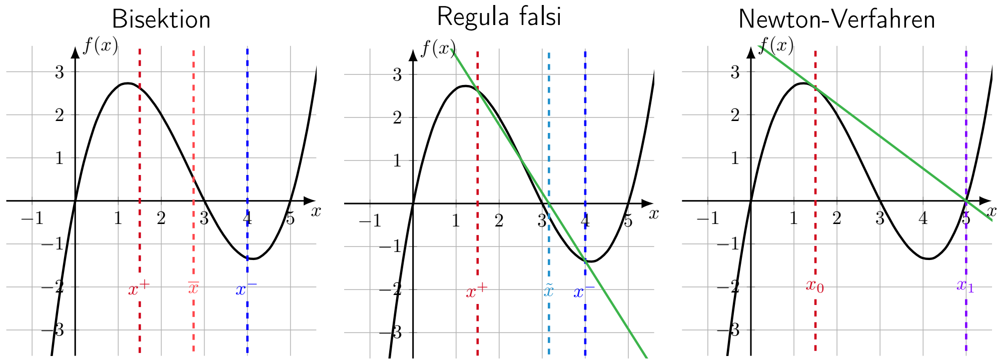
Wissenschaftliches Rechnen - Übung 6.1

Nullstellensuche & Mehrdimensionale Analysis

29.01.2024 bis 02.02.2024

Aufgabe 1: Nullstellensuche

Gegeben ist die Funktion $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ mit $f(x) = \frac{1}{3}x^3 - \frac{8}{3}x^2 + 5x$, welche in den unteren Abbildungen nochmal skizziert ist.



Von dieser möchten wir eine Nullstelle mithilfe von Bisektion, Regula falsi und des Newton-Verfahrens finden.

1. Wie lautet der Iterationsschritt der drei oben genannten Verfahren zum Finden einer Nullstelle einer univariaten Funktion $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$? Führen Sie einen Iterationsschritt mit jedem dieser Verfahren durch. Wählen Sie $x^- = 4$ und $x^+ = \frac{3}{2}$ für Bisektion und Regula falsi und $x_0 = \frac{3}{2}$ für das Newton-Verfahren. Visualisieren Sie den Iterationsschritt der Verfahren in den Abbildungen. Gegen welche Nullstelle konvergiert das jeweilige Verfahren?

Lösung

Im Allgemeinen lauten die Iterationsvorschriften:

- Bisektion: Sei $\overline{x} = \frac{x^+ + x^-}{2}$ der Durchschnitt der zwei Stellen. Falls $f(\overline{x}) > 0$ dann $x^+ \leftarrow \overline{x}$, sonst $x^- \leftarrow \overline{x}$. Das Intervall wird also in jedem Schritt halbiert.
- Regula falsi: Sei $\tilde{x} = \frac{x^+ f(x^-) - x^- f(x^+)}{f(x^-) - f(x^+)}$ die Nullstelle der Sekante von f zwischen den Stellen x^- und x^+. Falls $f(\tilde{x}) > 0$ dann $x^+ \leftarrow \tilde{x}$, sonst $x^- \leftarrow \tilde{x}$.
- Newton: Die nächste Stelle ist die Nullstelle der Tangente (Taylorentwicklung 1. Ordnung) von f an der Stelle x_t, also $x_{t+1} \leftarrow x_t - \frac{f(x_t)}{f'(x_t)}$.

Und für unsere konkreten Werte:

- Bisektion: Es gilt
$$\overline{x} = \frac{4 + \frac{3}{2}}{2} = \frac{11}{4}$$
und da $f(\frac{11}{4}) > 0$, ist bleibt x^- unverändert und x^+ erhält den Wert $\frac{11}{4}$. Das Verfahren konvergiert irgendwann gegen die Nullstelle $x = 3$.
- Regula falsi: Die Nullstelle der Sekante ist
$$\tilde{x} = \frac{-\frac{3}{2} \cdot \frac{4}{3} - 4 \cdot \frac{21}{8}}{-\frac{4}{3} - \frac{21}{8}} = \frac{-\frac{4}{2} - \frac{21}{2}}{-\frac{32}{24} - \frac{63}{24}} = \frac{24 \cdot (4 + 21)}{2 \cdot (32 + 63)} = \frac{60}{19}.$$
Da $f\left(\frac{60}{19}\right) < 0$, wird x^- zu $\frac{60}{19}$ und x^+ behält den Wert $\frac{3}{2}$. Das Verfahren konvergiert irgendwann gegen die Nullstelle $x = 3$.

