Vorlesung Numerische Mathematik 1

Kapitel 3: Numerische Lösung von Nullstellenproblemen

8. Oktober 2017

Zürcher Hochschule
für Angewandte Wissenschaften

Gliederung des Kapitels

Lernziele

- Sie können das Bisektionsverfahren anwenden und in MATLAB programmieren.
- Sie können die Begriffe Fixpunktgleichung, Fixpunktiteration sowie anziehender bzw. abstossender Fixpunkt definieren.
- Sie können zu einer konkreten Aufgabenstellung die Fixpunktgleichung aufstellen und die entsprechende Iteration durchführen.
- Sie können dabei auftretende Fehler mittels des Banachschen Fixpunktsatzes quantifizieren.
- Sie können das Newtonverfahren, das vereinfachte Newtonverfahren sowie das Sekantenverfahren anwenden.
- Sie verstehen der Begriff der Konvergenzordnung.

Numerische Lösung von Nullstellenproblemen

- In diesem Kapitel behandeln wir Verfahren zur näherungsweisen Lösung von nichtlinearen Gleichungen mit einer Unbekannten (die Lösung linearer Gleichungen einer Variablen ist trivial).
- Wie wir sehen werden, ist die Lösung von nichtlinearen Gleichungen mit einer Unbekannten äquivalent zur Bestimmung der Nullstellen einer Funktion $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$mit $f(x) = 0$.

- Die im Kapitel 2 verwendete Normierung $x = \pm 0.m_1 m_2 m_3 \ldots m_n \cdot B^e$ haben wir im Zusammenhang mit der Theorie der Rechnerarithmetik und der maschinendarstellbaren Zahlen zu verschiedenen Basen eingeführt.
- In den Ingenieurwissenschaften werden numerische Resultate aber meist als Dezimalzahlen in der Potenzschreibweise dargestellt mit vier Nachkommastellen, wobei die erste Ziffer vor dem Komma *ungleich 0* sein muss (für $x \neq 0$).
- Sofern wir im weiteren mit numerischen Resultaten arbeiten und es nicht ausdrücklich anders verlangt ist, werden wir also im Dezimalsystem i.d.R. mit der Normierung

$$x = \pm m_1 . m_2 m_3 m_4 m_5 \cdot 10^{\pm e}$$

mit $m_1 \neq 0$ (für $x \neq 0$) arbeiten.

Historische Entwicklung

- Die Fragestellung der Lösung nichtlinearer Gleichungen begleitet die (numerische) Mathematik seit ihren Anfängen.
- Die Babylonier (und vermutlich bereits die Ägypter) beschäftigten sich in ihrer auf die Geometrie fokussierten Mathematik unter anderem mit der Frage, wie gross die Seitenlängen x eines Quadrates mit der gegebenen Fläche A sind, also mit der Lösung der nichtlinearen Gleichung $x^2 = A$ (vgl. Kap. 2)

Historische Entwicklung

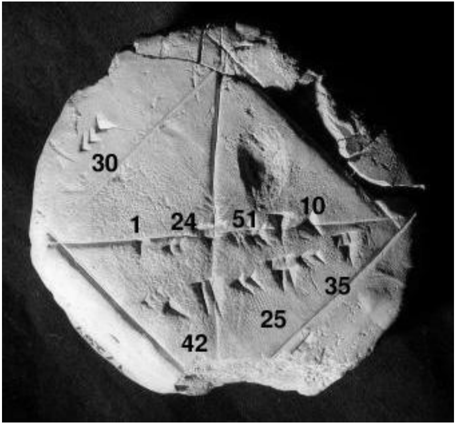


Abbildung: Babylonische Tontafel YBC 7289 von ca. 1800-1600 v.Chr. Die Näherung von $\sqrt{2}$ ist in der Diagonale eines Quadrates dargestellt mit den Symbolen für $1 + 24/60 + 51/60^2 + 10/60^3 = 1.41421296...$

Historische Entwicklung

- Eng damit verwandt ist natürlich die Fragestellung des Flächeninhaltes eines rechtwinkligen Dreiecks.
- Der nach dem griechischen Philosophen Pythagoras von Samos (um 570-510 v.Chr.) benannte Satz $a^2 + b^2 = c^2$ war den Babyloniern bereits rund 1000 Jahre früher bekannt.

Historische Entwicklung

- Die Übersetzung einer babylonischen Tontafel (ca. 1900-1600 v.Chr.) im Britischen Museum lautet:[1]
  4 is the length and 5 the diagonal. What is the breadth?
  Its size is not known.
  4 times 4 is 16.
  5 times 5 is 25.
  You take 16 from 25 and there remains 9.
  What times what shall I take in order to get 9?
  3 times 3 is 9.
  3 is the breadth.

