Beiträge zur Numerischen Mathematik
5 (1976), 7–18

Konvergenzbeschleunigung des Newton-Verfahrens bei gewissen Gleichungssystemen

Götz Alefeld

1. Einleitung

Bekanntlich liefert das Newton-Verfahren

$$x^{k+1} = x^k - F'(x^k)^{-1}\, Fx^k, \qquad k = 0, 1, 2, \ldots,$$

zur Auflösung der Gleichung $Fx = 0$ mit einer konvexen Abbildung $F\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ unter der Voraussetzung, daß $F'(x)^{-1}$ für alle $x \in \mathbb{R}^n$ existiert und nichtnegativ ist, für beliebiges $x^0 \in \mathbb{R}^n$ eine monotone Folge

$$x^1 \geqq x^2 \geqq x^3 \geqq \cdots \geqq x^k \geqq x^{k+1} \geqq \cdots,$$

die gegen x^* konvergiert, falls die Gleichung $Fx = 0$ eine (notwendig eindeutige) Lösung x^* besitzt (vgl. etwa [1], S. 163, oder [2], S. 453).

Obwohl das Newton-Verfahren (unter einigen zusätzlichen Voraussetzungen) quadratisch konvergiert, kann die Verkleinerung des Fehlers in den Anfangsschritten nur gering sein. Dieses Verhalten des Fehlers ist auch bei anderen Verfahren höherer Ordnung bekannt, und es wurden in der Vergangenheit speziell bei der Anwendung des Newton-Verfahrens zur Auflösung einer Gleichung mit einer Unbekannten Möglichkeiten zur Konvergenzbeschleunigung in den Anfangsschritten angegeben. Wir betrachten etwa ein Polynom $p(x)$ mit positivem führenden Koeffizienten, dessen Nullstellen reell und einfach sind. Bezeichnet x^* die größte Nullstelle, so konvergiert das Newton-Verfahren für jedes $x^0 \geqq x^*$ gegen x^*. Ist $x^0 \gg x^*$ gewählt, so erhält man

$$\begin{aligned} x^1 &= x^0 - \frac{p(x^0)}{p'(x^0)} = x^0 - \frac{a_n(x^0)^n + a_{n-1}(x^0)^{n-1} + \cdots}{na_n(x^0)^{n-1} + (n-1)\, a_{n-1}(x^0)^{n-2} + \cdots} \\ &\approx \left(1 - \frac{1}{n}\right) x^0, \end{aligned}$$

und x^1 ist für größere n eine nur geringfügig bessere Näherung für x^* als x^0. Unabhängig voneinander haben Kahan und Maehly (vgl. [4], S. 480) einen einfachen Trick zur Beschleunigung des Newton-Verfahrens in dieser Situation angegeben. Das Vorgehen besteht in der Berechnung von neuen Näherungen nach der Formel

$$x^{k+1} = x^k - 2\,\frac{p(x^k)}{p'(x^k)}, \qquad k = 0, 1, 2, \ldots$$

Mit dem gewöhnlichen Newton-Verfahren wird weiter gerechnet, sobald $p(x^k) \leqq 0$ für ein $k_0 \geqq 0$ wird. Auf diese Weise erhält man eine Folge

$$x^1 \geqq x^2 \geqq \cdots \geqq x^{k_0-1} \geqq x^{k_0+1} \geqq \cdots \geqq x^*,$$

die im allgemeinen erheblich schneller gegen die Polynomwurzel x^* konvergiert als die mit dem Newton-Verfahren berechnete. Eine eingehende Darstellung dieses Sachverhaltes findet man in [3], S. 213ff.

Die Absicht dieser Arbeit besteht in einer weitgehenden Übertragung dieser konvergenzbeschleunigenden Maßnahmen bei der Anwendung des Newton-Verfahrens auf Gleichungssysteme des eingangs beschriebenen Typs. Im nächsten Abschnitt stellen wir die Hilfsmittel dazu bereit. Abschließend sind einige numerische Ergebnisse angegeben.

Ohne auf Einzelheiten einzugehen, bemerken wir, daß sich die angegebenen Ergebnisse auch in allgemeineren Räumen beweisen lassen.

