2. Lösung einer nichtlinearen Gleichung

2.1. Problemstellung

Definition (2.1. Nullstellen-Problem)

gegeben : skalare Funtion $f : [a,b] \to \mathbb{R}$ auf Intervall $[a,b]$

gesucht : eine (bzw. alle) Nullstelle(n) von $f(x)$ in $[a,b]$, d.h.

Finde $x^* \in [a,b]$ so dass $\boxed{f(x^*) = 0}$

Überführung auf Nullstellen-Problem :

Bsp. : nichtlineare Gleichung $\boxed{x = -e^x}$

$\Leftrightarrow$ Nullstellen-Problem $\boxed{f(x) = x + e^x = 0}$

Lösbarkeit : für **stetige Funktionen** über den Zwischenwert-Satz . . .

Der Zwischenwert-Satz

Theorem (2.2 Zwischenwert-Satz)

Vor. :
- $f(x)$ *ist* *stetig* *auf* $[a,b]$
- *es existieren* x_1, x_2 *mit* $a \leq x_1 < x_2 \leq b$ *und*

$$f(x_1)f(x_2) < 0 \qquad \textit{(Vorzeichenwechsel)}$$

Beh. : es existiert mindestens eine *Nullstelle* x^* *mit*

$$x_1 < x^* < x_2 \qquad \textit{und} \qquad f(x^*) = 0$$

Bestimmung von x_1, x_2 **:**

- systematisches Probieren mit Wertetabelle
- `plot` - Funktion von Matlab $\Rightarrow$ Ablesen von x_1, x_2

2.2. Bisektionsverfahren

Ziel : löse die Gleichung $\boxed{f(x) = 0}$ für $x \in [a, b]$

Bisektionsverfahren (Toleranz TOL)

Start :

finde Startintervall $[a_0, b_0] \subset [a, b]$ so dass $f(a_0)f(b_0) < 0$

Iterationsschritt : $[a_k, b_k] \to [a_{k+1}, b_{k+1}]$

- berechne $x_k = \frac{1}{2}(a_k + b_k)$ und $y_k = f(x_k)$
- falls $|y_k| <$ TOL , so $x^* = x_k$ und **STOP** !

$$[a_{k+1}, b_{k+1}] := \begin{cases} [a_k, x_k] & \text{falls} \quad f(a_k)y_k < 0 \\ [x_k, b_k] & \text{sonst} \end{cases}$$

Fehlerabschätzung zum Bisektionsverfahren

aus $x^* \in [a_k, b_k]$ und $x_k = \frac{1}{2}(a_k + b_k)$ folgt:

$$\boxed{|x_k - x^*| \leq \frac{1}{2}(b_k - a_k)}$$

induktiv ergibt sich:

$$b_k - a_k = \frac{1}{2}(b_{k-1} - a_{k-1}) = \frac{1}{2^2}(b_{k-2} - a_{k-2}) = \cdots = \frac{1}{2^k}(b_0 - a_0)$$

woraus wir insgesamt erhalten :

$$\boxed{|x_k - x^*| \leq \frac{1}{2^{k+1}}(b_0 - a_0)} \quad \forall\, k = 0, 1, \ldots$$

$\Rightarrow$ Konvergenz des Bisekt.-Verfahrens : $\lim_{k\to\infty} |x_k - x^*| = 0$

2.3. Newton-artige Verfahren

Prinzip : iterative Verbesserung einer Startnäherung x_0 :

$$x_0 \to x_1 \to x_2 \to \cdots \to x_n \to x_{n+1} \to \dots$$

einstufige Verfahren : $\boxed{x_{n+1} := \phi(x_n)}$ $\quad n = 0, 1, \dots$

zweistufige Verfahren : $\boxed{x_{n+1} := \phi(x_n, x_{n-1})}$ $\quad n = 1, 2, \dots$

die Funktion ϕ heißt "Iterationsfunktion"

Idee : lokale Linearisierung von $f(x)$:

1. ersetze $f(x)$ in Umgebung von x_n durch eine lineare Funktion $L_n(x)$, d.h.

$$f(x) \approx L_n(x) \qquad \forall\, x \in U(x_n)$$

2. bestimme x_{n+1} aus: $\boxed{L_n(x_{n+1}) = 0}$

Wahl von L_n

Bedingungen an $L_n(x)$:

1. Gerade $L_n(x)$ geht durch den Punkt $(x_n, f(x_n))$
2. Gerade $L_n(x)$ hat den **Anstieg** $\boxed{\mu_n \approx f'(x_n)}$

$$\Rightarrow \qquad L_n(x) = f(x_n) + \mu_n(x - x_n)$$

Bestimmung von x_{n+1} :

die lineare Gleichung $\boxed{L_n(x_{n+1}) = 0}$ hat die Lösung :

$$\boxed{x_{n+1} = x_n - {\mu_n}^{-1} f(x_n)}$$ **Newton-artiges Verfahren**

"klassisches Newton-Verfahren":

Wahl $\mu_n := f'(x_n) \quad \Rightarrow \quad \boxed{x_{n+1} = x_n - \Big(f'(x_n)\Big)^{-1} f(x_n)}$

Sekanten-Verfahren

Aufwand beim klassischen Newton-Verfahren : pro Schritt ist zu tun :

- berechne Funktionswert $f(x_n)$
- berechne **Ableitung** $f'(x_n)$

Sekanten-Verfahren :

- verwende den Differenzenquotient:

$$\mu_n := \frac{f(x_n) - f(x_{n-1})}{x_n - x_{n-1}} \approx f'(x_n)$$

- es ergibt sich das ableitungs-freie **Sekanten-Verfahren** :

$$\boxed{x_{n+1} = x_n - \frac{x_n - x_{n-1}}{f(x_n) - f(x_{n-1})} f(x_n)}$$ mit 2 Startwerten x_0, x_1

- Aufwand pro Schritt: berechne Funktionswert $f(x_n)$

2.4. Fixpunkt-Iteration

Fixpunkt-Iteration

- **Start :** wähle Startwert $x_0 \in [a, b]$
- **Iterationsschritt :** berechne $\boxed{x_{n+1} = \phi(x_n)}$
- x^* heißt **Fixpunkt** von ϕ , wenn $\boxed{x^* = \phi(x^*)}$

Konvergenz der Fixpunkt-Iteration liegt vor wenn :

$$\exists\, g \in \mathbb{R} \quad \text{so dass :} \quad g = \lim_{n\to\infty} x_n$$

Beispiel : Newton-Verf. $x_{n+1} = \phi(x_n) := x_n - \big(f'(x_n)\big)^{-1} f(x_n)$

beachte : Sekanten-Verfahren ist **keine Fixpunkt-Iteration** :

$$x_{n+1} = x_n - \frac{x_n - x_{n-1}}{f(x_n) - f(x_{n-1})} f(x_n) = \phi(x_n, x_{n-1})$$ **zweistufiges Verf.**

Der Banach' sche Fixpunkt-Satz

Theorem (2.3. Banach' scher Fixpunkt-Satz)

Vor. :
- $\phi : D \to \mathbb{R}$ *sei* **Selbstabbildung** *auf* $[a, b]$ *:*

$$\phi(x) \in [a, b] \quad \forall\, x \in [a, b]$$

- ϕ *sei* **kontraktiv** *auf* $[a, b]$ *mit* **Kontraktions-Konst.** $q < 1$*:*

$$|\phi(x_1) - \phi(x_2)| \leq q\, |x_1 - x_2| \quad \forall\, x_1, x_2 \in [a, b]$$

Beh. :
- *es gibt* **genau einen Fixpunkt** $x^* = \phi(x^*)$ *in* $[a, b]$
- *die Folge* $\boxed{x_{n+1} = \phi(x_n)}$ *konvergiert gegen* x^* *für jeden Startwert* $x_0 \in [a, b]$
- **a priori Absch. :** $|x_n - x^*| \leq \dfrac{q^n}{1 - q} |x_1 - x_0|$
- **a posteriori Absch. :** $|x_n - x^*| \leq \dfrac{q}{1 - q} |x_n - x_{n-1}|$

Bestimmung der Kontraktionskonstanten

Lemma (2.4. Bestimmung der Kontraktionskonstanten)

Vor. : ϕ *sei* **stetig differenzierbar** *auf* $[a, b]$

Beh. : die kleinste **Kontraktionskonstante** q *mit*

$$|\phi(x_1) - \phi(x_2)| \leq q\, |x_1 - x_2| \quad \forall\, x_1, x_2 \in [a, b]$$

ist die Zahl

$$q = M := \max_{x \in [a,b]} |\phi'(x)|.$$

Bew' idee : nach dem Mittelwertsatz gilt

$$|\phi(x_1) - \phi(x_2)| = |\phi'(\xi)(x_1 - x_2)| \leq M\, |x_1 - x_2|$$

wobei ξ ein Punkt zwischen $x_1, x_2 \in [a, b]$ ist

Prüfen der Vor. des Banach' schen Fixpunkt-Satzes

2.5. Prüfen auf "kontraktiv"

- falls $M := \max_{x\in[a,b]} |\phi'(x)| \geq 1$, so ist ϕ **nicht kontraktiv** auf $[a,b]$
- falls $M := \max_{x\in[a,b]} |\phi'(x)| < 1$, so ist ϕ **kontraktiv** auf $[a,b]$ mit $q = M$