[1] John J. O'Connor, Edmund F. Robertson: Pythagoras's theorem in Babylonian mathematics. In: MacTutor History of Mathematics archive (englisch) unter http://www-history.mcs.st-andrews.ac.uk/Indexes/HistoryTopics.html

Historische Entwicklung

- Der Grieche Heron von Alexandria (1. Jhr. n.Chr.) beschrieb in seinem Werk *Metrika* (Buch der Messung) das nach ihm benannte Näherungsverfahren von Heron zur iterativen Berechnung einer (beliebigen) Quadratwurzel $x = \sqrt{A}$ für $A > 0$ mit der Iterationsvorschrift (für einen Startwert $x_0 \neq 0$):

$$x_{n+1} = \frac{x_n + \frac{A}{x_n}}{2}$$

Historische Entwicklung

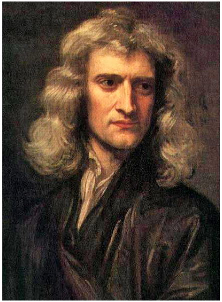
- Im Mittelalter konzentrierte man sich auf die Nullstellensuche von Polynomen.
- Der italienische Mathematiker Girolamo Cardano (1501-1576) veröffentlichte als erster Lösungsformeln (die Cardanischen Formeln) für kubische Gleichungen und zusätzlich Lösungen für Gleichungen vierten Grades.
- Bei seinen Berechnungen stiess er auf die komplexen Zahlen und zeigte (entgegen der damaligen Lehrmeinung), dass auch mit negativen Zahlen gerechnet werden kann.

Historische Entwicklung

- „Cardano“ von Gerolamo Cardano (1501-1576) - http://de.wikipedia.org/wiki/Bild:Cardano.jpg (de:Benutzer:ChristianGruchow). Lizenziert unter Public domain über Wikimedia Commons -

Historische Entwicklung

- Isaac Newton beschrieb im Zeitraum 1664 bis 1671 einen neuen Algorithmus zur Nullstellenbestimmung von Polynomen dritten Grades.



- „GodfreyKneller-IsaacNewton-1689" von Sir Godfrey Kneller - http://www.newton.cam.ac.uk/art/portrait.html. Lizenziert unter Public domain über Wikimedia Commons - http://commons.wikimedia.org/wiki/File:GodfreyKneller-IsaacNewton-1689.jpg#mediaviewer/File:GodfreyKneller-IsaacNewton-1689.jpg

Historische Entwicklung

- Sein Landsmann und Mathematiker Thomas Simpson (1710-1761) formulierte dieses Verfahren unter Benutzung der Ableitung in der Iterationsvorschrift

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)},$$

was wir heute als Newton-Verfahren bezeichnen (vgl. Kap. 3.5).
- Tatsächlich ist das Newton-Verfahren äquivalent zum Heron-Verfahren für die Bestimmung der Nullstellen der Funktion $f(x) = x^2 - A$.
- Generell lässt sich das Newton-Verfahren natürlich (unter gewissen Einschränkungen bzgl. der Konvergenz) für beliebige stetig differenzierbare Funktionen $f(x)$ einsetzen, nicht nur für Polynome.

Historische Entwicklung

- Wahrscheinlich im Zusammenhang mit dem Beweis des Zwischenwertsatzes der Analysis (siehe Kap. 3.2) konstruierte der böhmische Priester und Mathematiker Bernard Bonzano (1781-1848) um 1817 das Bisektionsverfahren[2], welches es durch fortlaufende Intervallhalbierung zuverlässig (aber langsam) erlaubt, eine Nullstelle einer stetigen Funktion zu finden (ohne Benutzung der Ableitung wie im Newton-Verfahren).

[2] Edwards, C. H. (1979). Bolzano, Cauchy, and Continuity. The Historical Development of the Calculus (pp. 308, 309). New York, NY: Springer New York.

Historische Entwicklung

- „Bernhard Bolzano Litho“ von Josef Kriehuber (+1876); Foto Peter Geymayer - Eigenes Foto einer Originallithographie der ÖNB (Wien). Über Wikipedia - http://de.wikipedia.org/wiki/Datei:Bernhard_Bolzano_Litho.jpg#mediaviewer/

Historische Entwicklung

- Der polnische Mathematiker Stefan Banach (1892-1945) formulierte 1922 den Banachschen Fixpunktsatz zur Theorie der Fixpunktiterationen (siehe Kap. 3.4), die zur Lösung von Nullstellenproblemen in einem weit gefassten Bereich von einfachen Funktionen bis hin zu linearen oder nichtlinearen Gleichungssystemen und Differentialgleichungen reicht.
- Modernere Verfahren zur Nullstellenbestimmung sind meist Kombinationen der hier bereits erwähnten und in den folgenden Unterkapiteln detaillierter vorgestellten Verfahren.

Historische Entwicklung

- Stefan Banach. Lizenziert unter Creative Commons Attribution-Share Alike 3.0 über Wikimedia Commons

Problemstellung

- Gegeben sei eine stetige Funktion $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$.
- Gesucht sei ein Näherungswert für die (bzw. für eine) Nullstelle $\overline{x}$ von f.
- Natürlich ist eine Gleichung der Form $g(x) = h(x)$ äquivalent zu $f(x) \equiv g(x) - h(x) = 0$. Geometrisch bedeutet das, dass $f(x)$ an der Stelle $\overline{x}$ die x-Achse schneidet.
- **Aufgabe 3.1:**
  Die nichtlineare Gleichung $x = \cos(x)$ lässt sich als Nullstellenproblem von $f(x) \equiv x - \cos(x) = 0$ interpretieren. Lösen Sie für $x \in [0, 1]$ auf graphischem Weg einmal die Gleichung $x = \cos(x)$ und dann die Gleichung $f(x) = x - \cos(x) = 0$.

Problemstellung

- Folgende Fragen sollten aber erst geklärt werden, bevor ein solches Problem gelöst werden kann:

1. Gibt es überhaupt eine Nullstelle von $f(x)$, und wenn ja, in welchem Bereich?
2. Gibt es mehrere Nullstellen? Wenn ja, welche davon sollten mit dem Rechner gefunden werden?