2. Hilfsmittel und Lemmata

Im $\mathbb{R}^k$ legen wir die natürliche Halbordnung zugrunde, d. h.

$$x \leqq y \Leftrightarrow x_i \leqq y_i,\ i = 1(1)k \qquad \bigl(x = (x_i)\bigr).$$

Eine Abbildung $F\colon \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}^n$ heißt *ordnungskonvex*, falls

$$F\bigl(\lambda x + (1-\lambda)\, y\bigr) \leqq \lambda F x + (1-\lambda)\, F y, \qquad \lambda \in (0, 1),$$

für alle vergleichbaren Elemente $x, y \in \mathbb{R}^m$ gilt. Gilt diese Ungleichung für alle $x, y \in \mathbb{R}^m$, so heißt F *konvex*.

Ist $F\colon \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}^n$ Gateaux(G-)differenzierbar, so sind die folgenden Aussagen äquivalent (vgl. [2], S. 448):

F ist (ordnungs-)konvex;

$Fy - Fx \geqq F'(x)\,(y - z)$ für alle (vergleichbaren) $x, y \in \mathbb{R}^m$;

$\bigl(F'(y) - F'(x)\bigr)\,(y - x) \geqq 0$ für alle (vergleichbaren) $x, y \in \mathbb{R}^m$.

Ist die G-Ableitung $F'(x)$ isoton, d. h. $F'(x) \geqq F'(y)$ für $x \geqq y$, so folgt mit Hilfe der letzten Ungleichung die Ordnungskonvexität von F.

Führt man in der Menge $L(\mathbb{R}^n)$ der linearen Abbildungen von $\mathbb{R}^n$ nach $\mathbb{R}^n$ die natürliche Halbordnung

$$A \leqq B \Leftrightarrow a_{ij} \leqq b_{ij},\ i, j = 1(1)n \qquad \bigl(A = (a_{ij})\bigr)$$

ein, so läßt sich die obige Definition der (Ordnungs-)Konvexität auf die Abbildung $F'\colon \mathbb{R}^n \to L(\mathbb{R}^n)$ anwenden.

Wir benötigen die Aussagen des folgenden Lemmas, dessen Beweis man z. B. in [1], S. 163, findet.

Lemma 1. *Es sei* $F: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ *eine konvexe und G-differenzierbare Abbildung, für die* $F'(x)^{-1}$ *für alle* $x \in \mathbb{R}^n$ *existiert und* $F'(x)^{-1} \geqq 0$ *gilt.* $Fx = 0$ *besitze eine (notwendig eindeutige) Lösung* $x^* \in \mathbb{R}^n$. *Dann gilt:*

1. *Aus* $Fx \geqq 0$, $x \in \mathbb{R}^n$, *folgt* $x \geqq x^*$.
2. *Für* $y = x - F'(x)^{-1} Fx$, $x \in \mathbb{R}^n$, *gilt* $Fy \geqq 0$.

Lemma 2. *Die Abbildung* $F: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ *sei konvex und* F *besitze eine halbstetige zweite G-Ableitung* (vgl. [2], S. 61). *Die G-Ableitung* $F': \mathbb{R}^n \to L(\mathbb{R}^n)$ *sei ordnungskonvex. Für alle* $x \in \mathbb{R}^n$ *existiere* $F'(x)^{-1}$, *und es sei* $F'(x)^{-1} \geqq 0$. $Fx = 0$ *besitze eine (notwendig eindeutige) Lösung* $x^* \in \mathbb{R}^n$. *Es sei* $Fr \geqq 0$ *für ein* $r \in \mathbb{R}^n$. *Dann bestehen für die Vektoren*

$$s = r - F'(r)^{-1} Fr,$$
$$t = r - 2F'(r)^{-1} Fr,$$
$$u = t - F'(t)^{-1} Ft$$

die Ungleichungen

a) $x^* \leqq s \leqq r,$

b) $x^* \leqq t \leqq s,\qquad$ *falls* $Ft \geqq 0,$

c) $x^* \leqq u \leqq s,\qquad Fu \geqq 0.$

Beweis.

Zu a). Wegen $Fr \geqq 0$, $F'(r)^{-1} \geqq 0$ gilt $s \leqq r$, und Lemma 1 liefert $x^* \leqq s$.

