FRIEDRICH-ALEXANDER
UNIVERSITÄT
ERLANGEN-NÜRNBERG
TECHNISCHE FAKULTÄT

Algorithmik kontinuierlicher Systeme

Iterative Verfahren: Allgemeines, Fixpunkt-Iteration, Nullstellen

- Viele numerische Probleme lassen sich nicht mit endlich vielen Schritten lösen
  - Nullstellen (von Polynomen), Eigenwerte von Matrizen
  - Optimierung (min – max-Suche)

- **Iterativer Lösungsansatz**:
  - Spezifiziere einen geschätzten Wert: Startwert x_0
  - Versuche diesen sukzessive zu verbessern $x_{i+1} = \Phi_i(x_i)$ oder mehrstufig $x_{i+1} = \Phi_i(x_i, x_{i-1}, \ldots)$ für $i=0,1,2,3,\ldots$
- Ist die Iterationsvorschrift Φ_i nicht von i abhängig spricht man von **stationären** Verfahren

- Der iterative Ansatz ist u.U. auch für „exakt lösbare" Probleme interessant (z.B. LGS, siehe später)

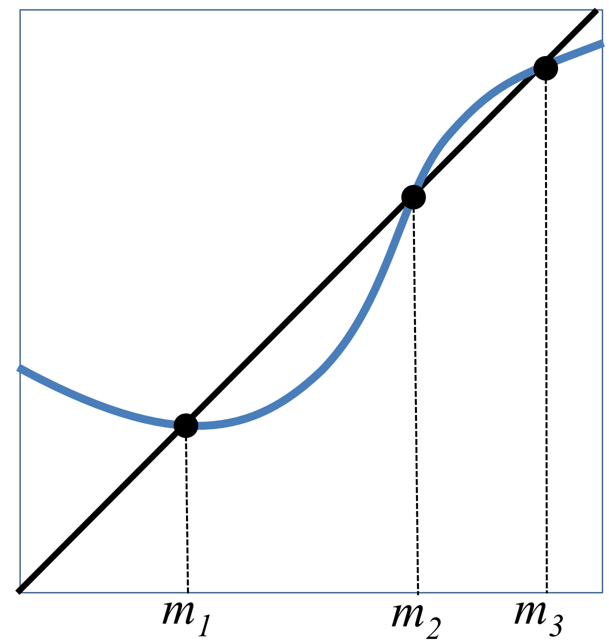
- Wir beschäftigen uns nur mit stationären Verfahren (meist einstufig):

$$\text{Startwert } x_0,$$

$$x_{i+1} = \Phi(x_i) \quad (\text{für } i=0,1,2,\dots)$$

- Fragen:
  - Konvergiert die Iterationsfolge gegen die gewünschte Lösung x^* ?
  - Für welche Anfangswerte konvergiert die Folge?
  - Wie schnell konvergiert die Iterationsfolge?
  - Kann man den Fehler $|x_i - x^*|$ abschätzen?
  - Wann soll man die Iteration abbrechen?

- Ist $\Phi : M \to M$ eine „Selbst“-Abbildung, dann heißt ein $m \in M$ **Fixpunkt** von Φ falls $\Phi(m)=m$.

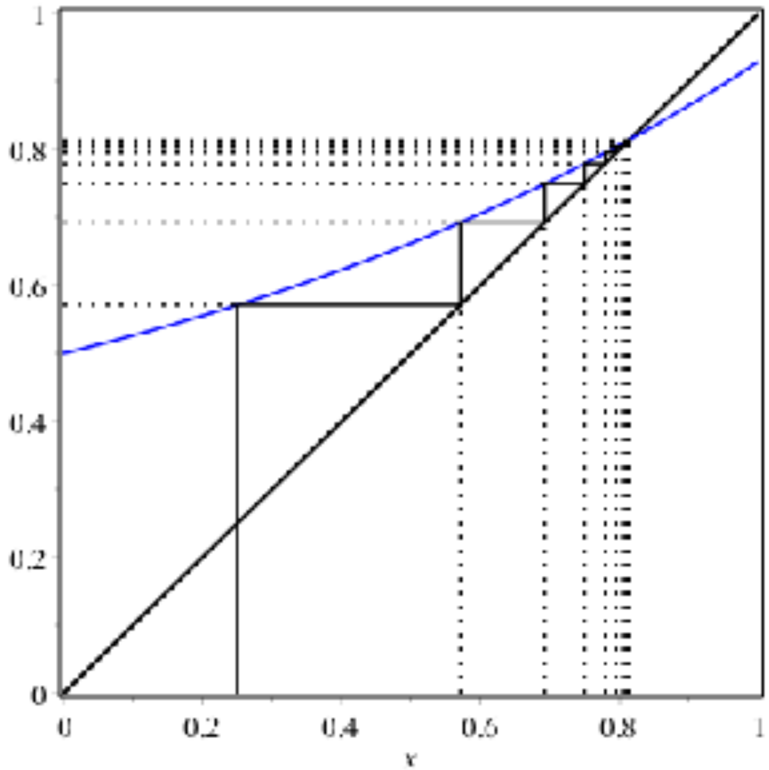


- Anschaulich: Ist $M=I$ ein Intervall, dann verläuft der Graph von Φ im Quadrat $I \times I$ und ein Fixpunkt ist ein Schnittpunkt mit der Diagonalen