Problemstellung

- Zur Lösung dient der folgende Satz aus der Analysis:

Satz 3.1: Nullstellensatz von Bolzano

- Sei $f : [a, b] \to \mathbb{R}$ stetig mit $f(a) \leq 0 \leq f(b)$ oder $f(a) \geq 0 \geq f(b)$. Dann muss f in $[a, b]$ eine Nullstelle besitzen.

- Wenn man also auf dem Intervall $[a, b]$ einen Vorzeichenwechsel von f feststellt, d.h. $f(a) \cdot f(b) < 0$, dann besitzt f in diesem Intervall mindestens eine Nullstelle.
- Im folgenden beschreiben wir ein Verfahren, dass diesen Umstand benutzt.

Bisektionsverfahren

- Wir berechnen zunächst $x_1 = (a+b)/2$ und prüfen ob $f(x_1) > 0$.
- Wenn ja, dann verwenden wir $[a, x_1]$ als neues Näherungsintervall, wenn nein, dann muß eine Nullstelle in $[x_1, b]$ liegen. Das neue Intervall nennen wir $[a_1, b_1]$.
- Wiederholung des Verfahrens mit dem neuen Intervall liefert eine Intervallschachtelung, die eine Nullstelle bestimmt.
- Auf diese Weise kann man eine Nullstelle beliebig genau annähern.
- Dieses einfache Verfahren zur Bestimmung einer Nullstelle einer stetigen Funktion nennt man Bisektionsverfahren. Formal kann man das follgendermassen definieren (siehe nächstes Slide).

Satz zum Bisektionsverfahren

Satz 3.2: Bisektionsverfahren [1]

- Gegeben sei eine stetige Funktion $f : [a, b] \longrightarrow \mathbb{R}$ mit $f(a) \cdot f(b) < 0$. In jedem der über die Rekursion für $i = 0, 1, \ldots$erzeugten Intervalle

$$
\begin{aligned}
[a_0, b_0] &= [a, b]; \\
[a_{i+1}, b_{i+1}] &= \begin{cases} \left[a_i, \frac{a_i+b_i}{2}\right] & \text{falls } f\left(\frac{a_i+b_i}{2}\right) \cdot f(a_i) \leq 0 \\ \left[\frac{a_i+b_i}{2}, b_i\right] & \text{sonst} \end{cases}
\end{aligned}
$$

befindet sich eine Nullstelle von f und es gilt

$$b_i - a_i = \frac{b-a}{2^i}, \text{ insbesondere also } \lim_{i\to\infty} (b_i - a_i) = 0$$

Satz zum Bisektionsverfahren

- Allerdings gibt es wesentlich schnellere Verfahren, eine Nullstelle zu berechnen.
- Wir können es aber dazu verwenden, einen Überblick über die Lage der Nullstellen zu verschaffen, indem man nur einige Schritte durchführt.
- Zudem hat das Bisektionsverfahren einige sehr vorteilhafte Eigenschaften:
  1. Es funktioniert für allgemeine stetige Funktionen.
  2. Es liefert immer ein Ergebnis, vorausgesetzt dass man geeignete Startwerte a und b finden kann (man sagt, dass das Verfahren "global konvergiert").
  3. Die Anzahl der Schritte, nach der die gewünschte Genauigkeit erreicht ist, hängt nur von a und b aber nicht von f ab.

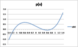
Beispiel 3.1

- Gesucht sind Intervalle, in denen sich die Nullstellen von $p(x) = x^3 - x + 0.3$ befinden.
- Lösung: p ist ein Polynom vom Grad 3 und hat maximal 3 Nullstellen.
  - Wegen der Ähnlichkeit zum Polynom $q(x) = x^3 - x$, welches die Nullstellen -1, 0, 1 besitzt, suchen wir in dieser Umgebung. Um Vorzeichenänderungen festzustellen, berechnen wir im Intervall [-3, 3] einige Funktionswerte:
  - Wir haben den ersten Vorzeichenwechsel von $p(x)$ im Intervall [-1.5, -1.0], den nächsten im Intervall [0.0, 0.5] und den dritten im Intervall [0.5, 1.0].
  - Wir haben den ersten Vorzeichenwechsel von $p(x)$ im Intervall [-1.5, -1.0], den nächsten im Intervall [0.0, 0.5] und den dritten im Intervall [0.5, 1.0].

x	-2.0	-1.5	-1.0	-0.5	0.0	0.5	1.0	1.5	2.0
$p(x)$	-5.7	-1.6	0.3	0.7	0.3	-0.1	0.3	2.2	6.3

Beispiel 3.1

- Nach dem Zwischenwertsatz gibt es in jedem dieser Intervalle eine Nullstelle. Es kann nur maximal 3 Nullstellen geben, also enthält jedes Intervall genau eine und wir haben alle gefunden.



Beispiel 3.1

- Wir wollen jetzt die Nullstelle im Intervall [0.0, 0.5] bis auf eine Stelle nach dem Komma bestimmen.
- Lösung: Der Mittelwert der Intervallgrenzen ist (0.0+0.5)/2 =0.25.
  - Der Funktionswert $p(0.25) = 0.07$ ist grösser als Null, also liegt die Nullstelle im Intervall [0.25,0.5].
  - Der Mittelwert dieser neuen Intervallgrenzen ist (0.25+0.5)/2=0.375, und p(0.375)=-0.020 ist kleiner als Null, also liegt die Nullstelle im Intervall [0.25,0.375].
  - Nochmaliges Ausführen ergibt (0.25+0.375)/2 = 0.3125 und mit p(0.3125)=0.018 > 0 liegt die Nullstelle im Intervall [0.3125,0.375].
  - Damit muss die Nullstelle also 0.3_ _ sein und wir haben sie auf eine Nachkommastelle genau bestimmt.