Zu b). Wegen $s - t = F'(r)^{-1} Fr \geqq 0$ ist $t \leqq s$. Ist $Ft \geqq 0$, so liefert die erste Aussage von Lemma 1 wiederum $x^* \leqq t$.

Zu c). Die zweite Aussage von Lemma 1 ergibt $Fu \geqq 0$, woraus wiederum $x^* \leqq u$ folgt. Um den Beweis zu vervollständigen, müssen wir noch $u \leqq s$ zeigen. Dazu zeigen wir, daß für die beiden Vektoren

$$a = Fs - Fr + F'(r)(r - s) = Fs$$

und

$$b = Fs - Ft - F'(t)(s - t)$$

die Ungleichung $a \geqq b$ besteht. Ist dies der Fall, so gilt

$$a - b = Ft + F'(t)(s - t) \geqq 0,$$

oder, wegen $F'(t)^{-1} \geqq 0$,

$$s \geqq t - F'(t)^{-1} Ft = u.$$

Wir beweisen jetzt die Beziehung $a \geqq b$. Da F zweimal G-differenzierbar ist, folgt durch Anwendung von 3.39 in [2], S. 79, daß F' halbstetig ist. Deshalb erhält man durch Anwendung des Mittelwertsatzes 3.2.7 in [2], S. 71,

$$a = \int_0^1 \left\{F'\big(r + \tau(s - r)\big) - F'(r)\right\}(s - r)\, d\tau\,,$$

$$b = \int_0^1 \left\{F'\big(t + \tau(s - t)\big) - F'(t)\right\}(s - t)\, d\tau\,.$$

Da F'' nach Voraussetzung halbstetig ist, erhält man durch Anwendung von 3.3.7 in [2], S. 78,

$$a = \int_0^1 \int_0^1 \tau F''\big(r + \sigma\tau(s - r)\big)\,(s - r)^2\, d\sigma\, d\tau\,,$$

$$b = \int_0^1 \int_0^1 \tau F''\big(t + \sigma\tau(s - t)\big)\,(s - t)^2\, d\sigma\, d\tau$$

und daraus wegen $s - r = -(s - t)$

$$a - b = \int_0^1 \int_0^1 \tau\left\{F''\big(r - \sigma\tau(s - t)\big) - F''\big(t + \sigma\tau(s - t)\big)\right\}(s - t)^2\, d\sigma\, d\tau\,.$$

Wegen $0 \leqq \sigma\tau \leqq 1$ folgt

$$r - t \geqq \sigma\tau(r - t) = 2\sigma\tau(s - t) \quad \text{oder} \quad r - \sigma\tau(s - t) \geqq t + \sigma\tau(s - t)\,.$$

Nach Voraussetzung ist F' ordnungskonvex, so daß

$$\left\{F''\big(r - \sigma\tau(s - t)\big) - F''\big(t + \sigma\tau(s - t)\big)\right\}\left\{r - \sigma\tau(s - t) - \big(t + \sigma\tau(s - t)\big)\right\}$$
$$= 2(1 - \sigma\tau)\left\{F''\big(r - \sigma\tau(s - t)\big) - F''\big(t + \sigma\tau(s - t)\big)\right\}(s - t) \geqq 0$$

gilt. Wegen $1 - \sigma\tau \geqq 0$ und $s - t \geqq 0$ gilt dann auch

$$\left\{F''\big(r - \sigma\tau(s - t)\big) - F''\big(t + \sigma\tau(s - t)\big)\right\}(s - t)^2 \geqq 0,$$

woraus die Behauptung $a - b \geqq 0$ folgt.

Lemma 3. *Es sei $F\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ eine G-differenzierbare Abbildung, für die $F'(x)^{-1}$ für alle $x \in \mathbb{R}^n$ existiert und $F'(x)^{-1} \geqq 0$ gilt. Die G-Ableitung sei isoton. Für zwei Vektoren u und v gelte $u \leqq v$, $Fu \geqq 0$, $Fv \geqq 0$. Es sei*

$$c = u - F'(u)^{-1}\, Fu\,, \qquad d = v - F'(v)^{-1}\, Fv\,.$$

Dann gilt $c \leqq d$.

