Universität Heidelberg
G. Kanschat, S. Meggendorfer

Abgabe: **bis zum 24.07.2019**

Programmierpraktikum Nr. 3
zur Vorlesung Einführung in die Numerik, Sommer 2019

Aufgabe 3.1: Newton-Verfahren mit Schrittweitensteuerung

In dieser Übung geht es um die Berechnung von Nullstellen nichtlinearer Funktionen $f\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$. Dazu werden wir im Folgenden das mehrdimensionale Newton-Verfahren verwenden:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \left(J(x^{(k)})\right)^{-1} f(x^{(k)}),$$

wobei $J(x) = \nabla f(x)$ die Gradientenmatrix (auch Jacobi-Matrix genannt) von f mit Einträgen $J_{ik} = \partial f_i / \partial x_k$ bezeichnet.

Wir wollen mit dieser Methode eine Lösung $x^\star \in \mathbb{R}^3$ des nichtlinearen Gleichungssystems $g(x) = b$ berechnen, gegeben durch

$$\begin{pmatrix} 3x_1 - \cos(x_2 x_3) \\ x_1^2 - 81(x_2 + 0.1)^2 + \sin(x_3) \\ e^{-x_1 x_2} + 20x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.5 \\ -1.06 \\ \frac{10\pi - 3}{3} \end{pmatrix}$$

Lösen Sie dazu folgende Aufgaben:

(a) Die Jacobi-Matrix der Funktion $f(x) = g(x) - b$ ist gegeben durch

$$J(x) = \begin{pmatrix} 3 & x_3 \sin(x_2 x_3) & x_2 \sin(x_2 x_3) \\ 2x_1 & -162(x_2 + 0.1) & \cos(x_3) \\ -x_2 e^{-x_1 x_2} & -x_1 e^{-x_1 x_2} & 20 \end{pmatrix}.$$

Implementieren Sie `f(x)` und `J(x)` als eigenständige Funktionen, so dass die Argumente und Rückgabewerte dreidimensionale Vektoren bzw. 3×3-Matrizen sind.

(b) Implementieren Sie das Newton-Verfahren in der Form

$$\begin{aligned} J(x^{(k)}) v^{(k)} &= f(x^{(k)}) \\ x^{(k+1)} &= x^{(k)} - v^{(k)}. \end{aligned} \tag{3.1}$$

Wählen Sie als Abbruchkriterium, wenn die Norm des Residuums kleiner ist als 10^{-8}, also wenn

$$\|f(x^{(k)})\|_2 < 10^{-8}.$$

Für das Lösen des linearen Gleichungssystems dürfen Sie ein Programm Ihrer Wahl benutzen.

(c) Führen Sie die Newton-Iteration beginnend mit den Startwerten

$$x^{(0)} = (-1, -1, -1)^T, \qquad x^{(0)} = (0, 0, 0)^T, \qquad x^{(0)} = (6, 6, 6)^T, \qquad x^{(0)} = (100, 100, 100)^T$$

durch. Geben Sie in jedem Schritt der Iteration das berechnete Residuum aus und visualisieren Sie die Entwicklung der Residuen in einem logarithmischen Plot. Lassen Sie sich außerdem nach Abbruch des Verfahrens die Lösung und die Gesamtanzahl an Iterationen ausgeben.

(d) Implementieren Sie die Schrittweitensteuerung für das Newton-Verfahren, indem Sie ein geeignetes λ_k berechnen für den Korrektur-Schritt (3.1)

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \lambda_k v^{(k)}.$$

Dazu führen Sie folgende "innere" Iteration in jedem Newtonschritt k durch:

$\lambda_{k,0} = 1$ und $i = 0$.
while $\|f\left(x^{(k)} - \lambda_{k,i} v^{(k)}\right)\| > \|f(x^{(k)})\|$ **do**
  $\lambda_{k,i+1} = \lambda_{k,i}/2$
  $i = i + 1$
end while

Wiederholen Sie nun die Tests aus Aufgabenteil (c) und diskutieren die Ergebnisse auf Grundlage der Ausgaben sowie der Theorie.