Aufgabe 3.2

- Bestimmen Sie wie im vorherigen Beispiel die beiden anderen Nullstellen von p(x) auf eine Nachkommastelle genau.
- Bestimmen Sie mit dem Bisektionsverfahren die Lösung von $f(x) = x^2 - 2 = 0$ auf einem geeigneten Startintervall auf vier Nackommastellen genau.
- Optional: Übersetzen Sie den obigen Satz zum Bisektionsverfahren in ein MATLAB Programm.

Fixpunktiteration

- Die Fixpunktiteration ist eine weitere einfache Methode zur Bestimmung von Nullstellen.
- Sie beruht auf der Idee, dass für nichtlineare Gleichungen der Form $f(x) = F(x) - x$ die Bedingung $f(\bar{x}) = 0$ genau dann erfüllt ist, wenn $F(\bar{x}) = \bar{x}$.

Definition 3.1: Fixpunktgleichung / Fixpunkt [1]

- Eine Gleichung der Form $F(x) = x$ heisst **Fixpunktgleichung**.
- Ihre Lösungen $\bar{x}$, für die $F(\bar{x}) = \bar{x}$ erfüllt ist, heissen **Fixpunkte** (da die Funktion F die Punkte $\bar{x}$ auf sich selbst abbildet.

Fixpunktiteration

- Anstelle eines Nullstellenproblems kann man also ein dazu äquivalentes Fixpunktproblem betrachten.
- Dazu muss aber $f(x) = 0$ in die Fixpunktform $F(x) = x$ gebracht werden, wozu es viele Möglichkeiten gibt.
- Bei dieser Überführung muss unbedingt auf Äquivalenz geachtet werden, d.h. die Lösungsmenge darf nicht verändert werden.
- **Beispiel 3.2:**
  - Die Gleichung $p(x) = x^3 - x + 0.3$ soll in Fixpunktform gebracht werden.
    Lösung: Die einfachste Möglichkeit ist
    $p(x) = 0 \iff F(x) \equiv x^3 + 0.3 = x$
    Aber auch $F(x) \equiv \sqrt[3]{x - 0.3} = x$ ist möglich.
  - Die Gleichung $x = \cos(x)$, die wir weiter oben graphisch gelöst haben, ist bereits in der Fixpunktform.

Fixpunktiteration

Definition 3.2: Fixpunktiteration [1]

- Gegeben sei $F : [a,b] \to \mathbb{R}$, mit $x_0 \in [a,b]$. Die rekursive Folge

$$x_{n+1} \equiv F(x_n), \qquad n = 0, 1, 2, \ldots$$

heisst Fixpunktiteration von F zum Startwert x_0.

- Die 'Hoffnung' ist, dass die erzeugte Folge gegen einen Fixpunkt von F konvergiert.

Fixpunktiteration

- Fixpunktiterationen sind leicht durchzuführen und jeder Iterationsschritt benötigt nur eine Funktionsauswertung.
- Aus der generellen Form $F(x) = x$ folgt aber auch direkt, dass sich graphisch die Lösung ergibt als die Schnittpunkte zwischen den beiden Funktionen $y = F(x)$ und $y = x$.
- Allerdings können sich zwei Fixpunktiterationen zum gleichen Nullstellenproblem bzgl. ihrem Konvergenzverhalten unterscheiden.

Beispiel 3.3

- Berechnen Sie Nullstellen von $p(x) = x^3 - x + 0.3$ mittels Fixpunktiteration.
- Lösung:
  - Die Fixpunktiteration lautet $x_{n+1} = F(x_n) = x_n^3 + 0.3$.
  - Wir wissen bereits aus der letzten Aufgabe, wo wir die Nullstellen zu vermuten haben, also wählen wir Startwerte aus der Umgebung, z.B. -1, 0, 1.
  - Wir erhalten die folgende Tabelle (aus [1]):

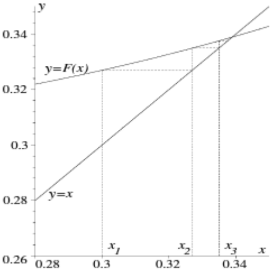
n	x_n	x_n	x_n
0	-1	0	1
1	-0.7	0.3	1.3
2	-0.043	0.327	2.497
3	0.299920493	0.334965783	15.86881747
4	0.3269785388	0.3375838562	3996.375585
5	0.3349588990	0.3384720217	$\vdots$
6	0.3375815390	0.3387764750	$\vdots$
7	0.3384712295	0.3388812067	$\vdots$
8	0.3387762027	0.3389172778	$\vdots$
9	0.3388811129	0.3389297064	$\vdots$
10	0.3389172455	0.3389339894	$\vdots$

Beispiel 3.3 (Fortsetzung)

- Während mit den beiden Startwerten -1 und 0 die Fixpunktiteration gegen 0.3389... konvergiert, divergiert sie für den Startwert 1.
- Auch für andere Startwerte würde man feststellen, dass die Folgen entweder gegen 0.3389... konvergieren oder dann divergieren.
- Die Nullstelle bzw. der Fixpunkt $x = 0.3389$ scheint die Iterationsfolgen anzuziehen, die beiden anderen Nullstellen aber nicht.
- Daher können sie mit dieser Iteraton nicht angenähert werden.