Beweis. Aus der Isotonie der Ableitung folgt die Ordnungskonvexität von F. Daher gilt für u und v

$$Fu - Fv \geqq F'(v)\,(u - v)\,,$$

woraus wegen $F'(v)^{-1} \geqq 0$ die Ungleichung

$$-F'(v)^{-1}\{F(v) - Fu\} \geqq u - v$$

folgt. Aus $F'(u) \leqq F'(v)$ folgt $F'(v)^{-1} \leqq F'(u)^{-1}$, und wegen $Fu \geqq 0$ gilt

$$F'(u)^{-1}\,Fu \geqq F'(v)^{-1}\,Fu.$$

Mit Hilfe dieser beiden Ungleichungen erhält man

$$\begin{aligned} d - c &= v - u - F'(v)^{-1}\,Fv + F'(u)^{-1}\,Fu \\ &\geqq v - u - F'(v)^{-1}\,Fv + F'(v)^{-1}\,Fu \\ &= v - u - F'(v)^{-1}\{Fv - Fu\} \geqq 0. \end{aligned}$$

Lemma 4. *Es sei $F\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ eine G-differenzierbare Abbildung, für die $F'(x)^{-1}$ für alle $x \in \mathbb{R}^n$ existiert und $F'(x)^{-1} \geqq 0$ gilt. Die G-Ableitung $F'(x)$ sei isoton. Für zwei Elemente z^0, x^0 mit $z^0 \leqq x^0$ sei $Fz^0 \geqq 0$, $Fx^0 \geqq 0$. Die Folgen $\{z^k\}$ und $\{x^k\}$ werden nach den Vorschriften*

$$z^{k+1} = z^k - 2F'(z^k)^{-1}\,Fz^k, \qquad k = 0, 1, 2, \ldots,$$

bzw.

$$x^{k+1} = x^k - F'(x^k)^{-1}\,Fx^k, \qquad k = 0, 1, 2, \ldots,$$

berechnet. Es sei $Fz^k \geqq 0$ für $k = 0, 1, \ldots, k_0$ ($k_0 = \infty$ ist zugelassen). Dann gilt $z^k \leqq x^k$, $k = 0, 1, \ldots, k_0$.

Beweis. Wir zeigen zunächst, daß die Elemente von $\{x^k\}$ eine monoton fallende Folge

$$x^0 \geqq x^1 \geqq x^2 \geqq \cdots \geqq x^k \geqq x^{k+1} \geqq \cdots \quad \text{mit} \quad Fx^k \geqq 0, \qquad k = 0, 1, 2, \ldots,$$

bilden. Ist $Fx^k \geqq 0$, was nach Voraussetzung für $k = 0$ richtig ist, so folgt für x^{k+1}

$$x^{k+1} = x^k - F'(x^k)^{-1}\,Fx^k \leqq x^k$$

und auf Grund der aus der Isotonie der Ableitung $F'(x)$ folgenden Ordnungskonvexität von F

$$Fx^{k+1} \geqq Fx^k + F'(x^k)\,(x^{k+1} - x^k) = 0.$$

Es sei nun $Fz^k \geqq 0$, $Fx^k \geqq 0$ für $z^k \leqq x^k$, was nach Voraussetzung für $k = 0$ richtig ist. Auf Grund von Lemma 3 gilt dann für den Vektor $h = z^k - F'(z^k)^{-1}\,Fz^k$ die Ungleichung $h \leqq x^{k+1}$, und wegen $h \geqq z^{k+1}$ erhält man

$$z^{k+1} \leqq x^{k+1}.$$

Mit der oben gezeigten Beziehung $Fx^k \geqq 0$ für alle k ist der Beweis abgeschlossen.

3. Anwendungen

Die im vorangehenden Abschnitt angegebenen Aussagen wollen wir nun verwenden, um das Newton-Verfahren zur Auflösung der Gleichung $Fx = 0$ zu beschleunigen. Dabei machen wir über F die folgenden

Voraussetzungen: Es sei $F: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ eine konvexe Abbildung, die stetig G-differenzierbar ist. Für jedes $x \in \mathbb{R}^n$ existiere $F'(x)^{-1}$ mit $F'(x)^{-1} \geqq 0$. $F'(x)$ sei isoton und ordnungskonvex. Darüber hinaus existiere die zweite G-Ableitung und diese sei halbstetig. Die Gleichung $Fx = 0$ besitze eine (notwendig eindeutige) Lösung x^*.

