Nullstellen

Mathematisches Seminar: Numerik

Maria Hessenmüller

Universität Rostock

12.11.2024

Gliederung

Nullstellenbestimmung

$x^* \in D$ heißt Nullstelle von $f : D \mapsto K$, wenn $f(x^*) = 0$ gilt

Bsp 1

Berechnung der Nullstellen von $f(x) = x^2 + x - 2$

$$x_{1,2} = -\frac{p}{2} \pm \sqrt{\frac{p^2}{4} - q}$$

Nullstellen: $x_1^* = -2, x_2^* = 1$ Aber: Auch hier können Auslöschungsvorgänge bei der Auswertung der Formel entstehen

Bsp 2

Berechnung der Nullstellen von $f(x) = x^5 + 3x + 1$ nicht mithilfe einer Formel möglich

Stattdessen: Näherungsverfahren

(Dahlquist, Björck, 2008, S.609)

2 Näherungsverfahren

Iterative Verfahren zur näherungsweisen Bestimmung der Nullstellen
d.h. gefundener Wert x soll der Nullstelle x^* möglichst nahe sein

Eigenschaften:

- Geschwindigkeit
- Voraussetzungen/Einschränkungen
- Stabilität
- Aufwand

(Dahlquist, Björck, 2008, S.610)

2 Näherungsverfahren

Residuum und Fehler (Hanke-Bourgeois, 2009, S.58; Dahlquist, Björck, 2008, S.615)

Sei x^* mit $f(x^*) = 0$ die Nullstelle von f und x unsere näherungsweise berechnete Lösung. Dann ist $r = f(x^*) - f(x) = -f(x)$ das Residuum von x und $e = x^* - x$ der Fehler.

Ziel ist es demnach, das Residuum $|r| = |f(x)|$ zu minimieren. Da x^* nicht bekannt ist, ist eine Betrachtung des Fehlers schwierig. Stattdessen können die aufeinanderfolgenden Iterierten betrachtet werden und ihr Abstand $|x_i - x_{i-1}|$ minimiert werden. Soll x die Maschinengenauigkeit ϵ haben, führt dies zu der Bedingung $|x_i - x_{i-1}| < \epsilon$

(Dahlquist, Björck, 2008, S.610)

2.1 Bisektionsverfahren

- Nullstellenbestimmung durch Intervallhalbierung
- **Voraussetzungen:**
  - Intervall [a,b] bekannt mit $f(a)f(b) < 0$
  - f(x) ist stetig in [a,b]
- **Algorithmus:**
  - Wähle Intervall [a,b]
  - Setze $x = \frac{a+b}{2}$
  - Prüfe ob $f(x)f(b) > 0$, dann $b = x$, sonst $a = x$
  - Wiederholung der obigen Schritte

(Moler, 2004, S.117-119)

2.1 Bisektionsverfahren

Bsp 3

$f(x) = -x^3 - 3x + 3$ mit $a = 0, b = 1$

i	a	b	$\|a-b\|$
0	0	1	1
1	0.5	1	0.5
2	0.75	1	0.25
3	0.75	0.8750	0.125
4	0.8125	0.8750	0.0625
5	0.8125	0.8438	0.03125
53	0.8177	0.8177	1.1102e-16

2.1 Bisektionsverfahren

Bsp 3 (erstellt mittels GeoGebra)

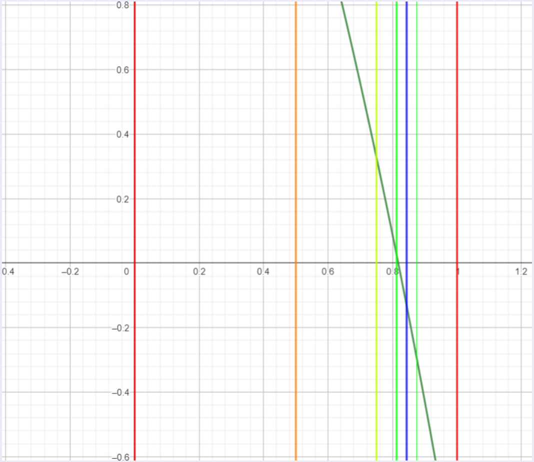

Figure: Abb 1: Visualisierung des Bisektionsverfahrens

2.1 Bisektionsverfahren

Vorteile

- verlässlicher Algorithmus: bei bekannten Intervall wird Nullstelle immer gefunden