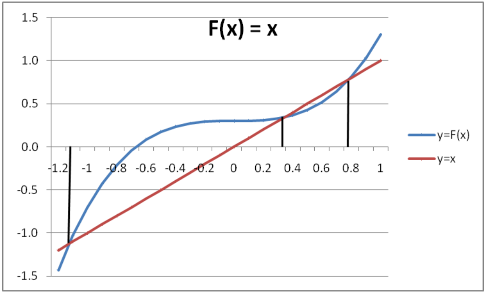
Beispiel 3.3 (Fortsetzung)

- Die Figur in der untenstehenden Abbildung zeigt die Fixpunktitertion in der Nähe des Fixpunktes $x = 0.3389$.
- Man sieht, dass die Folge schnell und monoton konvergiert.
- Was führt nun dazu, dass die Folge für die beiden anderen Fixpunkte nicht konvergiert?



Beispiel 3.3 (Fortsetzung)

- Die untenstehende Figur zeigt alle drei Schnittpunkte $y = F(x)$ und $y = x$.
- Die Vermutung liegt nahe, dass die Steigung der Funktion $y = F(x)$ verglichen mit derjenigen von $y = x$ an der Stelle der Fixpunkte $\overline{x}$ eine Rolle spielt.



Beispiel 3.3 (Fortsetzung)

- Dort, wo die Steigung von $F(x)$ kleiner ist als diejenige von $y = x$ (welche die Steigung 1 hat), scheint die Fixpunktiteration zu funktionieren, es muss also gelten $F'(\overline{x}) < 1$.
- Die Folge konvergiert schneller je kleiner $F'(\overline{x})$.
- Umgekehrt gilt, die Fixpunktiteration divergiert für $F'(\overline{x}) > 1$, wie es der Fall für die beiden anderen Fixpunkte ist.
- Diese sind nicht mit dieser Fixpunktiteration bestimmbar.

Satz zur Fixpunktiteration

- Wir halten also fest:

Satz 3.2 zur Fixpunktiteration [1]:

- Sei $F : [a, b] \longrightarrow \mathbb{R}$ mit stetiger Ableitung F' und $\overline{x} \in [a, b]$ ein Fixpunkt von F. Dann gilt für die Fixpunktiteration $x_{n+1} = F(x_n)$:
  - Ist $| F'(\overline{x}) | < 1$, so konvergiert x_n gegen $\bar{x}$, falls der Startwert x_0 nahe genug bei $\bar{x}$ liegt. Der Punkt $\bar{x}$ heisst dann **anziehender Fixpunkt.**
  - Ist $| F'(\overline{x}) | > 1$, so konvergiert x_n für keinen Startwert $x_0 \neq \bar{x}$. Der Punkt $\bar{x}$ heisst dann **abstossender Fixpunkt.**

Aufgabe 3.3

- Überprüfen Sie anhand des obigen Satzes, welche der drei Fixpunkte $\overline{x}_1 = -1.125$, $\overline{x}_2 = 0.3389$, $\overline{x}_3 = 0.7864$ abstossend oder anziehend sind.
- Bestimmen Sie anhand Fixpunktiteration die Lösung(en) von $x = \cos(x)$.
- Prüfen Sie, ob der Fixpunkt $\overline{x}_3 = 0.7864$ für die Fixpunktiteration $x_{n+1} = F(x_n) = \sqrt[3]{x_n - 0.3}$ anziehend oder abstossend ist.

Banachscher Fixpunktsatz

- Was uns nun interessiert ist, welche Startwerte für eine Fixpunktiteration geeignet sind und was für Fehler wir für die n-te Fixpunktiteration erwarten müssen.
- Dazu dient uns der Banachsche Fixpunktsatz.

Banachscher Fixpunktsatz

Satz 3.3: Banachscher Fixpunktsatz [1]

- Sei $F : [a, b] \longrightarrow [a, b]$ (d.h. F bildet $[a, b]$ auf sich selber ab) und es existiere eine Konstante α mit $0 < \alpha < 1$ und

$$| F(x) - F(y) | \leq \alpha \, | x - y | \;\; \text{für alle } x, y \in [a, b]$$

(d.h. F ist "Lipschitz-stetig" und "kontraktiv", α nennt man auch Lipschitz-Konstante). Dann gilt:

  - F hat genau einen Fixpunkt $\overline{x}$ in [a,b]
  - Die Fixpunktiteration $x_{n+1} = F(x_n)$ konvergiert gegen $\overline{x}$ für alle Startwerte $x_0 \in [a, b]$
  - Es gelten die Fehlerabschätzungen

$$\begin{aligned} | x_n - \overline{x} | &\leq \frac{\alpha^n}{1-\alpha} | x_1 - x_0 | && \text{a-priori Abschätzung} \\ | x_n - \overline{x} | &\leq \frac{\alpha}{1-\alpha} | x_n - x_{n-1} | && \text{a-posteriori Abschätzung} \end{aligned}$$

Banachscher Fixpunktsatz: Bemerkungen

- Aus $| F(x) - F(y) | \leq \alpha \, | x - y |$ für alle $x, y \in [a, b]$ folgt

$$\frac{| F(x) - F(y) |}{| x - y |} \leq \alpha,$$

  wobei die linke Seite sämtliche möglichen Steigungen der Sekanten durch die beiden Punkte $(x, F(x))$ und $(y, F(y))$ für alle $x, y \in [a, b]$ darstellt.
- Aus diesem Grund kann man α als die grösstmögliche Steigung von $F(x)$ auf dem Intervall $[a, b]$ interpretieren, bzw.

$$\alpha = \max_{x_0 \in [a,b]} | F'(x_o) |$$

- Wählt man das Intervall $[a, b]$ sehr nahe um einen anziehenden Fixpunkt $\overline{x}$, so ist also $\alpha \approx | F'(\overline{x}) |$.