2.6. Prüfen auf "Selbstabbildung"

- **wenn** $\phi(a), \phi(b) \in [a,b]$ u. $\phi'(x) \geq 0$ oder $\phi'(x) \leq 0 \ \forall\, x \in [a,b]$,

  dann ist ϕ auf $[a,b]$ **Selbstabbildung**

- ϕ ist auf $[a,b]$ **Selbstabbildung**, genau dann wenn

$$a \leq \min_{x\in[a,b]} \phi(x) \leq \max_{x\in[a,b]} \phi(x) \leq b.$$

anziehender und abstoßender Fixpunkt

Definition (2.7.)

- x^* heißt **abstoßender Fixpunkt** von ϕ, wenn $|\phi'(x^*)| > 1$
- x^* heißt **anziehender Fixpunkt** von ϕ, wenn $|\phi'(x^*)| < 1$

- abstoßender Fixpunkt : $|\phi'(x^*)| > 1$, sei ϕ' stetig

$\Rightarrow \exists \quad U_r(x^*) := [x^* - r, x^* + r]$ mit $|\phi'(\xi)| \geq F > 1 \quad \forall\, \xi \in U_r(x^*)$

$\Rightarrow$ sobald $x_n \in U_r(x^*)$, findet **Fehlervergrößerung** statt :

$$\underbrace{|x_{n+1} - x^*|}_{\text{neuer Fehler}} = |\phi(x_n) - \phi(x^*)| = |\phi'(\xi)\,(x_n - x^*)| \geq F\,\underbrace{|x_n - x^*|}_{\text{alter Fehler}}$$

- anziehender Fixpunkt : $|\phi'(x^*)| < 1$, sei ϕ' stetig

$\Rightarrow \exists \quad U_r(x^*) := [x^* - r, x^* + r]$ mit $|\phi'(\xi)| \leq q < 1 \quad \forall\, \xi \in U_r(x^*)$

$\Rightarrow$ **Banach' scher Fixpunkt-Satz gilt** mit $[a, b] = U_r(x^*)$

Anwendung auf das "klassische Newton-Verfahren"

Newton : $x_{n+1} = \phi(x_n)$ mit $\boxed{\phi(x) = x - (f'(x))^{-1} f(x)}$

$$\Rightarrow \phi'(x) = 1 + (f'(x))^{-2} f''(x) f(x) - \underbrace{(f'(x))^{-1} f'(x)}_{=1} = (f'(x))^{-2} f''(x) f(x)$$

jede Lösung x^* mit $\boxed{f(x^*) = 0}$ ist **Fixpunkt**, denn $\boxed{\phi(x^*) = x^*}$

und es gilt :

wenn $f(x^*) = 0,\ f'(x^*) \neq 0,$ dann $\boxed{|\phi'(x^*)| = 0}$

wenn $f(x^*) = f'(x^*) = 0,\ f''(x^*) \neq 0,$ dann $|\phi'(x^*)| = 1/2$

wenn x^* ist m-fache Nullstelle von f, dann $|\phi'(x^*)| = 1 - 1/m$

modifiz. Newton : $x_{n+1} = \tilde{\phi}(x_n)$ mit $\boxed{\tilde{\phi}(x) = x - m\,(f'(x))^{-1} f(x)}$

dann gilt : $|\tilde{\phi}'(x^*)| = 0$

2.5. Konvergenzordnung von Iterationsverfahren

Definition (2.8. "Konvergenzordnung")

- eine konvergente Näherungsfolge $(x_n)_{n=0}^{\infty}$ mit $x^* = \lim_{n\to\infty} x_n$ hat die **Konvergenzordnung** p, wenn gilt

$$|x_{n+1} - x^*| \leq q\,|x_n - x^*|^p \qquad \forall\, n = 0, 1, \ldots .$$

  wobei die Konstante q den **Konvergenzfaktor** bezeichnet

- im Fall $p = 1$ (**lineare Konvergenz**) fordert man $q < 1$
- im Fall $p = 2$ spricht man von **quadratischer Konvergenz**