Nachteile

- sehr langsam
- Anfangsintervall [a,b] in dem Vorzeichenwechsel stattfindet, muss bekannt sein

(Moler, 2004, S.117-119)

2.2 Newtonverfahren

- Nullstellenbestimmung mithilfe von Tangenten
- **Voraussetzungen:**
  - Anfangswert x_0, der nah an der Nullstelle ist
  - f muss glatt sein
- **Algorithmus:**
  - Wähle Anfangswert x_0
  - Setze $x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$

(Moler, 2004, S.119-121)

2.2 Newtonverfahren

Bsp 4

$f(x) = -x^3 - 3x + 3$ mit $x_0 = 1$

i	x_i	$\lvert x_i - x_{i-1} \rvert$
0	1	/
1	0.8333	1.6667e-01
2	0.8179	1.5483e-02
3	0.8177	1.18963-4
4	0.8177	6.9352e-09
5	0.8177	1.1102e-16

Für z.B. $x_0 = 100$ benötigt das Verfahren 16 Iterationen. Das Konvergenzverhalten hängt demnach stark von dem gewählten Startwert ab.

2.2 Newtonverfahren

Bsp 4 (erstellt mittels GeoGebra)

Figure: Abb 2: Visualisierung des Newtonverfahrens

2.2 Newtonverfahren

Bsp 4 (erstellt mittels GeoGebra)

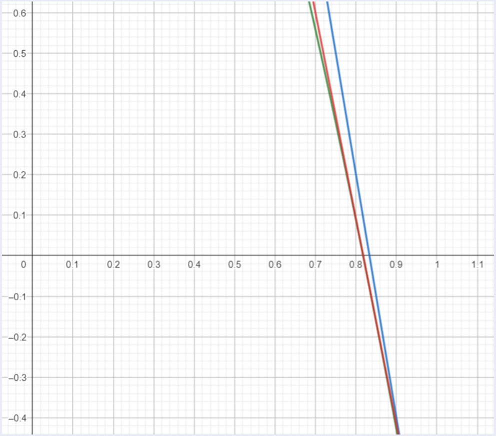

Figure: Abb 3: Visualisierung des Newtonverfahrens

2.2 Newtonverfahren

Bsp 5 (Dahlquist, Björck, 2008, S.641)

$f(x) = \sin(x)$ in dem Intervall $[-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}]$.

Für die Newtoniteration folgt $x_{n+1} = x_n - \frac{\sin(x_n)}{\cos(x_n)} = x_n - \tan(x_n)$

Für alle $x_0 = a$ mit $\tan(a) = 2a$ folgt dann $x_1 = -x_0$ und $x_2 = -x_1 = x_0$

Demzufolge osziliert das Newtonverfahren immer zwischen a und -a und die eigentliche Nullstelle $x^* = 0$ wird nicht gefunden.

2.2 Newtonverfahren

Bsp 5 (erstellt mittels GeoGebra)

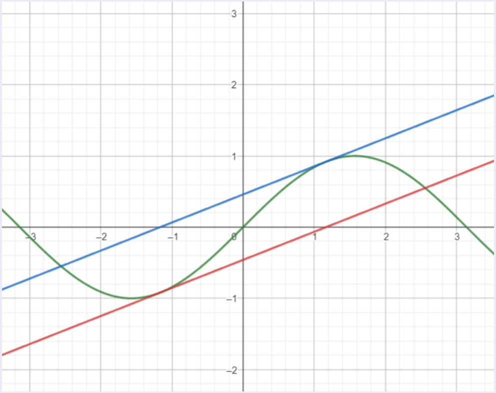

Figure: Abb 3: Visualisierung des Newtonverfahrens

2.2 Newtonverfahren

Bsp 6

Sei $f(x) = x^4 + x^3$ mit $x_0 = 1$

Dann benötigt das Newtonverfahren 615 Iterationsschritte um die Nullstelle $x^* = 0$ näherungsweise zu bestimmen. Mit dem modifizierten Newtonverfahren $x_{n+1} = x_n - p\frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$ mit p die Vielfachheit der Nullstelle, kann die Geschwindigkeit des Verfahrens verbessert werden. In diesem Beispiel hat die Nullstelle $x^* = 0$ die Vielfachheit $p = 3$. Mit

$$x_{n+1} = x_n - 3\frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$$

wird die Nullstelle innerhalb von 7 Iterationsschritten gefunden.