Banachscher Fixpunktsatz: Bemerkungen

- In der Praxis gestaltet es sich meist schwierig, ein Intervall [a,b] zu finden, dass unter F auf sich selbst abgebildet wird.
- Hat man ein solches Intervall gefunden, dann sind die Fehlerabschätzungen aber recht nützlich.Wir werden diesen Satz nochmals im Zusammenhang mit der iterativen Lösung von linearen Gleichungssystemen in Kap. 4 aufgreifen.

Beispiel 3.4

- Gesucht ist ein Intervall [a, b] und eine Konstante $\alpha < 1$, so dass der Banachsche Fixpunktsatz auf die Fixpunktiteration $x_{n+1} = F(x_n) = x_n^3 + 0.3$ anwendbar ist.
- Lösung:
  - Wir wissen bereits, dass die Fixpunktiteration in der Nähe von $\overline{x} = 0.3389$ konvergiert.
  - Also suchen wir in der Nähe davon ein geeignetes Intervall, z.B. $[a, b] = [0, 0.5]$.
  - Für jedes x in diesem Intervall gilt $F(x) = x^3 + 0.3 \geq 0.3$ und der maximale Funktionswert ist $F(0.5) = 0.125 + 0.3 = 0.425 \leq 0.5$.
  - Also bildet F das Intervall [0,0.5] tatsächlich auf [0,0.5] ab, die erste Bedingung ist erfüllt.

Beispiel 3.4 (Fortsetzung)

- Jetzt untersuchen wir, ob es eine Konstante $\alpha < 1$ gibt, so dass $| F(x) - F(y) | \leq \alpha | x - y |$ für alle $x, y \in [0, 0.5]$ gilt.
  - Wir wissen
  $$\alpha = \max_{x_0 \in [a,b]} | F'(x_o) |$$
  - Also berechnen wir die Ableitung $F'(x)$ auf dem Intervall [0,0.5] und finden, dass der maximale Wert der Ableitung $| F'(x) | = 3x^2$ wegen ihrem monoton steigenden Verhalten bei $x = 0.5$ erreicht wird und dass $| F'(x) | = 3x^2 = 3 * 0.5^2 = 0.75 < 1$.
  - Also setzen wir $\alpha = 0.75$.

Aufgabe 3.4

1. Schätzen sie jetzt für das obige Beispiel mit der a-priori Abschätzung ab, wie viele Iterationen ausreichen sollten, um ausgehend von $x_0 = 0$ einen absoluten Fehler von max. 10^{-4}zu erhalten. Wenden Sie dann die a-posteriori Abschätzung an, um den absoluten Fehler zu erhalten.
2. Finden Sie mit Hilfe des Banachschen Fixpunktsatzes den Fixpunkt $\overline{x}_2$ für die Fixpunktiteration $x_{n+1} = F(x_n) = \sqrt[3]{x_n - 0.3}$ und den Startwert $x_0 = 0.7$.
3. Welche der beiden Fixpunktiterationen $x_{n+1} = F(x_n) = x_n^3 + 0.3$, $x_0 = 0$ und $x_{n+1} = F(x_n) = \sqrt[3]{x_n - 0.3}$, $x_0 = 0.7$ wird nach Ihrer Erwartung schneller konvergieren?

Das Newton-Verfahren

- In diesem Abschnitt werden wir ein weiteres Verfahren zur Lösung nichtlinearer Gleichungssysteme betrachten, das bereits aus der Analysis bekannte Newton–Verfahren.
- Im Vergleich zu den bisher betrachteten Verfahren konvergiert dieses meist deutlich schneller. Wie wir im nächsten Abschnitt sehen werden, ist es quadratisch konvergent.
- Im Gegensatz zum Bisektions–Verfahren oder der Fixpunktiteration wird hier nicht allerdings nur die Funktion f selbst sondern auch ihre Ableitung benötigt.
- Wir gehen also davon aus, dass f (stetig) differenzierbar ist.

Das Newton-Verfahren

- Die Idee des Newton–Verfahrens ist wie folgt: Berechne die Tangente $g(x)$ von f im Punkt x_n, d.h. die Gerade

$$g(x) = f(x_n) + f'(x_n)(x - x_n).$$

Die Nullstelle von g sei x_{n+1}, dann gilt also

$$g(x_{n+1}) = 0 = f(x_n) + f'(x_n)(x_{n+1} - x_n).$$

Auflösen nach x_{n+1} liefert

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)} \qquad (n = 0, 1, 2, 3, \ldots).$$

Das gilt natürlich nur, wenn $f'(x_n) \neq 0$ erfüllt ist.