- **Satz**: Wenn die Iterationsfolge

  $x_{i+1} = \Phi(x_i)$ konvergiert, $x^* = \lim_{i\to\infty} x_i$

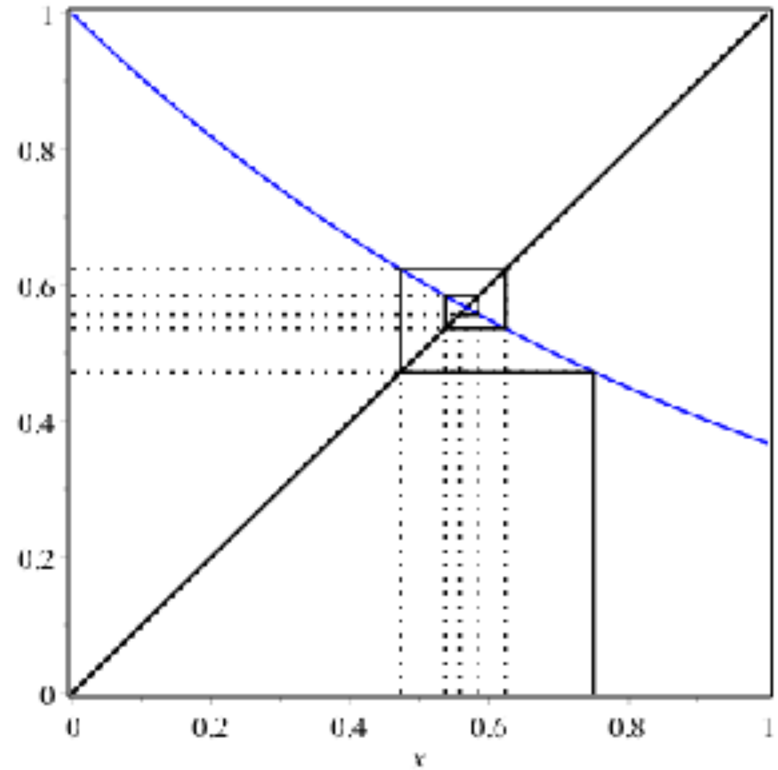
  und Φ stetig ist, dann gilt $\Phi(x^*)=x^*$!