Bemerkungen zu den Voraussetzungen:

1. Die Stetigkeit der G-Ableitung hat die Frechét-Differenzierbarkeit zur Folge, woraus wiederum die Stetigkeit von F folgt. Die Stetigkeit von F ist auch Konsequenz der Konvexität von F.

2. Als konvexe Abbildung ist F ordnungskonvex. Die Ordnungskonvexität ist auch Folge der vorausgesetzten Isotonie der Ableitung.

Unter den genannten Voraussetzungen über F sind speziell die Voraussetzungen des Satzes 8.3.4 in [1], S. 163, erfüllt, so daß man mit dem Newton-Verfahren

$$x^{k+1} = x^k - F'(x^k)^{-1} Fx^k, \qquad k = 0, 1, 2, \ldots,$$

für beliebiges $x^0 \in \mathbb{R}^n$ eine Folge

$$x^1 \geqq x^2 \geqq \cdots \geqq x^k \geqq x^{k+1} \geqq \cdots \geqq x^* \quad \text{mit} \quad Fx^k \geqq 0, \qquad k \geqq 1,$$

erhält, für die $\lim\limits_{k\to\infty} x^k = x^*$ gilt. Ist $Fx^0 \geqq 0$, so gilt auch $x^0 \geqq x^1$.

Die Konvergenz der Folge $\{x^k\}_{k=0}^{\infty}$ kann nun folgendermaßen „beschleunigt" werden:

Falls $Fx^0 \geqq 0$ gilt, setzen wir $y^0 = x^0$ und berechnen eine Folge $\{y^k\}_{k=0}^{k_0+1}$ mit Hilfe der Formel

$$y^{k+1} = y^k - 2F'(y^k)^{-1} Fy^k, \qquad k = 0, 1, 2, \ldots, k_0.$$

k_0 bestimmt sich aus den Bedingungen

$$Fy^k \geqq 0, \qquad k = 0, 1, \ldots, k_0, \qquad Fy^{k_0+1} \ngeqq 0$$

($k_0 = \infty$ ist zugelassen).

Ist $Fx^0 \ngeqq 0$, so setzen wir $y^0 := x^0$, $y^1 := y^0 - F'(y^0)^{-1} Fy^0$ (es gilt dann $Fy^1 \geqq 0$). Die restlichen Glieder der Folge $\{y^k\}_{k=0}^{k_0+1}$ werden wie vorher berechnet.

Unabhängig davon, ob $Fx^0 \geqq 0$ ist oder nicht, erhält man für die so berechnete Folge $\{y^k\}_{k=0}^{k_0+1}$ auf Grund der Aussage b) aus Lemma 2

$$y^1 \geqq y^2 \geqq \cdots \geqq y^k \geqq y^{k+1} \geqq \cdots$$

und

$$y^k \geqq x^*, \qquad k = 1, 2, \ldots, k_0.$$

(Falls $Fx^0 \geqq 0$ ist, gelten diese Ungleichungen auch für $k = 0$.)

Es sind nun zwei Fälle zu unterscheiden:

1. $k_0 = \infty$, d. h. $Fy^k \geqq 0$ für alle $k \geqq 1$. Dann besitzt die monoton fallende und beschränkte Folge $\{y^k\}_{k=1}^{\infty}$ einen Grenzwert y^*, für den

$$Fy^* = \lim_{k\to\infty} Fy^k = \frac{1}{2} \lim_{k\to\infty} F'(y^k)\,(y^k - y^{k+1}) = 0,$$

also $x^* = y^*$, gilt. Auf Grund von Lemma 4 besteht zwischen den Gliedern der mit dem Newton-Verfahren berechneten Folge $\{x^k\}_{k=0}^{\infty}$ und den Gliedern der Folge $\{y^k\}_{k=0}^{\infty}$ die Beziehung

$$x^* \leqq y^k \leqq x^k, \qquad k = 1, 2, \ldots$$

(Falls $Fx^0 \geqq 0$ ist, gelten diese Ungleichungen auch für $k = 0$.)