Das Newton-Verfahren

- Die Idee ist in der nachstehenden Abbildung graphisch dargestellt.
- Den Startwert sollte man in der Nähe der Nullstelle wählen, um eine schnelle Konvergenz zu erreichen.
- Die Konvergenz der Folge $(x_0, x_1, x_2, \ldots)$ ist sicher gegeben, wenn im Intervall $[a, b]$, in dem alle Näherungswerte liegen sollen, die Bedingung

$$\left| \frac{f(x) \cdot f''(x)}{[f'(x)]^2} \right| < 1$$

  erfüllt ist (hinreichende Konvergenzbedingung).
- In der Regel überprüft man diese Bedingung zumindest für den Startwert x_0. Ungeeignet sind Startwerte, in deren unmittelbarer Umgebung die Kurventangente nahezu parallel zur x-Achse verläuft.

Das Newton-Verfahren

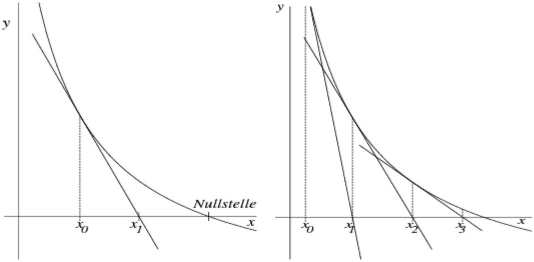


Abbildung: Newton-Verfahren (aus [1])

Aufgabe 3.5

- Bestimmen Sie die Nullstellen von $f(x) = x^2 - 2 = 0$ näherungsweise mit dem Newton-Verfahren und dem Startwert $\mathrm{x}_0 = 2$.
- Vergleichen Sie ihren Wert nach $n+1 = 4$ Iterationsschritten mit dem exakten Wert von $\sqrt{2}$.
- Auf wievielen Nachkommastellen stimmt die Iterationslösung überein?
- Bestimmen Sie das Iterationsverfahren für $f(x) = x^2 - a = 0$ als Berechnungsmöglichkeit für $\sqrt{a}$ und vergleichen Sie das Resultat mit dem in Kap. 3.1 vorgestellten Heron-Verfahren..

Vereinfachtes Newton-Verfahren

- Das Newton-Verfahren ist ein häufig verwendetes und sehr schnelles Verfahren, um Nullstellen zu bestimmen.
- Es hat aber den Nachteil, dass man in jedem Schritt wieder eine Ableitung ausrechnen muss.
- Um das zu umgehen, kann man zu zwei vereinfachten Verfahren greifen, dem vereinfachten Newton-Verfahren und dem Sekantenverfahren.

Vereinfachtes Newton-Verfahren

- Statt in jedem Schritt $f'(x_n)$ auszurechnen, kann man immer wieder $f'(x_0)$ verwenden.
- Damit ergibt sich die Rekursionsformel:

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_0)} \qquad (n = 0, 1, 2, 3, \ldots).$$

Natürlich wird man erwarten, dass dieses Verfahren weniger gut funktioniert als das originale Newton-Verfahren.

- Tatsächlich konvergiert es langsamer.

Sekantenverfahren

- Hier wird nicht der Schnittpunkt der Tangenten mit der x-Achse berechnet, sondern der Schnittpunkt von Sekanten ('Schneidenden') durch jeweils zwei Punkte $(x_0, f(x_0))$ und $(x_1, f(x_1))$ mit der x-Achse.
- Statt der Ableitung $f'(x_0)$ wird in der Iterationsformel dann die Steigung

$$\frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}$$

der Sekanten eingesetzt und man erhält

$$x_2 = x_1 - \frac{f(x_1)}{\frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}} = x_1 - \frac{x_1 - x_0}{f(x_1) - f(x_0)} \cdot f(x_1)$$

und analog die Iterationsformel

$$x_{n+1} = x_n - \frac{x_n - x_{n-1}}{f(x_n) - f(x_{n-1})} \cdot f(x_n) \qquad (n = 1, 2, 3, \ldots).$$

Sekantenverfahren

- Das Sekantenverfahren ist veranschaulicht in untenstehender Abbildung.
- Es benötigt zwei Startwerte x_0, x_1 und konvergiert langsamer, dafür benötigt es keine Ableitungen.

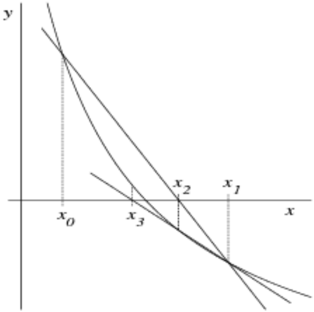


Abbildung: Sekantenverfahren.

Konvergenzgeschwindigkeit

- Wie wir bereits angesprochen haben, unterscheiden sich die Nullstellenverfahren in ihrer Effektivität. Dies wird häufig durch den Begriff der Konvergenzordnung ausgedrückt.

Definition 3.3: Konvergenzordnung [1]

- Sei (x_n) eine gegen $\overline{x}$ konvergierende Folge. Dann hat das Verfahren die **Konvergenzordnung** q≥1 wenn es eine Konstante c > 0 gibt mit

$$|\, x_{n+1} - \overline{x} \,| \leq c \cdot |\, x_n - \overline{x} \,|^q$$

für alle n. Falls $q = 1$ verlangt man noch $c < 1$. Im Fall $q = 1$ spricht man von linearer, im Fall $q = 2$ von quadratischer Konvergenz.