x_0 x_1 x_2 x_3

$$\Phi(x) = \frac{1+e^x}{4}, x_0 = 0.25$$

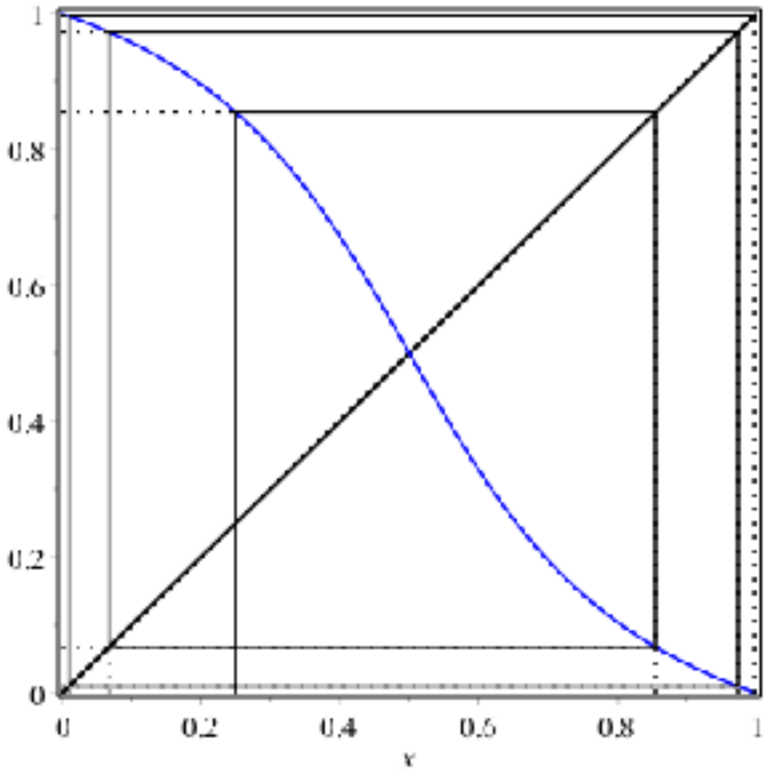
Konvergenz



x_1 x_3 x_2 x_0

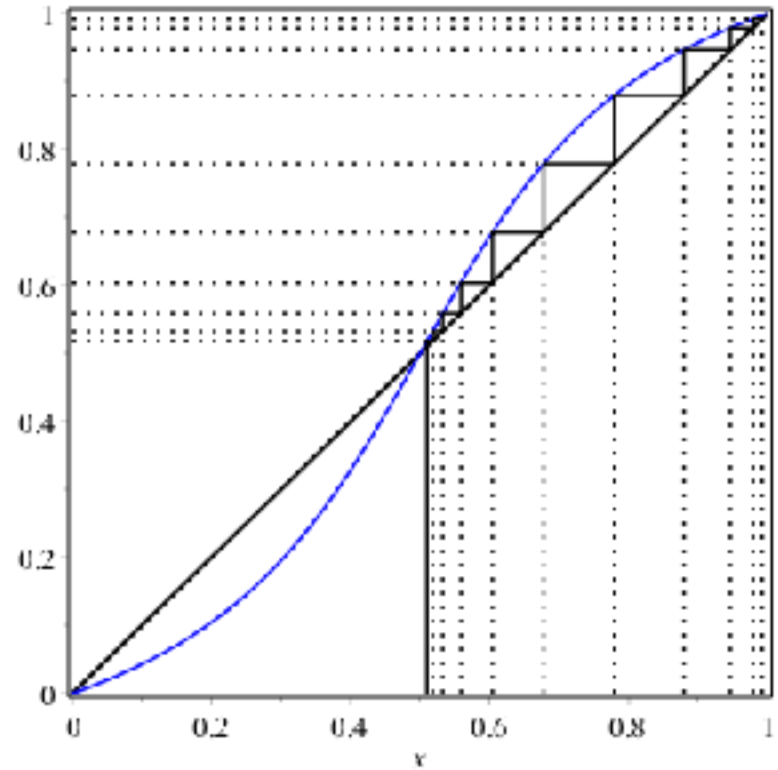
$$\Phi(x) = e^{-x}, x_0 = 0.75$$

Konvergenz



$$x_0 = 0.25$$

Keine Konvergenz



$$x_0 = 0.51$$

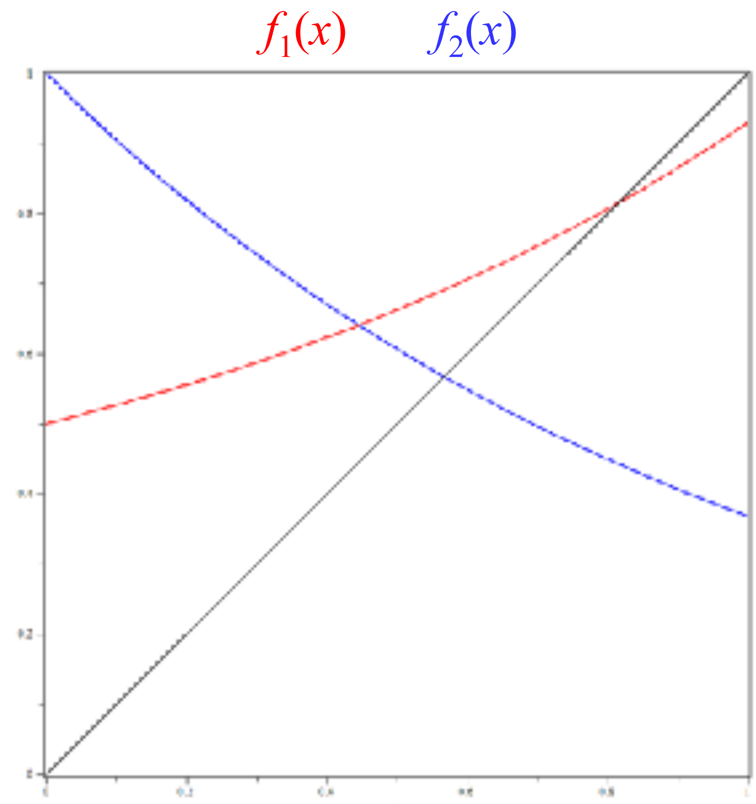
Konvergenz
(aber nicht gegen 0.5)

- I sei ein abgeschlossenes Intervall und $\Phi : I \to I$ sei eine **Kontraktion,** d.h. es gibt eine Konstante $L < 1$ so dass
  $$| \Phi(x) - \Phi(y) | \leq L|x-y| \quad \text{für alle} \quad x, y \in I$$
- Dann gilt:
  - Φ besitzt genau einen Fixpunkt $x^* \in I$;
  - die Iterationsfolge $x_{i+1} = \Phi(x_i)$ konvergiert für jeden Startwert $x_0 \in I$;
  - $|x_n - x^*| \leq \frac{L^n}{1-L} \cdot |x_1 - x_0|$ (a priori Abschätzung) ;
  - $|x_n - x^*| \leq \frac{1}{1-L} \cdot |x_{n+1} - x_n|$ (a posteriori Abschätzung) .
- Der BFS gilt auch im $\mathbb{R}^n$ ($I \subseteq \mathbb{R}^n$ **abgeschlossene** Teilmenge, $|| \Phi(x) - \Phi(y) || \leq L||x-y||$)

- Beispiele:

$$f_1 : [0,1] \to [0,1], \quad f_1(x) = \tfrac{1}{4}\left(1 + e^x\right)$$

$$f_2 : [0,1] \to [0,1], \quad f_2(x) = \exp(-x)$$



- Sind dies Kontraktionen?

