entspricht, $(k=1, \dots, m)$

$$\|F(x)\|_2 \rightarrow \min$$

$$\text{mit } F(x_1, \dots, x_n) = \begin{pmatrix} y_1 - \varphi(t_1, x_1, \dots, x_n) \\ \vdots \\ y_m - \varphi(t_m, x_1, \dots, x_n) \end{pmatrix}$$

Gauß-Newton-Verfahren

Bestimme x_{opt} als Lösung von $\|F(x_k) + F_x(x_k)(x - x_k)\|_2 \rightarrow \min$
 mit den Methoden aus Bemerkung 2.9 oder Bemerkung 2.11c)
 angewandt auf $\|Ax - b\|_2 \rightarrow \min$ mit $A := F_x(x_k)$, $b := F_x(x_k)x_k - F(x_k)$.

Schnelle lokale Konvergenz, falls $\min \|F'(x)\|_2 < 1$. ↗ praktisch interessantes Fall

praktisch: gedämpftes Gauß-Newton-Verfahren

↑ 14.1.04

5.4. Klassische Iterationsverfahren für große lineare Gleichungssysteme

Bemerkung 5.13: Lineare Gleichungssysteme mit schwach besetzter Koeffizientenmatrix.

Direkte Lösungsverfahren

Klassisches Gauß-Algorithmus: $O(\frac{n^3}{3})$ Rechenoperationen

Für große n , ($n > 10^4$) ist die Annahme der (in der Regel vorliegenden)

speziellen Struktur der Koeffizientenmatrix zwingend erforderlich. ↗ ausführlich, mit Matlab-Beispiel

Beispiel: ~~5-Strom~~ 5-Punkte-Diskret-Differenzapproximation von $-u(x, y) = f(x, y)$

Strategie 1: Annahme des Blockstrukturbruchs in direkten Lösungsverfahren für ↑ 18.01.06

schwach besetzte Matrizen. ↗ Beispiel: Bandstruktur, auch: graphentheoretische Hilfsmittel zur optimalen Sortierung von Zeilen und Spalten

Strategie 2: Nähungsweise Lösung des Gleichungssystems mittels iterativer Verfahren.

↗ dies Abbruchkriterium

Strategie 3: Partielles Hintergrund definiert nicht lineares Gleichungssystem,

Sondern eine Klasse von Gleichungssystemen \rightarrow Annahme in der numerischen Lösung, z.B. Mehrgitterverfahren. ↗ vgl. numerische Lösung partieller Differentialgleichung

Bemerkung 5.14: Jacobi- oder Gauß-Seidelverfahren.

geg.: $A = (a_{ij}) \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $b \in \mathbb{R}^n$

ge.: (klassische) Lösung x von $Ax = b$

Komponentenweise Darstellung in Fixpunktform:

Arnold

$$a_{ii} x_i = b_i - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n a_{ij} x_j, \quad (i=1, \dots, n)$$

Algorithmus:

Initialisierung: Anfangsnäherung $x^{(0)}$, $k:=0$

repeat

for $i=1:n$

$$x_i^{(k+1)} := \frac{b_i - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n a_{ij} x_j^{(k)}}{a_{ii}}$$

↑ parallelisierbar

until „Konvergenz“

↑ Aufwand pro Iterationsschritt (Beste-Praxis-Strategie!)

↑ an obiger Fixpunktformulierung erläutern

Matrix Wohlschreibweise: Sei $D := \text{diag } a_{ii} \Rightarrow x^{(k+1)} = D^{-1}(b - (A-D)x^{(k)})$

$$x^{(k+1)} = \Phi(x^{(k)}) \quad \text{mit} \quad \Phi(x) = -D^{-1}(A-D)x + D^{-1}b, \\ \|\Phi_x\| = \|D^{-1}(A-D)\|$$

Gibt es eine Matrixnorm $\|\cdot\|$ mit $\alpha := \|D^{-1}(A-D)\| < 1$, so ist das Verfahren linear konvergent. Konvergenztest:

Matrix- und Vektornorm müssen verträglich sein

$$\frac{\alpha_k}{1-\alpha_k} \|x^{(k+1)} - x^{(k)}\| \leq \text{ATOL} + \text{RTOL} \|x^{(k)}\| \quad \text{vgl. Bem. 5.9}$$

mit $\alpha_k := \frac{\|x^{(k+1)} - x^{(k)}\|}{\|x^{(k)} - x^{(k-1)}\|}$. Beispiel Modellproblem: $\alpha = 1 - \pi^2 h^2 + O(h^4)$