2. $k_0 < \infty$, d. h., es gilt $Fy^k \geqq 0$, $k = 1, 2, \ldots, k_0$, während die Ungleichung $Fy^{k_0+1} \geqq 0$ nicht erfüllt ist. In diesem Fall berechnen wir eine Folge $\{y^k\}_{k=0}^{\infty}$ wie folgt: Die Glieder y^k, $k = 0, 1, \ldots, k_0 + 1$, werden wie oben berechnet. Die restlichen Glieder werden mit Hilfe des Newton-Verfahrens

$$y^{k+1} = y^k - F'(y^k)^{-1}\, Fy^k, \qquad k = k_0 + 1, k_0 + 2, \ldots,$$

berechnet.

Setzen wir

$$w = y^{k_0} - F'(y^{k_0})^{-1}\, Fy^{k_0},$$

so gilt auf Grund von Lemma 2, Aussage c),

$$x^* \leqq y^{k_0+2} \leqq w, \qquad Fy^{k_0+2} \geqq 0.$$

Wegen $w \leqq y^{k_0}$ erhält man die monotone Folge

$$y^1 \geqq y^2 \geqq \cdots \geqq y^{k_0} \geqq y^{k_0+2} \geqq y^{k_0+3} \geqq \cdots \geqq x^*,$$

die wiederum nach Satz 8.3.4 in [1] gegen x^* konvergiert. Auf Grund von Lemma 4 besteht für die Newton-Näherungen $x^1, x^2, \ldots, x^{k_0}$ und die Näherungen $y^1, y^2, \ldots, y^{k_0}$ die Ungleichung

$$y^k \leqq x^k, \qquad k = 1, 2, \ldots, k_0.$$

Durch nochmalige Anwendung von Lemma 4 erhält man die Ungleichung $w \leqq x^{k_0+1}$, also $y^{k_0+2} \leqq x^{k_0+1}$, und damit — wiederum auf Grund von Lemma 4 —

$$y^{k_0+1+\nu} \leqq x^{k_0+\nu}, \qquad \nu = 1, 2, \ldots$$

Setzen wir

$$\bar{y}^k = \begin{cases} y^k & \text{für } k = 0(1)k_0, \\ y^{k+1} & \text{für } k > k_0, \end{cases}$$

so gilt also

$$\bar{y}^k \leqq x^k, \qquad k \geqq 1.$$

(Ist $Fx^0 \geqq 0$, so besteht diese Ungleichung auch für $k = 0$.)

Die Folge $\{\bar{y}^k\}_{k=1}^{\infty}$ konvergiert also (in der Halbordnung) mindestens genau so schnell wie die Folge $\{x^k\}_{k=1}^{\infty}$ gegen x^*.

Bei der praktischen Rechnung tritt gewöhnlich der zweite Fall ein. Die Berechnung eines Gliedes $\tilde{y}^k$ erfordert (abgesehen von n Multiplikationen mit 2) den gleichen Aufwand wie die Berechnung einer Newton-Näherung, nämlich die Auflösung eines linearen Gleichungssystems. Die oben im Fall 2 angegebenen Ungleichungen zeigen, daß man zum Erreichen einer vorgegebenen Genauigkeit

$$x^* - \tilde{y}^k \leqq \varepsilon \qquad \big(\varepsilon = (\varepsilon_i)\big)$$

höchstens ein lineares Gleichungssystem mehr auflösen muß als zur Erzielung der gleichen Genauigkeit mit dem Newton-Verfahren. Bei ungünstig gewählten Startvektoren wird man allerdings erwarten, daß durch die anfangs durchgeführten „Doppel-Newton-Schritte" insgesamt weniger Gleichungssysteme aufzulösen sind. Dies wird durch die nachfolgenden numerischen Ergebnisse bestätigt.

4. Numerische Beispiele

Wir betrachten die Aufgabe, numerische Näherungen für die Lösung der Randwertaufgabe

$$y'' = f(t, y), \qquad y(0) = \alpha, \qquad y(1) = \beta$$

zu bestimmen. Die Existenz und Eindeutigkeit einer Lösung $y(t)$ ist gesichert, falls f stetig und $\frac{\partial}{\partial y} f(t, y) \geqq 0$ ist, was im folgenden vorausgesetzt wird. Die Anwendung des gewöhnlichen Differenzenverfahrens führt auf die n Gleichungen