  Mittelwertsatz !

$$f_1 : [0,1] \to [0,1], \quad f_1(x) = \tfrac{1}{4}\left(1 + e^x\right)$$

$$L = 0.78$$

n	x_n	a priori	a posteriori
0	0.5		
1	0.662180	0.344633	
2	0.734754	0.234351	0.154219
3	0.771242	0.159358	0.077538
4	0.790613	0.108364	0.041162
5	0.801187	0.073687	0.022470
10	0.813773	0.010714	0.001238
15	0.814483	0.001558	0.000071
20	0.814524	0.000226	0.000004
25	0.814526	0.000048	0.000000

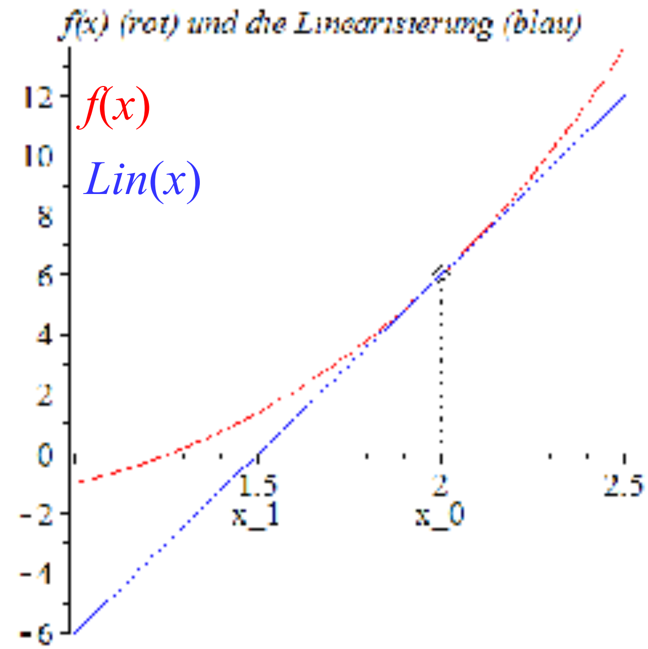
$$f_2(x) = \exp(-x)$$

$$!\, L = 1\, !$$

n	x_n	$f(x_n)$
0	0.500000	0.606531
1	0.606531	0.545239
2	0.545239	0.579703
3	0.579703	0.560065
4	0.560065	0.571172
5	0.571172	0.564863
10	0.566907	0.567277
15	0.567157	0.567135
20	0.567142	0.567144
25	0.567143	0.567143

- Iteratives Verfahren zur Bestimmung der Nullstelle der Funktion $f(x)$
  - Startwert x_0 :
  - **Iterationsschritt**:
    Linearisiere $f(x)$ in x_i
    [d.h. bestimme die Tangente an $(x_i, f(x_i))$] und bestimme die Nullstelle der Linearisierung.
  - Linearisierung (z.B. mit Taylor):

$$f(x) \approx f(x_i) + f'(x_i) \cdot (x - x_i) =: Lin(x)$$

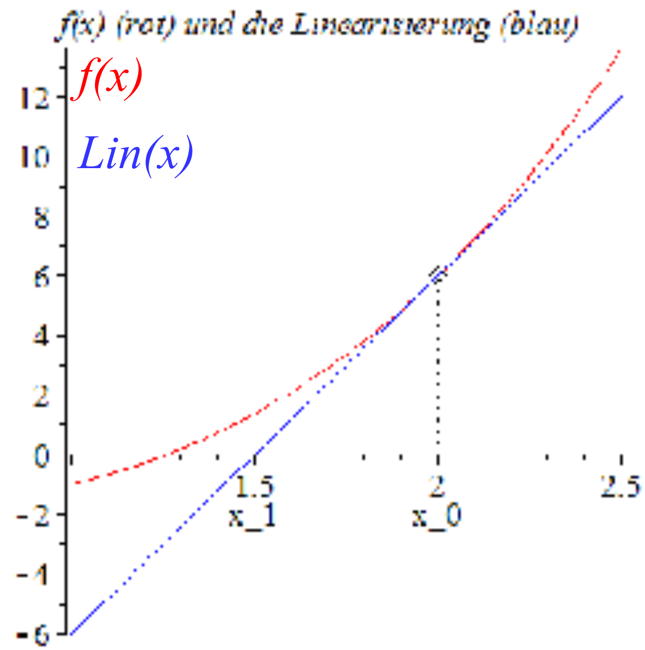


  - Nullstelle der Linearisierung :

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)}$$

- Iteratives Verfahren zur Bestimmung der Nullstelle der Funktion $f(x)$
  - Startwert x_0 :

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)}$$



- Dies ist eine Fixpunkt-Iteration für

$$\Phi(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)}$$

- Das Verfahren konvergiert falls x_0 „nahe“ bei der Nullstelle liegt!

Heron-Verfahren oder

Babylonisches Wurzelziehen

Heron von Alexandria
1. Jahrhundert n. Chr

- Iteratives Verfahren zur Bestimmung von $\sqrt{a}$:

$$x_{i+1} = \frac{1}{2}\left(x_i + \frac{a}{x_i}\right)$$

- Geometrische Interpretation (sh Tafel)
- Falls $x_0{}^2 > a$ dann ist (x_n) monoton fallend,

$$0 \le x_i - \sqrt{a} \le \frac{1}{2\sqrt{a}}\left(x_{i-1} - \sqrt{a}\right)^2$$ **(quadratische Konvergenz)**