(Moler, 2004, S.640-641)

2.2 Newtonverfahren

Vorteile

- schneller als Bisektionsalgorithmus
- quadratische Konvergenz unter korrekten Bedingungen

Nachteile

- Berechnung von $f'(x)$ kann aufwendig sein
- Anfangswert muss nah an der Nullstelle sein
- nur lokale Konvergenz: Lösung wird nicht immer gefunden

(Moler, 2004, S.119-121)

2.3 Sekantenverfahren

- Nullstellenbestimmung mithilfe von Sekanten
- **Voraussetzungen:**
  - Anfangswerte x_0 und x_1
  - f ist stetig
- **Algorithmus:**
  - Wähle Anfangswert x_0 und x_1
  - Setze $s_n = \frac{f(x_n)-f(x_{n-1})}{x_n-x_{n-1}}$ und $x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{s_n}$

(Moler, 2004, S.122-123)

2.3 Sekantenverfahren

Bsp 7

$f(x) = -x^3 - 3x + 3$ mit $x_0 = 0, x_1 = 1$

i	x_i	$\lvert x_i - x_{i-1} \rvert$
0	0	/
1	1	1
2	0.75	0.25
3	0.8118	6.1765e-2
4	0.8179	6.1661e-03
5	0.8177	1.9968e-4
7	0.8177	1.1102e-16

2.3 Sekantenverfahren

Bsp 7 (erstellt mittels GeoGebra)

$f(x) = -x^3 - 3x + 3$ mit $x_0 = 0, x_1 = 1$

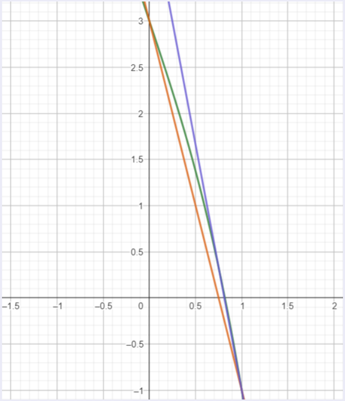

Figure: Abb 4: Visualisierung des Sekantenverfahrens

2.3 Sekantenverfahren

Vorteile

- erfordert keine Berechnung von $f'(x)$
- ähnliche Konvergenzeigenschaften wie Newton-Verfahren

Nachteile

- Anfangswerte sollten nah an der Nullstelle sein
- nur lokale Konvergenz: Lösung wird nicht immer gefunden

(Moler, 2004, S.122-123)

2.4 Inverse Quadratische Interpolation (IQI)

- Nullstellenbestimmung mithilfe von quadratischer Interpolation in y
- **Voraussetzungen:**
  - Anfangswerte x_0, x_1 und x_2
  - f ist stetig
- **Algorithmus:**
  - Wähle Anfangswert x_0, x_1 und x_2
  - Bestimme Parabel $P(y)$ mit $x_1 = P(f(x_1))$,$x_2 = P(f(x_2))$ und $x_3 = P(f(x_3))$
  - Setze $x_4 = P(0)$
  - Wiederhole Algorithmus

(Moler, 2004, S.123)

2.4 Inverse Quadratische Interpolation (IQI)

Bsp 8

$f(x) = -x^3 - 3x + 3$ mit $x_0 = 0, x_1 = 0.5, x_2 = 1$

i	x_i	$\lvert x_i - x_{i-1} \rvert$
0	0	/
1	0.5	0.5
2	1	0.5
3	0.8229	0.1771
4	0.8177	0.0052
5	0.8177	0.0001
6	0.8177	1.1302e-16

2.4 Inverse Quadratische Interpolation (IQI)

Vorteile

- sehr schnell
- ähnliche Konvergenzeigenschaften wie Newton-Verfahren

Nachteile

- erfordert drei diskrete Funktionswerte für jeden Iterationsschritt
- sehr sprunghaftes Verhalten

(Moler, 2004, S.123)