Fehlerabschätzung bei linearer Konvergenz (p=1) :

$$|x_n - x^*| \leq q|x_{n-1} - x^*| \leq q^2|x_{n-2} - x^*| \leq q^n|x_0 - x^*| \leq q^n(b-a)$$

Konvergenz bei (p>1) :

$x_n \to x^*$ für $n \to \infty$, falls x_0 nahe genug an x^*

Praktische Bedeutung der Konvergenzordnung

Fall p=1 :

- pro Schritt wird der absolute Fehler **um einen festen Faktor** $q < 1$ **gedämpft** :

$$|x_n - x^*| \leq q|x_{n-1} - x^*|$$

- z.B. : für $q = 0.1$ gewinnt man etwa 1 Dezimalstelle pro Schritt

Fall p>1 :

- pro Schritt **ver-p-facht** man in etwa die **Zahl der richtigen Stellen** :

$$\underbrace{|x_n - x^*| \leq 10^{-s}}_{s \text{ Stellen genau}} \quad \Rightarrow \quad \underbrace{|x_{n+1} - x^*| \leq q \cdot 10^{-ps}}_{ps \text{ Stellen genau}}$$

- z.B. : **Newton-Verf.** : $p = 2$ $\Rightarrow$ in etwa Verdopplung der gültigen Stellenzahl pro Schritt

quadratische Konvergenz der Fixpunkt-Iteration

Theorem (2.9. quadratische Konvergenz)

Vor. :
- $\phi(x)$ *sei* **zweimal stetig differenzierbar** *in Umgebung des Fixpunktes* x^*
- $\phi'(x^*) = 0$

Beh. : Fixpunkt-Iteration $\boxed{x_{n+1} = \phi(x_n)}$ *hat eine* **Konvergenzordnung** $p \geq 2$ *, sofern der Startwert* x_0 *hinreichend nahe bei* x^* *liegt*

Anwendung : **klassisches Newton-Verfahren** (Vor.: $f'(x^*) \neq 0$)

$$\phi(x) = x - (f'(x))^{-1} f(x) \quad \Rightarrow \quad \phi'(x^*) = (f'(x^*))^{-2} f''(x^*) f(x^*) = 0$$

$\Rightarrow$ **Konvergenzordnung** $p \geq 2$

Bemerkungen zum Newton-Verfahren

- ist x^* eine m - fache Nullstelle von $f(x)$ mit $m \geq 2$, so konvergiert Newton **nur linear**, denn $\phi'(x^*) = 1 - 1/m \neq 0$; aber das **modifizierte Newton-Verf.**

$$x_{n+1} = \tilde{\phi}\,(x_n) = x_n - m\,(f'(x_n))^{-1} f(x_n)$$

  konvergiert **quadratisch**, d.h. $p = 2$ (denn $\tilde{\phi}\,'(x^*) = 0$)

- liegt die Startnäherung x_0 nicht nahe genug an x^* , so kann das Newton-Verf. versagen (s. Skizzen)

- bei Konvergenz-Problemen führt oft das **gedämpfte Newton-Verf.**

$$x_{n+1} = x_n - \omega\,(f'(x_n))^{-1} f(x_n) \qquad \text{mit} \qquad \omega \in (0, 1)$$

  zum Erfolg

- **Kopplung Newton-Verf. mit Bisektions-Verf.** : liegt x_{n+1} nicht im Einschließungsintervall $[a_k, b_k]$, so mache einige Bisektions-Schritte u. starte Newton neu

Bemerkungen zum Sekanten-Verfahren

- falls x^* einfache Nullstelle ist (d.h. $f'(x^*) \neq 0$), so kann man die **Konvergenzordnung**

$$p = \frac{1+\sqrt{5}}{2} \approx 1.618$$

zeigen, sofern $x_0, x_1 \in [x^* - r, x^* + r]$ mit hinreichend kleinem r

- das **Doppelschritt-Sekanten-Verf.** $x_n \to x_{n+2}$ kostet nur zwei Funktionsauswertungen ($f(x_n), f(x_{n+1})$) und hat die Konvergenzordnung $p_2 = p^2 \approx 2.618$, denn :

$$|x_{n+2} - x^*| \leq q|x_{n+1} - x^*|^p \leq q(q|x_n - x^*|^p)^p = q^{1+p}|x_n - x^*|^{p^2}$$

$\Rightarrow$ besser als das klassische Newton-Verf.

- **aber** : das Sekanten-Verfahren ist oft **anfällig für Rundungsfehler** (Auslöschung bei $f(x_n) - f(x_{n-1})$)