- Newton-Verfahren für $f(x) = x^2 - a$

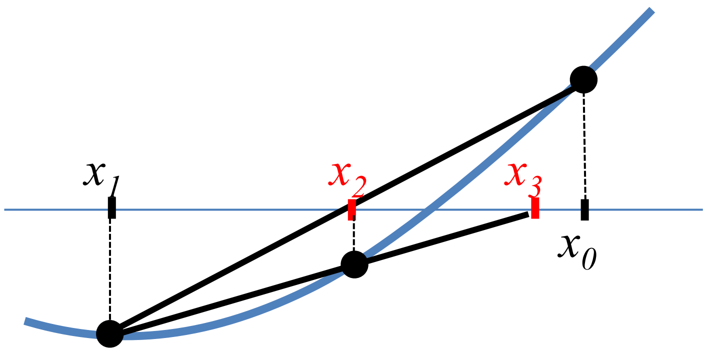
- Iterative Bestimmung von $\sqrt{2}$ nach Heron mit Startwert $x_0 = 2.0$
- bzw. Newton-Verfahren für $f(x) = x^2 - a$

n	x_n
1	1.5
2	1.416666667
3	1.414215686
4	1.414213562
5	1.414213562

n	x_n
1	1.5
2	1. 41666666666666667
3	1.414215686274509804
4	1.414213562374689911
5	1.414213562373095049
6	1.414213562373095049

- <u>Beobachtung</u>: Die Anzahl der korrekten Stellen verdoppelt sich in jedem Iterationsschritt

- Zweistufiges iteratives Verfahren ohne Kenntnis der Ableitung;
- Zwei Startwerte x_0 und x_1 nötig ;
- **Iterationschritt**:
  Bestimme den Schnittpunkt der Sekante durch $(x_0, f(x_0))$ und $(x_1, f(x_1))$ mit der x-Achse (Nullstelle der Sekante)

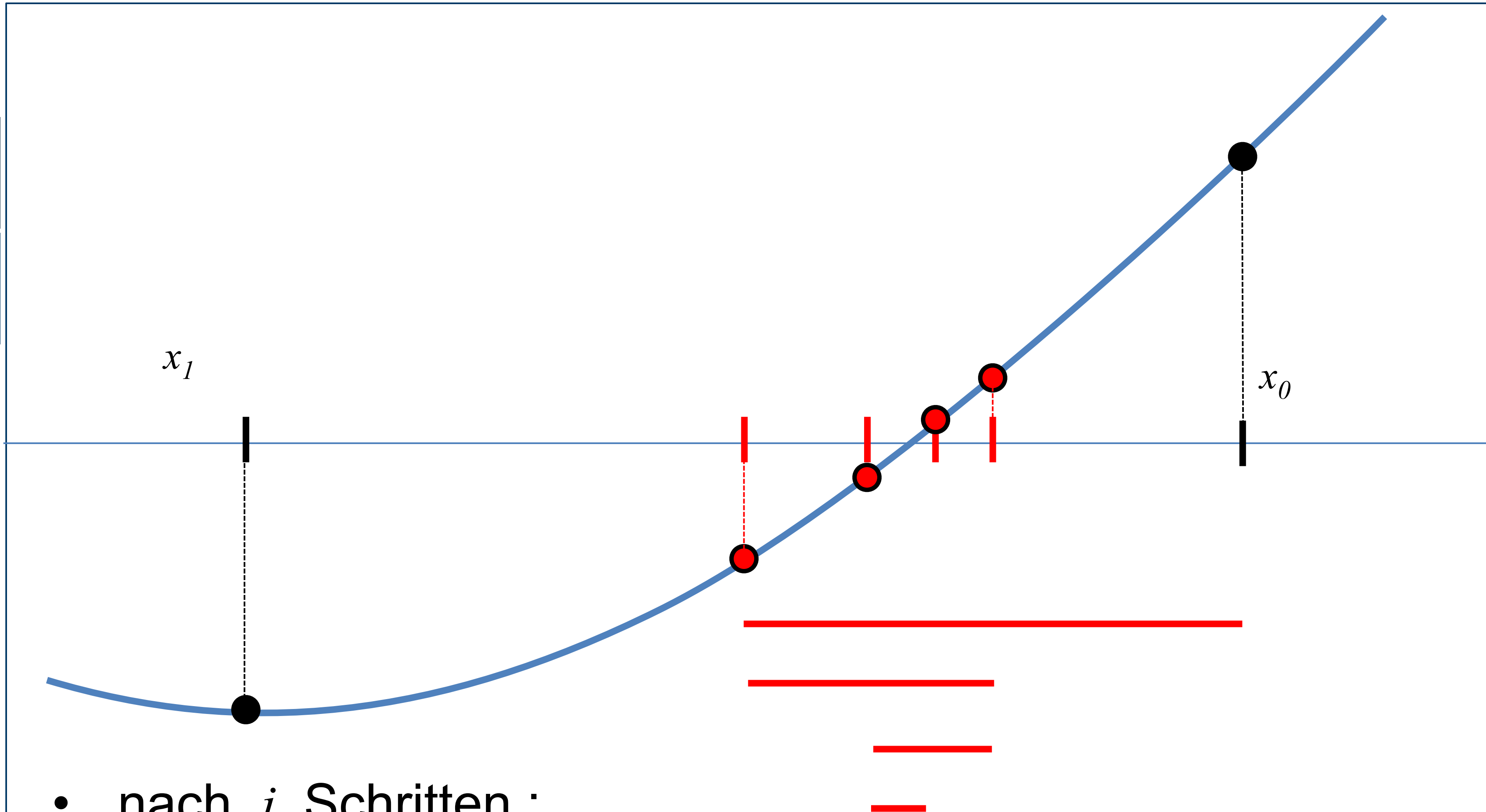


$$x_{i+1} = \frac{x_{i-1} \cdot f(x_i) - x_i \cdot f(x_{i-1})}{f(x_i) - f(x_{i-1})}$$

- Modifikation: **Regula falsi** (s.u.)

