Datum: 04.07.2018, Münster
Jonathan Max Sigrist <441760>

Einführung in das wissenschaftliche Programmieren - Physik
Do, 14:00-16:00; Raum ACP W410

Übung 8 - Nullstellensuche

Aufgabe 1

a) Das Programm ‚bisection.f90' bestimmt in verschiedenen Intervallen Nullstellen mit der Bisektionsmethode. Dabei ist die zu untersuchende Funktion in einer eigenen Subroutine geschrieben und lässt sich so leicht anpassen.
Zuerst werden die Parameter überprüft. Falls `a>b`, dann werden beide miteinander vertauscht. Falls dann nicht `a<0<b` gilt, bricht die Subroutine ab, da dann nicht unbedingt eine Nullstelle im Intervall liegt.
Das Intervall wird so lange halbiert, bis $|f(x_C)|<\varepsilon$. Dabei bleibt jeweils der Teil übrig, für den weiterhin `a<0<b` gilt.
Um die benötigten Iterationen zu messen, läuft eine Zählvariable mit. Bei [-4, 4] sind es 19 Iterationen. Bei [4,6] sind es 17 Iterationen.

b) Das Programm ‚newton.f90' bestimmt die Nullstelle einer Funktion mit dem Newton-Raphson-Verfahren. Dabei wird die Ableitung der Funktion an einer Stelle benötigt. Schaut man sich die extrapolierte Differenzmethode an, so folgt $f'_{eD}(x)=\frac{4f'_{zD}(x;h/2)-f'_{zD}(x;h)}{3}$ und weiter für den Approximationsfehler $\varepsilon_{\mathrm{eD}}^{\mathrm{approx}}=\frac{h^4}{5760}f^{(5)}(x)$ und schließlich für die ideale Schrittweite $h_{\mathrm{eD}}^{\mathrm{opt}}=\sqrt[5]{\frac{45000}{f^{(5)}(x)}\frac{1}{50}}\approx 0.170480$ für $\varepsilon_{\mathrm{M}}=10^{-7}$ und $\sqrt[5]{f^{(5)}(x)}=1$, was bei der fünften Wurzel einigermaßen realistisch ist.
Jetzt kann der Wert nach und nach angenähert werden.
Diese Methode benötigt deutlich weniger Iterationen. Für den Startwert `x=-4.0` und `x=4.0` folgen 5 Iterationen, bei `x=6.0` auch nur 6 Iterationen. Wählt man den Startpunkt allerdings ungeschickt, z. B. Zu hoch bei `x=90.0` oder gerade auf einem Hochpunkt `x=2.7`, so scheitert diese Methode und gibt nur `NaN` aus.

Im Vergleich ist die Newton-Raphson-Methode meist zwar schneller, aber nicht immer praktikabel anwendbar und die Bisektionsmethode kann in solchen Fällen durchaus von Nutzen sein.