Hinreichend für Konvergenz: A stabil diagonaldominant, d.h. $\sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n |a_{ij}| < |a_{ii}|, \quad (i=1, \dots, n)$

$$\Rightarrow \|D^{-1}(A-D)\|_{\infty} < 1.$$

Anfangsnäherung: z.B. $x^{(0)} := 0 \Rightarrow x_i^{(1)} = \frac{b_i}{a_{ii}}, \quad (i=1, \dots, n)$

Speicherbedarf: n Werte der Länge n

$x_i^{(k+1)}$ wird auf dem Platz von $x_i^{(k)}$ abgespeichert.

Bemerkung 5.15: Gauß-Seidel- oder Einzelschrittverfahren, überrelaxation. Abund

Ersetze im Jacobi-Verfahren $x_i^{(k+1)} = \dots$ durch

$$x_i^{(k+1)} := \frac{b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^n a_{ij} x_j^{(k)}}{a_{ii}}, \quad (i=1, \dots, n)$$

↑ auch: Einzelschritt
Gauß-Seidel-Verfahren

pro Iterationsschritt gleiches Aufwand wie im Jacobi-Verfahren,

aber i. Allg. doppelt so schnelle Konvergenz, jedoch: nicht parallelisierbar.

Beispiel Modellproblem: $\alpha = 1 - 2\pi^2 h^2 + O(h^4)$

↑ 28.04.06

Überrelaxation (Successive overrelaxation, SOR)

$$x_i^{(k+1)} := x_i^{(k)} + \omega \frac{b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^n a_{ij} x_j^{(k)}}{a_{ii}}, \quad (i=1, \dots, n)$$

mit geeignetem Überrelaxationsparameter ω . Meist: $\omega \in (1, 2)$.

Für optimales ω & Konvergenz i. Allg. um eine Größenordnung schneller als beim Gauß-Seidel-Verfahren. \nearrow Stör/Bubisch, Kapitel 8

Beispiel Modellproblem: $\omega_{opt} = 2 - 2\pi h + O(h^2)$, $\alpha(\omega_{opt}) = 1 - 2\pi h + O(h^2)$ ↑ 21.11.

Bemerkung 5.16: CG-Verfahren.

geg.: $A = (a_{ij}) \in \mathbb{R}^{n \times n}$, A symmetrisch positiv definit, $b \in \mathbb{R}^n$

\nearrow Beispiel: Modellproblem

ges.: Lösung x von $Ax = b$

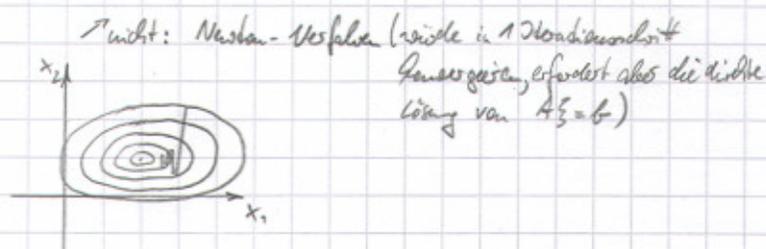
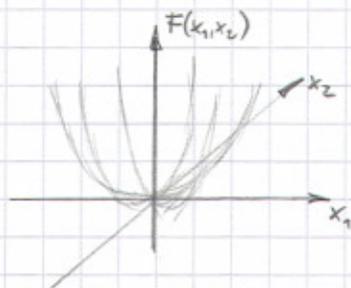
Analyse zu Minimierungsproblemen: $Ax = b \Leftrightarrow F(x) = \min_{\xi \in \mathbb{R}^n} F(\xi)$

$$\text{mit } F(\xi) := \frac{1}{2} (A\xi - b)^T (A\xi - b),$$

da mit A ist auch A^T symmetrisch positiv definit, also $F(\xi) = 0 \Leftrightarrow A\xi = b$.

Lösungsansatz: Minimierung von F mittels eines iterativen Verfahrens, das pro Iterationsschritt nur geringen Aufwand erfordert

$n=2$



\nearrow nicht: Newton-Verfahren (würde in 1 Iterationsschritt konvergieren, erfordert aber die dritte Lösung von $A\xi = b$)

Idee: Verfahren des steilsten Abstiegs.