- Zweistufiges Verfahren,
  führt sicher zum Ziel, aber konvergiert sehr langsam;

1. Zwei Startwerte $x_0 < x_1$ so dass $f(x_0) \cdot f(x_1) < 0$
   Der Vorzeichenwechsel im Intervall $[\, x_0 , x_1 \,]$,
   dies garantiert dass es mind. eine Nullstelle gibt
   sofern $f(x)$ stetig ist.
2. **Iterationsschritt**:
   Bestimme den Mittelpunkt $x_2 = (\, x_0 + x_1 \,)/2$,
   betrachte das Intervall $[\, x_0 , x_2 \,]$ falls $f(x_0) \cdot f(x_2) < 0$ bzw.
   betrachte das Intervall $[\, x_2 , x_1 \,]$ falls $f(x_1) \cdot f(x_2) < 0$
   (im Falle von $f(x_1) \cdot f(x_2) = 0$ ist x_2 eine Nullstelle!
3. Das Bisektionsverfahren konvergiert stets, jedoch relativ langsam:
   nach i Schritten $|\, x_{i+1} - x_i \,| \leq 2^{-i} \,|\, x_1 - x_0 \,|$



- nach i Schritten :
  - $| x_{i+1} - x_i | \leq 2^{-i} | x_1 - x_0 |$
  - $| \frac{1}{2} (x_{i+1} + x_i) - x^* | \leq 2^{-(i+1)} | x_1 - x_0 |$

- Kombination von Sekanten- und Bisektionsverfahren

  - Man startet wie beim Bisektionsverfahren mit zwei Punkten
    x_0 und x_1 so dass $f(x_0) \cdot f(x_1) < 0$

  - Man bestimmt den Schnittpunkt der Sekante mit der x-Achse

  - Falls $f(x_2) \cdot f(x_1) < 0$ fährt man mit x_1 und x_2 fort andernfalls mit x_0 und x_2

  - regula falsi konvergiert garantiert gegen eine Nullstelle, meist langsam.

- Problem:
  Bestimme die Nullstelle einer Funktion $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$
- Beispiel:

$$F(x,y) = \begin{bmatrix} 1 + xy^2 - x^2 y \\ 2x^2 - 3y^2 \end{bmatrix}$$

$$\begin{aligned} 1 + xy^2 - x^2 y &= 0 \\ 2x^2 - 3y^2 &= 0 \end{aligned}$$

(nicht lineares) Gleichungssystem

- Iteratives Vorgehen wie im eindimensionalen Fall: Linearisieren und Nullstelle der Linearisierung ermitteln.
- Linearisierung mit Taylor:

$$F(x) \approx F(x_i) + J_F(x_i) \cdot (x - x_i) =: Lin_i(x)$$

dabei ist $J_F(x)$ die **Jacobi-Matrix** von F an der Stelle x.

- Bestimmung der Nullstelle der Linearisierung :

$Lin_i(x) = 0$ oder $x_{i+1} = x_i - [J_F(x_i)]^{-1} F(x_i)$

- Beispiel:

$$F(x,y) = \begin{bmatrix} 1 + xy^2 - x^2 y \\ 2x^2 - 3y^2 \end{bmatrix}$$

$$\begin{aligned} 1 + xy^2 - x^2 y &= 0 \\ 2x^2 - 3y^2 &= 0 \end{aligned}$$

(nicht lineares) Gleichungssystem

Startwert: $x_0 = -1, \quad y_0 = 1,$

- **Iterationsschritt**

$$x_{i+1} = x_i - [J_F(x_i)]^{-1} F(x_i)$$

- zur praktischen Durchführung:

Die Berechnung der Inversen macht nur Sinn für kleine n $(n = 2{,}3)$

Im Allgemeinen muss man in jedem Iterationsschritt ein lineares Gleichungssystem mit $\boldsymbol{A} = J_F(x_i)$ lösen:

- löse $[J_F(x_i)]z = -F(x_i)$
- setze $x_{i+1} = x_i + z$

Maß für die Geschwindigkeit der Konvergenz

- Die (Iterations-)Folge (x_i) konvergiere gegen x^* :
  - Konvergenzordnung $p=1$ (**lineare Konvergenz**):

    Es gibt eine Konstante $C < 1$ so dass

    $$|x_{i+1} - x^*| \leq C \cdot |x_i - x^*| \quad \text{für alle (großen) } i$$
  - Konvergenzordnung $p > 1$:

    es gibt eine Konstante so dass

    $$|x_{i+1} - x^*| \leq C \cdot |x_i - x^*|^p \quad \text{für alle (großen) } i$$
  - Im Fall $p=2$ spricht man von **quadratischer Konvergenz;**
  - **superlineare Konvergenz :** $\lim\limits_{i \to \infty} \dfrac{|x_{i+1} - x^*|}{|x_i - x^*|} = 0$

- Fixpunktiterationen mit Voraussetzungen des BFS konvergieren (mindestens) linear

- Newtonverfahren:
  - einfache Nullstelle: quadratische Konvergenz
  - mehrfache Nullstelle: lineare Konvergenz
  - Newtonverfahren im $\mathbb{R}^n$ konvergiert quadratisch sofern einfache Nullstelle vorliegt (d.h. die Jacobimatrix in der Nullstelle invertierbar ist).