- Newton-Verfahren: Die erste Ableitung ist $f'(x) = x^2 - \frac{16}{3}x + 5$. Dann gilt $f(\frac{3}{2}) = \frac{21}{8}$ sowie $f'(\frac{3}{2}) = -\frac{3}{4}$. Die neue Stelle ist

$$x_1 = \frac{3}{2} - \frac{f(\frac{3}{2})}{f'(\frac{3}{2})} = \frac{3}{2} - \frac{\frac{21}{8}}{-\frac{3}{4}} = 5.$$

Damit ist das Verfahren gegen die Nullstelle $x = 5$ konvergiert.

Lösung Ende

2. Vergleichen Sie die drei zuvor angewandten Verfahren zur Nullstellensuche. Füllen Sie dazu die folgende Tabelle aus.

Verfahren	Bisektion	Regula falsi	Newton-Verfahren
Startbedingungen	$f(x^+) > 0$, $f(x^-) < 0$	$f(x^+) > 0$, $f(x^-) < 0$	$x_0 \in \mathbb{R}$
Zusätzliche Voraussetzungen	keine	keine	Erste Ableitung bekannt
Garantie auf Konvergenz	ja	ja	nein
Konvergenz-ordnung	linear	linear	quadratisch

Lösung

Anmerkung zur Konvergenzordnung: Es ist für manche verwirrend, weshalb die Bisektion nur lineare und nicht exponentielle Konvergenzordnung hat, obwohl das Intervall in jedem Schritt halbiert wird. Jedoch bezieht sich die Konvergenzordnung auf die Eingabegröße, welche Binärzahlen sind. Pro Iteration ist die Nullstelle um eine binäre Stelle genauer, folglich lineare Konvergenzordnung.

Anmerkung zur Konvergenzgarantie: Dies gilt nur für die Theorie, in der man annimmt, dass die Funktion stetig ist.

Lösung Ende

3. Diskutieren Sie sinnvolle Abbruchbedingungen für alle drei Verfahren. Erläutern Sie den Einfluss der Verwendung von Gleitkommazahlen auf die oben genannten Verfahren.

Lösung

Für alle drei Verfahren gibt es viele Verschiedene Abbruch- bzw. Konvergenzkriterien, die meist in Kombination verwendet werden.

Bisektion:

a) Der Funktionswert ist nah an der Null: $|f(\overline{x})| < \epsilon$
b) Die Intervallgrenzen sind sehr dicht aneinander: $|x^+ - x^-| < \epsilon$

Regula falsi:

a) Der Funktionswert ist nah an der Null: $|f(\tilde{x})| < \epsilon$
b) Die Intervallgrenzen sind sehr dicht aneinander: $|x^+ - x^-| < \epsilon$
c) Die Sekantensteigung ist sehr gering: $\left|\frac{f(x^+)-f(x^-)}{x^+-x^-}\right| < \epsilon$

Newton-Verfahren:

a) Der Funktionswert ist nah an der Null: $|f(x_t)| < \epsilon$
b) Kaum Änderung in der Stelle: $|x_{t+1} - x_t| < \epsilon$
c) Die Tangentensteigung ist sehr gering: $|f'(x_t)|$

d) Für das Newton-Verfahren muss zusätzlich eine maximale Anzahl an Iterationsschritten gesetzt werden, da das Verfahren nicht konvergieren muss. In der Regel setzt man aber für alle Verfahren eine maximale Schrittzahl.