Wunder

geg.: $x^{(k)}$ mit $0 \neq \nabla F(x^{(k)})$ \nearrow sonst: notwendige Bedingung für lokales Extremum erfüllt

ges.: Richtung $d^{(k)}$ mit $F(x^{(k)} + s d^{(k)}) \leq F(x^{(k)} + s d)$, $(s \rightarrow 0)$
für jede Richtung $d \in \mathbb{R}^n$ mit $\|d\|_2 = \|\nabla F(x^{(k)})\|_2$

$$\begin{aligned} F(x^{(k)} + s \cdot d) &= F(x^{(k)}) + s \nabla F(x^{(k)})^T d + \mathcal{O}(s^2) \\ &\stackrel{\text{Schwarz'sche Ungleichung, Gleichheit für } d = -\nabla F(x^{(k)})}{\geq} F(x^{(k)}) - s \|\nabla F(x^{(k)})\|_2 \|d\|_2 + \mathcal{O}(s^2) \\ &= F(x^{(k)}) - s \|\nabla F(x^{(k)})\|_2^2 + \mathcal{O}(s^2) \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \underline{d^{(k)} = -\nabla F(x^{(k)}) = r_k := b - Ax^{(k)}} \quad \dots \text{Gradientenverfahren}$$

\nearrow Wahl des optimalen Schrittweite $s^{(k)}$: Minimierung einer skalaren quadratischen Funktion

Einfluss zu implementieren, aber oft nur langsame Konvergenz.

\nearrow Nachteil: Schritt $x^{(k)} \rightarrow x^{(k+1)}$ berücksichtigt nur Information in $x^{(k)}$, aber nicht in $x^{(l)}$ mit $l < k$.

Alternative: $x^{(k+1)} = x^{(k)} + s_0 r_0 + s_1 r_1 + \dots + s_k r_k$

mit geeigneten $s_i \in \mathbb{R}$ und $r_i := b - Ax^{(i)}$, $(i = 0, 1, \dots, k)$

Bestimmung der s_0, s_1, \dots, s_k so, dass $F(x^{(k+1)}) \rightarrow \min$.

Ergebnis: Verfahren der konjugierten Gradienten (engl.: conjugate gradient, CG-Verfahren, Hestenes und Steiha, 1972)

\nearrow 26.02.05

Algorithmus: Initialisierung: Wähle Startwert $x^{(0)} \in \mathbb{R}^n$, $k := 0$,

$$p_0 := r_0 := b - Ax^{(0)}$$

~~Repeat~~ while $p_k \neq 0$

$$a_k := \frac{r_k^T r_k}{p_k^T A p_k}, \quad x^{(k+1)} := x^{(k)} + a_k p_k, \quad \nearrow \sum_{i=0}^k s_i r_i$$

$$r_{k+1} := r_k - a_k A p_k, \quad b_k := \frac{r_{k+1}^T r_{k+1}}{r_k^T r_k}$$

$$p_{k+1} := r_{k+1} + b_k p_k$$

Aufwand pro Iterationsschritt: 1 Matrix-Vektor-Produkt Ax_k ,
2 Skalarprodukte, 3 Additionen. Skalares Vielfaches von Vektoren.

Skalard

→ trotz komplizierteres Struktur der Householdermatrix Aufwand pro Schritt vergleichbar mit klassische Iterationsverfahren

Konvergenz: (i) Bezüglich des durch A induzierten Skalarprodukts

$\langle \xi, \eta \rangle_A := \xi^T A \eta$ sind die Vektoren p_k orthogonal

(„ A -~~konjugiert~~ konjugiert“ \rightsquigarrow „konjugierte Gradienten“) \rightarrow Gauss/Reich

(ii) Konvergenz nach höchstens n Schritten \rightarrow höchstens n A -konjugierte Vektoren p_k (exakte Mathematik)

\rightarrow praktisch interessant: Konvergenz nach $k \ll n$ Schritten

$$(iii) \quad \frac{\|x^{(k)} - x\|_A}{\|x^{(0)} - x\|_A} \leq 2 \left(\frac{\sqrt{\kappa_2(A)} - 1}{\sqrt{\kappa_2(A)} + 1} \right)^k$$

\rightarrow Konvergenz umso schneller,
je kleiner $\kappa_2(A)$, aber:
Modellproblem $\kappa_2(A) = \mathcal{O}(N^2)$