- Sekantenverfahren: Konvergenzordnung $p = \frac{\sqrt{5}+1}{2} \approx 1.618...$

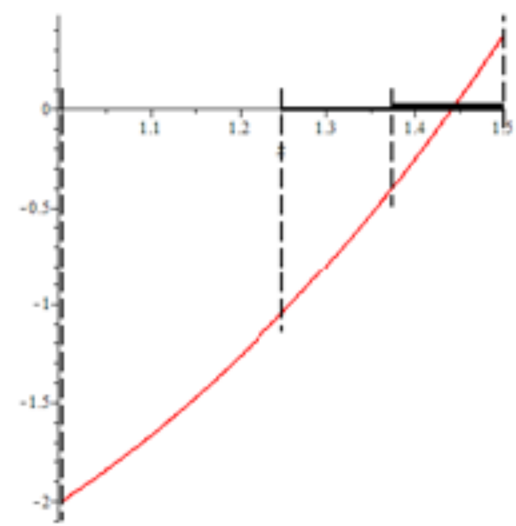
- Bisektion und regula falsi „in etwa" linear

- Konvergenzordnung: „in etwa linear“

$$f(x) = x^3 - 3\,, \quad x^* = \sqrt[3]{3} = 1.4422495703$$

Anfangsintervall $[1.0, 1.5]$

x_i	$\lvert x_i - x^* \rvert$	$\lvert x_i - x^* \rvert / \lvert x_{i-1} - x^* \rvert$
1.250000	0.1922495	
1.375000	0.0672495	0.349803487
1.437500	0.0047495	0.070626028
1.468750	0.0265004	5.579542990
1.453125	0.0108754	0.410386925
1.445312	0.0030629	0.281637599
1.441406	0.0008433	0.275331137
1.443359	0.0011098	1.315995115



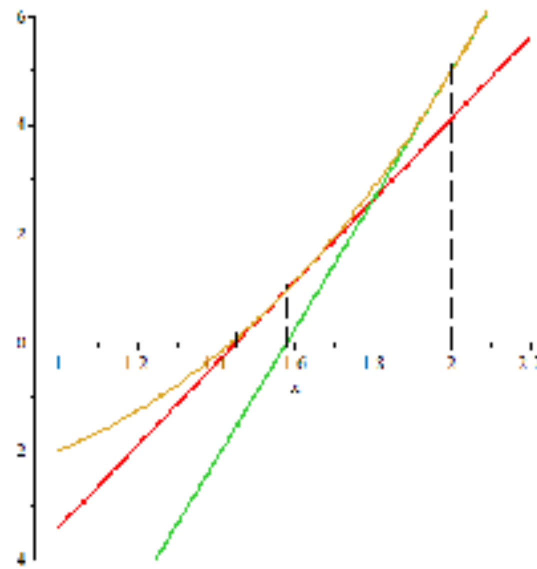
Beispiel Newtonverfahren

- Konvergenzordnung: quadratisch ($p=2$)

$$f(x) = x^3 - 3\,, \qquad x^* = \sqrt[3]{3} = 1.4422495703$$

Startpunkt $x_0 = 1.5$

x_i	$\lvert x_i - x^*\rvert$	$\lvert x_i - x^*\rvert / \lvert x_{i-1} - x^*\rvert^2$
1.5	0.057750430	
1.444444444	0.002194874	0.6581109994
1.442252904	0.000003334	0.6920642374
1.442249570	0.0	0.0
1.442249570	0.0	*undefined*



- Erhöhte Genauigkeit (30 Dezimalstellen)

$$f(x) = x^3 - 3, \quad x^* = \sqrt[3]{3} = 1.44224957030740838232163831078$$

x_i	$\lvert x_i - x^*\rvert$	$\lvert x_i - x^*\rvert / \lvert x_{i-1} - x^*\rvert^2$
1.5	0.05775042969259161767…	
1.444444444444444444…	0.00219487413703606212…	0.65811047452949
1.442252903791365329…	0.0000033348395694750…	0.691957031942603
1.4422495703151130689…	0.77046866751 10-11	0.693359137594228
1.4422495703074083823…	0.4115945 10-22	0.693361301378699
1.4422495703074083823…	0.0	0.0
1.4422495703074083823…	0.0	*undefined*

- Konvergenzordnung: $p = \frac{1}{2}(1+\sqrt{5}) = 1.618...$
  erhöhte Genauigkeit

$$f(x) = x^3 - 3, \quad x^* = \sqrt[3]{3} = 1.44224957030740838232163831078$$

Anfangswerte $x_0 = 1.0,\ x_1 = 1.5$

x_i	$\lvert x_i - x^*\rvert$	$\lvert x_i - x^*\rvert / \lvert x_{i-1} - x^*\rvert^{1.618}$
1.5	0.05775042969259161767…	
1.4210526315789473684…	0.02119693872846101390…	2.1385474547129
1.4414151249594287568…	0.00083444534797962542…	0.4261326766406
1.4422619601527410463…	0.00001238984533266404…	1.1867212636286
1.4422495631362650002…	$0.7171143382064\ 10^{-11}$	0.6239856249190
1.4422495703073467779…	$0.6160435103571\ 10^{-13}$	0.9279961284195
1.4422495703074083823…	$0.30630873\ 10^{-21}$	0.7261346402066
1.4422495703074083823…	0.0	0.0