Dabei ist ϵ stets eine individuelle Toleranzgrenze. Folgen von Gleitkommazahlen:

a) Die Funktionen bzw. Funktionswerte sind diskret, es gibt keine exakten Nullstellen

b) Numerische Fehler (u.a. Auslöschung, Über- und Unterläufe) sind zu beachten

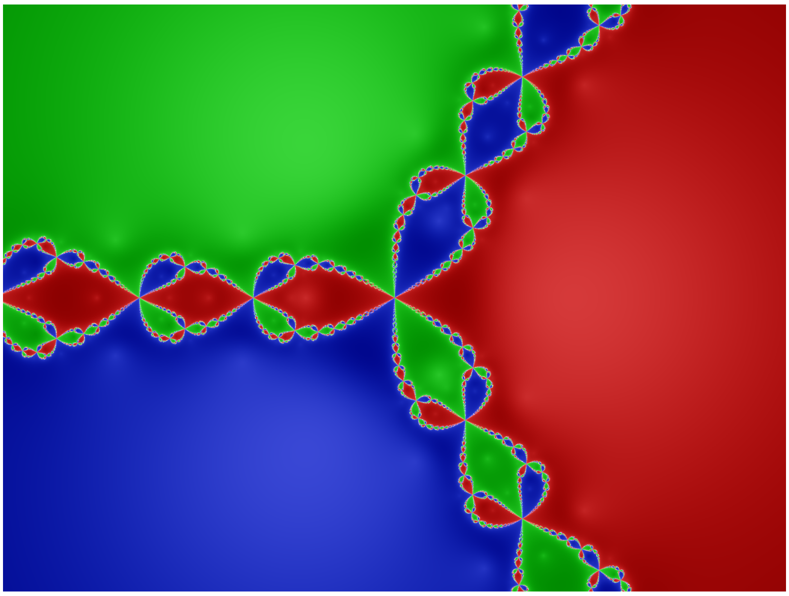
c) Funktionen sind damit nicht stetig (was beispielsweise Annahme für die Konvergenz von Bisektion und Regula falsi ist)

Lösung Ende

4. Das Newton-Verfahren kann, anders als die anderen beiden, exakt so verwendet werden, um komplexe Nullstellen zu finden. In diesem Kontext spricht man von Newton-Fraktalen. Worum handelt es sich bei diesen und was sagt ihre Struktur über das Newton-Verfahren aus?

Lösung

Das Ergebnis des Newton-Verfahrens hängt vom Startpunkt ab, den man wählt: Für unterschiedliche Startpunkte konvergiert das Verfahren eventuell gegen unterschiedliche Nullstellen bzw. kann für manche Startpunkte divergieren. Die (disjunkten) Gebiete $D_i \subseteq \mathbb{C}$, in denen das Verfahren gegen dieselbe Nullstelle konvergiert, nennt man Attraktoren. Im Folgenden sind beispielsweise die Fraktale für die Funktion $f(z) = z^3 - 1$ dargestellt (entnommen aus Wikipedia).



Man sieht, dass die Attraktoren keine zusammenhängende Gebiete sind und sich rekursiv wiederholende Patterns bilden, die immer kleiner werden. Dies zeigt das chaotische Konvergenzverhalten des Newton-Verfahrens: Eine minimale Änderung des Startpunktes kann dazu führen, dass das Verfahren zu einer anderen Nullstelle konvergiert.

Lösung Ende

5. Wie kann man Algorithmen zur Nullstellensuche zum Optimieren nutzen, d.h. um Minima bzw. Maxima zu finden? Wie sieht die entsprechende Iteration des Newton-Verfahrens aus?

Lösung

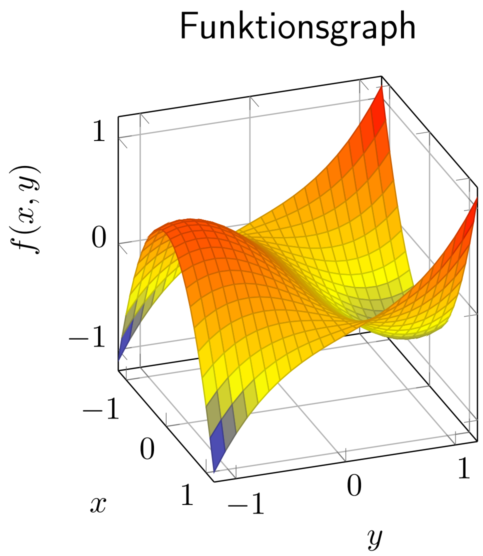
Extrema von f sind Nullstellen ihrer Ableitung f'. Somit suchen wir eine Nullstelle der Ableitung, was für das Newton-Verfahren zu folgender Iterationsvorschrift führt:

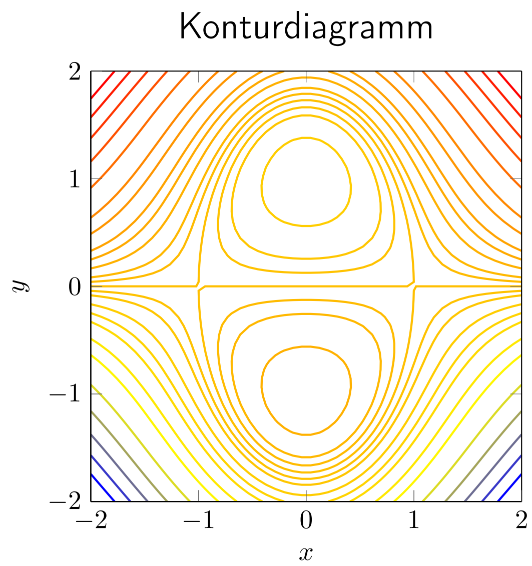
$$x_{t+1} \leftarrow x_t - \frac{f'(x)}{f''(x)}.$$

Lösung Ende

Aufgabe 2: Mehrdimensionale Analysis

Im Folgenden möchten wir die Funktion $f : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ mit $f(x, y) = \frac{1}{3}y^3 - y + x^2 y$ analytisch optimieren. Diese ist im Folgenden auf zwei Arten dargestellt: der Funktionsgraph als Fläche und ein Konturdiagramm, in welchem einige Niveaumengen von f dargestellt sind.





1. Was ist eine Niveaumenge?

   Lösung

   Eine Niveaumenge einer Funktion $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ zum Niveau $c \in \mathbb{R}$ ist die Menge aller Punkte $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$, für die $f(\mathbf{x}) = c$ gilt.

   Lösung Ende

2. Berechnen Sie alle partiellen Ableitungen von f. Welche geometrische Bedeutung hat die partielle Ableitung?

   Lösung

   Die partiellen Ableitungen kann berechnet man analog zur üblichen Ableitung, wobei man nach einer Variable differenziert und alle anderen Variablen als Konstanten behandelt.

$$\frac{\partial f}{\partial x}(x, y) = 2xy, \quad \frac{\partial f}{\partial y}(x, y) = y^2 + x^2 - 1$$

   Die partielle Ableitung nach x gibt die Steigung von f in die Richtung $(1, 0)$ an. Analog gibt die partielle Ableitung nach y die Steigung in Richtung $(0, 1)$ an. Mithilfe der Linearität lässt sich die (Richtungs)Ableitung von f in alle Richtungen berechnen.

   Lösung Ende

3. Was ist der Gradient ∇f einer skalaren Funktion $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ und welche Eigenschaften hat er im Allgemeinen? Geben Sie den Gradienten von f explizit an.

   Lösung

   Der Gradient $\nabla f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ ist ein Vektorfeld, dessen Einträge die partiellen Ableitungen von f sind:

$$\nabla f(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_1}(\mathbf{x}) \\ \vdots \\ \frac{\partial f}{\partial x_n}(\mathbf{x}) \end{bmatrix}.$$

   Der Gradient der oben genannten Funktion ist somit $\nabla f(x, y) = (2xy, y^2 + x^2 - 1)^\mathsf{T}$. Der Gradient hat folgende Eigenschaften:

- Er zeigt in die Richtung des stärksten Anstiegs von f.
- Er steht orthogonal zu den Tangenten der Niveaulinien.
- Seine Länge entspricht der Stärke des Anstiegs.
- In einem Minimum/Maximum/Sattelpunkt (in einem sogenannten kritischen Punkt) wird der Gradient zum Nullvektor.

Lösung Ende

4. Was ist die Hesse-Matrix $\mathbf{H}_f$ einer skalaren Funktion $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ und welche Eigenschaften hat sie? Berechnen Sie die Hesse-Matrix von f.

Lösung

Die Hesse-Matrix $\mathbf{H}_f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^{n\times n}$ ist die Matrix mit den zweiten partiellen Ableitungen:

$$\mathbf{H}_f(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_n} \end{bmatrix}.$$

Für die Hesse-Matrix gelten folgende Eigenschaften:

- Falls f zweimal stetig differenzierbar ist, gilt $\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} = \frac{\partial^2 f}{\partial x_j \partial x_i}$ (Satz von Schwarz) und die Hesse-Matrix ist symmetrisch.
- Ihre Definitheit gibt Aussage über die Krümmung der Funktion bzw. der Taylorentwicklung zweiter (und höherer) Ordnung am besagten Punkt.