$$-x_{i-1} + 2x_i - x_{i+1} + h^2 f(t_i, x_i) = 0, \qquad i = 1(1)n,$$

mit $t_i = ih$, $i = 1(1)n$, $(n+1)\,h = 1$ und $x_0 = \alpha$, $x_{n+1} = \beta$. x_i ist eine Näherung für $y(t_i)$. Mit

$$x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ x_n \end{pmatrix}, \qquad g(x) = \begin{pmatrix} f(t_1, x_1) \\ f(t_2, x_2) \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ f(t_n, x_n) \end{pmatrix}, \qquad b = \begin{pmatrix} \alpha \\ 0 \\ \cdot \\ \cdot \\ 0 \\ \beta \end{pmatrix}$$

und

$$A = \begin{pmatrix} 2 & -1 & & & & 0 \\ -1 & 2 & -1 & & & \\ & \cdot & \cdot & \cdot & & \\ & & \cdot & \cdot & \cdot & \\ & & & -1 & 2 & -1 \\ 0 & & & & -1 & 2 \end{pmatrix}$$

lassen sich die n Gleichungen in der Form

$$Fx = Ax + h^2 g(x) - b = 0$$

schreiben. Unter der angegebenen Voraussetzung $\frac{\partial f}{\partial y} \geqq 0$ existiert eine eindeutige Lösung x^* von $Fx = 0$. Es ist

$$F'(x) = A + h^2 g'(x) = A + h^2 \operatorname{diag}\left(\frac{d}{dx_i} f(t_i, x_i)\right).$$

Wegen $\frac{\partial f}{\partial y} \geqq 0$ ist $\frac{d}{dx_i} f(t_i, x_i) \geqq 0$, $i = 1(1)n$. Da A eine M-Matrix ist, gilt mit $A^{-1} \geqq 0$ auch $F'(x)^{-1} \geqq 0$ für alle $x \in \mathbb{R}^n$.

Offensichtlich ist F genau dann konvex, wenn g konvex ist, was wiederum genau dann der Fall ist, wenn f bezüglich y konvex ist. Existiert $\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}$, so ist F zweimal G-differenzierbar. Die Konvexität von f bezüglich y hat dann $\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \geqq 0$ und damit $\frac{d^2}{dx_i^2} f(t_i, x_i) \geqq 0$ zur Folge. Wegen

$$F'(x) - F'(y) = h^2 \operatorname{diag}\left(\frac{d}{dx_i} f(t_i, x_i) - \frac{d}{dx_i} f(t_i, y_i)\right)$$

folgt somit die Isotonie von F' aus der Konvexität von F. Um die Ordnungskonvexität von F' zu sichern, genügt es offensichtlich, die Konvexität von $\frac{\partial}{\partial y} f(t, y)$ bezüglich y vorauszusetzen. Damit sind dann die im letzten Abschnitt genannten Voraussetzungen alle erfüllt.

Eine typische Klasse von Randwertaufgaben, bei der diese Voraussetzungen offensichtlich erfüllt sind, besitzt die Form

$$y'' = e^{ay}, \qquad a > 0, \qquad y(0) = \alpha, \qquad y(1) = \beta.$$

In den Tabellen 1 und 2 geben wir einige numerische Ergebnisse für die Auflösung des diskretisierten Problems in Abhängigkeit von a, α, β, n und dem gewählten Anfangsvektor x^0 an. Die Komponenten x_i^0 des Anfangsvektors $x^0 = (x_i^0)$ wurden jeweils alle gleich gewählt. Der Wert von x_i^0 ist in der ersten Spalte angegeben. Daneben befindet sich jeweils in der ersten Zeile für verschiedene Werte von n und a die Anzahl der bei Verwendung des Newton-Verfahrens aufzulösenden linearen Gleichungssysteme. In der zweiten Zeile befindet sich zunächst die Anzahl der bei der besprochenen Modifikation insgesamt aufzulösenden linearen Gleichungssysteme. Daneben ist jeweils noch die Anzahl der dabei ausgeführten „Doppelschritte" angegeben. Die Rechnung wurde jeweils abgebrochen, sobald in keiner Komponente mehr eine Verkleinerung eingetreten ist. Mit Ausnahme von zwei Fällen, die mit einem Stern gekennzeichnet sind, bestätigen diese Tabellen, daß bei der angegebenen Modifikation höchstens ein lineares Gleichungssystem mehr als bei Verwendung des Newton-Verfahrens aufgelöst werden muß, bei ungünstig gewählten Startvektoren jedoch die Aufwandersparnis erheblich sein kann. Die jeweils um 1 zu großen mit einem Stern versehenen Zahlen kommen durch Nichtberücksichtigung von Rundungsfehlern während der Rechnung zustande. Um die Startwerte zu beurteilen, haben wir außerdem noch die berechneten Lösungen des diskretisierten Problems jeweils für $n = 10$ angegeben. Die Durchführung der Rechnung besorgte Herr cand. math. Peter T. SPECK auf der Rechenanlage UNIVAC 1108 des Rechenzentrums der Universität Karlsruhe.