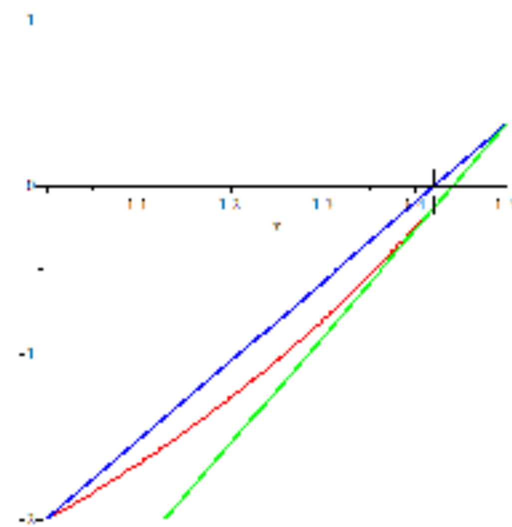
Beispiel Regula Falsi

- Konvergenzordnung: linear

$$f(x) = x^3 - 3\,, \quad x^* = \sqrt[3]{3} = 1.4422495703$$

Anfangsintervall $[1.0, 1.5]$

x_i	$\lvert x_i - x^* \rvert$	$\lvert x_i - x^* \rvert / \lvert x_{i-1} - x^* \rvert$
1.5	0.057750430	
1.421052632	0.021196938	0.3670438
1.441415125	0.000834445	0.0393663
1.442217020	0.000032550	0.0390080
1.442248301	0.000001269	0.0389862
1.442249521	$0.49\ 10^{7}$	0.0386131
1.442249568	$0.2\ 10^{8}$	0.0408163
1.442249570	0.0	0.0



Vor- und Nachteile

- Newton
  - \+ konvergiert sehr schnell $(p=2)$
  - \- benötigt Werte der Ableitungen
  - \- konvergiert nur für Startwerte nahe bei der Nullstelle
- Sekanten
  - \+ konvergiert ziemlich schnell $(p=1.62)$
  - \+ benötigt keine Werte der Ableitungen
  - \- konvergiert nur für Startwerte nahe bei der Nullstelle
- Bisektion und regula falsi
  - \- konvergiert langsam $(p=1)$
  - \+ benötigt keine Werte der Ableitungen
  - \+ sicher konvergent

Wann soll die Iteration abgebrochen werden?

1. Gibt es eine Fehlerabschätzung (z.B. BFS) nutze diese.
2. Erreichen einer maximalen Iterationszahl **MAX_ITER**
3. $\| x_{i+1} - x_i \| < \varepsilon$ für eine kleine Schranke ε .
4. $\| F(x_i) \| < \varepsilon$ (bei Nullstellensuche) bzw.

   $\| \Phi(x_i) - x_i \| < \varepsilon$ (bei Fixpunktiteration)
5. $\| x_i \| > M$ für eine (große) Schranke M (→ nicht konv.)

- In der Praxis: Eine Kombination mehrerer dieser Kriterien, z.B. 2. und 4. und 5.

Für spezielle Polynome kann man sukzessive sämtliche Nullstellen mit dem Newton-Verfahren bestimmen:

- **Annahme**: Das Polynom $p(x) = a_0 + a_1 x + \ldots + a_n x^n$ habe n reelle Nullstellen $\xi_1 \geq \xi_2 \geq \ldots \geq \xi_{n-1} \geq \xi_n$ (zB char. Polynom einer symmetrischen Matrix)
- die Theorie sagt dann $p(x) = a_n (x - \xi_1)(x - \xi_2) \ldots (x - \xi_n)$
- Startet man das Newton-Verfahren für $p(x)$ mit einem hinreichend großen x_0 (zB $x_0 \geq \frac{1}{|a_n|} \sum_{i=0}^{n} |a_i|$), dann konvergiert die Iterations-Folge gegen ξ_1 .

- ξ_2 ist größte Nullstelle von $p_1(x) = \dfrac{p(x)}{x-\xi_1}$

- Diese kann iterativ mit Newton-Verfahren zum Startwert $x_0 = \xi_1 + \varepsilon$ bestimmt werden

  - Beachte, dass $p_1'(x) = \dfrac{p'(x)}{x-\xi_1} - \dfrac{p(x)}{(x-\xi_1)^2} \Rightarrow \dfrac{p_1(x)}{p_1'(x)} = \dfrac{p(x)}{p'(x) - \frac{p(x)}{x-\xi_1}}$

    deshalb müssen p_1 und p_1' nicht explizit bestimmt werden!

- ξ_{k+1} ist größte Nullstelle von $p_k(x) = \dfrac{p(x)}{(x-\xi_1)(x-\xi_2)\cdots(x-\xi_k)}$

  - Beachte, dass $\dfrac{p_k(x)}{p_k'(x)} = \dfrac{p(x)}{p'(x) - p(x)\cdot\sum_{i=1}^{k}\frac{1}{x-\xi_i}}$

- Fixpunkt-Iteration: Banachscher Fixpunktsatz
  - Konvergenz und Eindeutigkeit
  - Fehlerabschätzungen
- Verfahren zur Nullstellenbestimmung
  - Newton-V.
  - Bisektions-V.
  - Sekanten-V.
  - regula falsi
  - Vergleich der Verfahren
- Konvergenzordnung
  - Definition und Beispiele (Nullstellenverfahren)
- Abbruchkriterien
- Nullstellen von (speziellen) Polynomen