Unsere Funktion hat folgende Hesse-Matrix:

$$\mathbf{H}_f(x, y) = \begin{bmatrix} 2y & 2x \\ 2x & 2y \end{bmatrix}.$$

Lösung Ende

5. Berechnen Sie alle kritischen Punkte von f. Untersuchen Sie, ob es sich bei diesen um ein lokales Minimum, Maximum oder einen Sattelpunkt handelt.

Lösung

Die kritischen Punkte sind die Nullstellen des Gradienten. Setzen wir den Gradienten gleich null

$$\begin{bmatrix} 2xy \\ y^2 + x^2 - 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix},$$

so erhalten wir aus der ersten Gleichung die zwei Fälle $x = 0$ und $y = 0$. Falls $x = 0$, so muss $y^2 - 1 = 0$ gelten, was die zwei kritischen Punkte $(0, 1)$ und $(0, -1)$ sind. Falls $y = 0$, so muss $x^2 - 1 = 0$ gelten, was weiteren zwei kritischen Punkten $(1, 0)$ und $(-1, 0)$ entspricht.

Zur Klassifikation von kritischen Punkten gibt es folgendes hinreichendes Kriterium: Falls $\mathbf{x}^*$ ein kritischer Punkt ist, also $\nabla f(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}$, dann gilt:

$$\mathbf{x}^* \text{ ist ein } \begin{cases} \text{lokales Minimum,} & \text{falls } \mathbf{H}_f(\mathbf{x}^*) \text{ positiv definit ist,} \\ \text{lokales Maximum,} & \text{falls } \mathbf{H}_f(\mathbf{x}^*) \text{ negativ definit ist,} \\ \text{Sattelpunkt,} & \text{falls } \mathbf{H}_f(\mathbf{x}^*) \text{ indefinit ist.} \end{cases}$$

Dieses Kriterium ist aber nicht notwendig (siehe zum Beispiel Funktion $x^4 + y^4$).

Wir berechnen nun die Hesse-Matrix an unseren vier kritischen Punkten:

- Punkt $(1, 0)$:
$$\mathbf{H}_f(1,0) = \begin{bmatrix} 0 & 2 \\ 2 & 0 \end{bmatrix}$$
Die Hesse-Matrix hat eine Determinante von -4. Damit muss sie einen positiven und einen negativen Eigenwert haben und somit ist $(1, 0)$ ein Sattelpunkt.
- Punkt $(-1, 0)$:
$$\mathbf{H}_f(-1,0) = \begin{bmatrix} 0 & -2 \\ -2 & 0 \end{bmatrix}$$
Die Hesse-Matrix ebenfalls hat eine Determinante von -4. Damit muss sie einen positiven und einen negativen Eigenwert haben und somit ist $(-1, 0)$ ein Sattelpunkt.
- Punkt $(0, 1)$:
$$\mathbf{H}_f(0,1) = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix}$$
Die Hesse-Matrix ist eine Diagonalmatrix mit den Eigenwerten $\lambda_1 = \lambda_2 = 2$. Da alle Eigenwerte größer als null sind, ist sie positiv definit und der Punkt $(0, 1)$ ein lokales Minimum.
- Punkt $(0, -1)$:
$$\mathbf{H}_f(0,1) = \begin{bmatrix} -2 & 0 \\ 0 & -2 \end{bmatrix}$$
Die Hesse-Matrix ist eine Diagonalmatrix mit den Eigenwerten $\lambda_1 = \lambda_2 = -2$. Da alle Eigenwerte kleiner als null sind, ist sie negativ definit und der Punkt $(0, -1)$ ein lokales Maximum.

Lösung Ende

6. Ist unter den gefundenen kritischen Punkten das globale Maximum bzw. Minimum dabei?

Lösung

Nein, denn zum Beispiel gilt für ein festes $x \in \mathbb{R}$:

- $f(x, y) \xrightarrow{y \to -\infty} -\infty$ bzw.
- $f(x, y) \xrightarrow{y \to \infty} \infty$.

Die Funktion hat auf ihrem Definitionsbereich keine globalen Extrema.

Lösung Ende