Beispiel 3.5

- Sei $c = 1$ und $|x_0 - \overline{x}| \leq 0.1$. Es gilt dann also z.B. für quadratische Konvergenz nach jeder Iteration, dass der Fehler quadratisch abnimmt:

$$
\begin{aligned}
|x_1 - \overline{x}| &\leq |x_0 - \overline{x}|^2 \leq 0.1^2 = 10^{-2} \\
|x_2 - \overline{x}| &\leq |x_1 - \overline{x}|^2 \leq (10^{-2})^2 = 10^{-4} \\
|x_3 - \overline{x}| &\leq |x_2 - \overline{x}|^2 \leq (10^{-4})^2 = 10^{-8} \\
&\vdots
\end{aligned}
$$

- Bemerkung:
  Es gilt: für einfache Nullstellen konvergiert das Newton-Verfahren quadratisch, das vereinfachte Newton-Verfahren linear, und für das Sekantenverfahren gilt $q = (1+\sqrt{5})/2 = 1.618\ldots$.

Fehlerabschätzung

- Wir haben beim Banachschen Fixpunktsatz (Kap. 3.4) bereits eine Art der Fehlerabschätzung kennengelernt, benötigen dort aber die Konstante α.
- In der Praxis gibt es einfachere Methoden, um abzuschätzen, wie weit eine Näherung x_n nach der n-ten Iteration von der exakten Nullstelle entfernt ist.

Fehlerabschätzung

- Eine einfache Möglichkeit ist es, die Funktion in der Umgebung der Näherung auszuwerten und zu überprüfen, ob ein Vorzeichenwechsel stattfindet.
- Daraus lässt sich gemäss dem Nullstellensatz (Kap. 3.2) schliessen, dass eine Nullstelle innerhalb des betrachteten Intervalls liegen muss und man kann abschätzen, wie weit die Näherung $x_n$von der tatsächlichen Nullstelle entfernt ist.
- Dieses Verfahren ist auf jedes iterative Verfahren zur Nullstellenbestimmung einer Funktion anwendbar, sofern die Nullstelle ungerade Ordnung hat (d.h. sie ist ein Schnittpunkt und nicht ein Berührungspunkt des Funktionsgraphen mit der x-Achse).

Fehlerabschätzung

- Sei x_n also ein iterativ bestimmter Näherungswert einer exakten Nullstelle ξ (ungerader Ordnung) der stetigen Funktion $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ und es gelte für eine vorgegebene Fehlerschranke / Fehlertoleranz $\varepsilon > 0$

$$f(x_n - \varepsilon) \cdot f(x_n + \varepsilon) < 0,$$

dann muss gemäss dem Nullstellensatz im offenen Intervall $(x_n - \varepsilon\,, x_n + \varepsilon)$ eine Nullstelle ξ liegen und es gilt die Fehlerabschätzung:

$$|\, x_n - \xi \,| < \varepsilon$$

Fehlerabschätzung

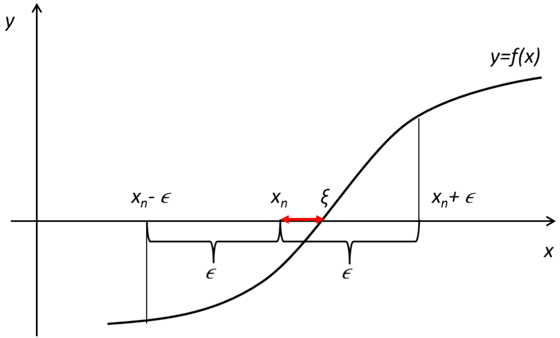


Abbildung: $f(x_n - \varepsilon) \cdot f(x_n + \varepsilon) < 0 \Rightarrow | x_n - \xi | < \varepsilon$(aus [6]).

Beispiel 3.6

- Es soll für $f(x) = x^2 - 2 = 0$ der Fehler für die Näherung $x_3$der Nullstelle mit dem Newton-Verfahren berechnet werden.
- Lösung: Es ist leicht zu sehen dass $f(x_3 - 10^{-5}) < 0$ und $f(x_3 + 10^{-5}) > 0$. Gemäss dem Nullstellensatz (Kap. 3.2) gibt es also eine Nullstelle $x \in [x_3 - 10^{-5}, x_3 + 10^{-5}]$ für die der absolute Fehler $\mid x - x_3 \mid \leq 10^{-5}$ist.
- Tatsächlich gilt $\mid \sqrt{2} - x_3 \mid \approx 2.1 \cdot 10^{-6}$

Fehlerabschätzung

- Um auch den Fall möglicher Berührungspunkten mit der x-Achse oder schlecht konditionierte Probleme abzudecken, empfiehlt es sich sich, in einem Programm zusätzliche Abbruchkriterien einzubauen, da ansonsten die Iteration vielleicht in eine Endlos-Schleife mündet.
- Einfachstes Mittel, ist eine Obergrenze N_{max} für die Anzahl Interationsschritte anzugeben.
- Notwendige (aber nicht hinreichende) Kriterien, um eine Nullstelle zu erkennen, sind für ein vorgegebenes $\varepsilon > 0$ beispielsweise, dass der Funktionswert nach der n-ten Iteration kleiner wird als ε, also $\mid f(x_n) \mid < \varepsilon$, oder auch, dass die Differenz zwischen zwei aufeinanderfolgenden Werten unterhalb eine vorgegebene Schwelle sinkt, also $\mid x_{n+1} - x_n \mid < \varepsilon$.
- Diese Abbruchkriterien liefern aber keine Garantie, dass wir tatsächlich nahe genug an einer Nullstelle daran sind.

Aufgaben 3.6 / 3.7

Siehe Aufgaben im Skript.