Wissenschaftliches Rechnen - Großübung 6.1

Themen: Nullstellensuche, Mehrdimensionale Analysis

Ugo & Gabriel

31. Januar 2023

Aufgabe 1: Nullstellensuche

1. Vergleichen Sie die Verfahren Bisektion, Regula falsi und das Newton-Verfahren zum Finden von Nullstellen. Gehen Sie dabei auf folgende Aspekte ein:
   a) Startvorraussetzungen
   b) Iterationsschritt
   c) Muss die Ableitung bekannt sein?
   d) Konvergenzgeschwindigkeit
   e) Garantie auf Konvergenz
2. Gegeben ist die Funktion $f(x) = x^3 - 2x^2 - 3x + 1$. Führen Sie einen Iterationsschritt mit allen drei oben genannten Verfahren durch. Wählen Sie $x^- = 2$ und $x^+ = -1$ für Bisektion und Regula falsi und $x = 2$ für das Newton-Verfahren.
3. Wie kann man Algorithmen zur Nullstellensuche dazu nutzen, Minima bzw. Maxima zu finden?
4. Wie lautet der Iterationsschritt des Newton-Verfahrens zum finden von Optima einer eindimensionalen Funktion $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$? Was ist der Zusammenhang zur Taylorentwicklung 2. Ordnung von f?

Für eine Funktion $f : \mathbb{C} \to \mathbb{C}$ nennt man $z \in \mathbb{C}$ einen *Fixpunkt*, falls $f(z) = z$. Eine Fixpunktiteration ist ein numerisches Verfahren, bei dem eine Funktion wiederholt auf einen Startwert z_0 angewendet wird, bis man zu einem Fixpunkt z^* konvergiert, d.h. $z^* = f(\dots f(f(z_0))\dots)$.

5. Wie kann man ein Fixpunktproblem $g(z) = z$ in ein Nullstellenproblem $f(z) = 0$ umschreiben?
6. Zeigen Sie, dass man ein Nullstellenproblem $f(z) = 0$ in ein Fixpunktproblem einer Funktion $g : \mathbb{C} \to \mathbb{C}$ umschreiben kann mit

$$g(z) = f(z)\phi(z) + z,$$

   wobei $\phi : \mathbb{C} \to \mathbb{C}$ eine beliebige Funktion ist mit $\phi(z) \neq 0$. Überlegen Sie sich, warum es sinnvoll sein kann ϕ nicht konstant zu wählen.
7. Zeigen Sie, dass das Newton-Verfahren eine Fixpunktiteration ist, indem Sie die Funktion $g : \mathbb{C} \to \mathbb{C}$ angeben, welche iteriert wird.

8. Ein numerisches Verfahren hat eine Konvergenzordnung von $p \geq 1$, falls es eine Konstante $L \geq 0$ und ein $t_0 \in \mathbb{N}$ gibt, sodass

$$|z_{t+1} - z^*| \leq L \cdot |z_t - z^*|^p \quad \text{für alle } t \geq t_0.$$

Zeigen Sie die folgenden Aussagen:

a) Die Fixpunktiteration hat mindestens lineare Konvergenzordnung ($p = 1$).

b) Das Newton-Verfahren hat mindestens quadratische Konvergenzordnung ($p = 2$).

Aufgabe 2: Gradient und Hessematrix

Gegeben ist eine beliebige quadratische Funktion $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, die geschrieben werden kann als

$$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}\mathbf{x}^\mathsf{T}\mathbf{A}\mathbf{x} + \mathbf{b}^\mathsf{T}\mathbf{x} + c$$

wobei $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ symmetrisch ist, $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$ und $c \in \mathbb{R}$.

1. Geben Sie f für die folgenden Werte an:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 4 & 2 \\ 2 & 4 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} -2 \\ -1 \end{bmatrix}, \quad c = 5$$

2. Berechnen Sie alle kritischen Punkte von f für die vorgegebenen Werte und klassifizieren Sie diese (Maximum, Minimum, Sattelpunkt).

3. Das Taylorpolynom 2. Ordnung einer Funktion $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ am Entwicklungspunkt $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^n$ lässt sich durch

$$T_2(f, \mathbf{x}_0, \mathbf{x}) = \frac{1}{2}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)^\mathsf{T}\mathbf{H}_f(\mathbf{x}_0)(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) + (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)^\mathsf{T}\nabla f(\mathbf{x}_0) + f(\mathbf{x}_0)$$

berechnen.

Geben Sie das Taylorpolynom 2. Ordnung von f am Punkt $(x_0, y_0) = (-1, 1)$ an.

4. Geben Sie den Gradienten und die Hessematrix von f im allgemeinen Fall an.

5. In welchen Fällen hat f kritische Punkte? Geben Sie, falls sie existieren, eine Formel für diese an.

6. Eine Funktion heißt *konvex*, falls für alle $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$ und alle $\alpha \in [0, 1]$ gilt, dass

$$f(\alpha\mathbf{x} + (1 - \alpha)\mathbf{y}) \leq \alpha f(\mathbf{x}) + (1 - \alpha)f(\mathbf{y})$$

Zeigen Sie: Die Funktion f ist genau dann konvex, wenn $\mathbf{A}$ positiv semidefinit ist.

7. Für ein $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n\times m}$ und ein $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$ möchten wir folgende Funktion $f : \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}$ minimieren:

$$f(\mathbf{x}) = \|\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}\|^2$$

wobei $\mathbf{A}$ überbestimmt und $\|\cdot\|$ die ℓ^2-Norm ist.

   a) Um welches Ihnen wohlbekannte Problem handelt es sich hierbei?
   b) Finden Sie einen geschlossenen Ausdruck für einen kritischen Punkt $\mathbf{x}^*$, indem Sie den Gradienten von f berechnen und ihn mit dem Nullvektor gleichsetzen.
   c) Begründen Sie, warum der gefundene Punkt ein Minimum ist.
   d) Begründen Sie anschließend, warum der gefundene Punkt sogar das globale Minimum von f ist.