Tabelle 1

	$y'' = e^{ay}$		$y(0) = y(1) = 2 \cdot \ln \pi$			
	$n = 5$		$n = 10$		$n = 25$	
x_i^0	$a = 1$	$a = 5$	$a = 1$	$a = 5$	$a = 1$	$a = 5$
10	12	53	12	56	13	54
	8 4	29 24	10 3	32 23	10 3	34 22
5	10	28	8	30	8	31
	8 1	19 11	8 1	19 11	6 1	19 10
1	6	8	6	11	8	9
	7 1	7 1	7 1	7 1	6 1	9 1
1/2	8	7	6	8	6	11
	6 1	7 1	7 1	6 1	8* 1	8 1
0	8	11	6	11	6	12
	6 1	9 3	6 1	13* 3	6 1	9 3
−1	8	18	7	17	8	16
	9 1	11 4	6 1	13 4	8 1	16 3
−5	9	15	7	17	6	16
	6 1	12 4	7 1	11 4	6 1	14 3
−5	8	15	7	17	7	17
	7 1	12 4	7 1	11 4	8 1	13 3

Berechnete Lösung $x = (x_i)$ für $n = 10$

i	$a = 1$	$a = 5$
1	2,04230559	0,956897087
2	1,85885693	0,613092937
3	1,72843637	0,446515430
4	1,64455993	0,356994648
5	1,60348296	0,316725276
6	1,60348296	0,316725276
7	1,64455993	0,356994648
8	1,72843637	0,446515430
9	1,85885693	0,613092937
10	2,04230559	0,956897087

Tabelle 2

	$y'' = e^{ay}$		$y(0) = y(1) = 10$			
	$n = 5$		$n = 10$		$n = 25$	
x_i^0	$a = 1$	$a = 5$	$a = 1$	$a = 5$	$a = 1$	$a = 5$
5	6 7 1	29 19 10	6 7 1	30 19 10	8 9 1	29 20 9
1	10 8 2	8 7 1	10 8 2	11 10 1	12 11 2	20 19 1
1/2	12 9 3	18 17 1	11 9 2	26 25 1	12 11 2	36 34 1
0	11 10 3	39 25 15	11 9 2	42 30 14	12 12 2	45 32 14
—1	12 9 3	54 30 23	13 9 3	54 31 22	13 12 2	56 34 21
—5	12 9 3	55 30 23	13 9 3	55 32 22	15 14 2	56 37 21

Berechnete Lösung $x = (x_i)$ für $n = 10$

i	$a = 1$	$a = 5$
1	5,81657541	1,37538378
2	4,40852296	0,764272906
3	3,67937985	0,530570939
4	3,27768975	0,414178904
5	3,09512731	0,363339886
6	3,09512731	0,363339886
7	3,27768975	0,414178904
8	3,67937985	0,530570939
9	4,40852296	0,764272906
10	5,81657541	1,37538378

Literatur

[1] ORTEGA, J. M., Numerical Analysis, A Second Course, Academic Press, New York—London 1972.
[2] ORTEGA, J. M., and W. C. RHEINBOLDT, Iterative Solution of Nonlinear Equations in Several Variables, Academic Press, New York 1970.
[3] STOER, J., Einführung in die Numerische Mathematik, Springer-Verlag, Berlin—Heidelberg—New York 1972.
[4] WILKINSON, J., The Algebraic Eigenvalue Problem, Oxford Univ. Press (Clarendon), London—New York 1965.

Manuskripteingang: 14. 10. 1974

VERFASSER:
Prof. Dr. GÖTZ ALEFELD, Institut für Angewandte Mathematik der Universität Karlsruhe