2.5 Zeroin

- Nullstellenbestimmung mit einer Kombination aus Bisektion, Sekantenverfahren und IQI
- **Voraussetzungen:**
  - Anfangswerte a und b, sodass $f(a)f(b) < 0$
  - f stetig
- **Algorithmus:**
  - Wähle Anfangswert a und b
  - Führe Sekantenschritt durch um $c \in [a, b]$ zu finden
  - Wiederhole die folgenden Schritte:
  - Ordne a, b und c sodass:
    - f(a) und f(b) entgegengesetzte Zeichen haben
    - $|f(b)| \leq |f(a)|$
    - c ist der ehemalige Wert von b
  - Wenn $c \neq a$: IQI-Schritt, wenn $c = a$: Sekantenschritt
  - Wenn der vorherige Schritt nicht in [a,b] ist, nutze stattdessen Bisektion

(Moler, 2004, S.124)

2.5 Zeroin

Bsp 9

$f(x) = -x^3 - 3x + 3$ mit $a = 0, b = 1$

i	a	b	$\lvert a-b \rvert$	Methode
0	0	0.75	0.75	Sekantenverfahren
1	1	0.8118	0.1882	IQI
2	1	0.8178	0.1822	Sekantenverfahren
3	0.8118	0.8177	5.97e-03	Sekantenverfahren
4	0.8178	0.8177	2.08e-08	IQI
5	0.8178	0.8177	1.75e-16	IQI

2.5 Zeroin

Vorteile

- vollkommen sicherer Algorithmus
- Kombination der Verlässlichkeit der Bisektion, der Konvergenzgeschwindigkeit des Sekantenverfahrens und IQI
- Nutzung von schnell konvergierenden Methoden wenn möglich, und langsamen wenn nötig

(Moler, 2004, S.124)

3 Nullstellen vektorwertiger Funktionen

$x^* \in D \subseteq K^n$ heißt Nullstelle von $f : D \mapsto K^m$, wenn $f(x^*) = 0$ gilt

Bsp 10

Berechnung der Nullstellen von $f(x) = \begin{pmatrix} x^2 + y - 1 \\ 2x \end{pmatrix}$

Nullstelle: $x^* = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$

Ähnliche Probleme wie im eindimensionalen Fall bei komplizierteren Funktionen.

(Hanke-Bourgeois, 2009, S.172)

3.1 Das vektorwertige Newtonverfahren

- Nullstellenbestimmung mithilfe von Tangentialebenen

- **Voraussetzungen:**
  - Anfangswert $x^{(0)}$, der nah an der Nullstelle ist
  - F muss glatt sein

- **Algorithmus:**
  - Wähle Anfangswert $x^{(0)}$
  - Setze $x^{(k+1)} = x_k - F'(x^{(k)})^{-1}F(x^{(k)})$, wobei $F'(x^{(k)})$ die Jacobi-Matrix ist und $x^{(k)}$ die Näherungslösung des k-ten Iterationsschrittes bezeichnet

Statt $x^{(k+1)} = x^{(k)} - F'(x^{(k)})^{-1}F(x^{(k)})$ wird dabei grundsätzlich das Gleichungssystem $F(x^{(k)}) + F'(x^{(k)})(x^{(k+1)} - x^{(k)}) = 0$ gelöst.

(Hanke-Bourgeois, 2009, S.172-173)

3.1 Das vektorwertige Newtonverfahren

Bsp 11 (adaptiert aus Hanke-Bourgeois, 2009, 174-175)

$$F\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x - 0.5\cos(x) + 0.25\sin(y) \\ y - 0.25\cos(x) + 0.5\sin(y) \end{pmatrix}$$

mit $\begin{pmatrix} x^{(0)} \\ y^{(0)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$

Die Jacobi-Matrix ist dann gegeben durch

$$F'\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 + 0.25\sin(x) & 0.25\cos(y) \\ 0.25\sin(x) & 1 + 0.5\cos(y) \end{pmatrix}$$

Die Näherungslösung der (k+1)-ten Iteration folgt dann aus der Lösung des Gleichungssystems

$$0 = F\begin{pmatrix} x^{(k)} \\ y^{(k)} \end{pmatrix} + F'\begin{pmatrix} x^{(k)} \\ y^{(k)} \end{pmatrix}\left(\begin{pmatrix} x^{(k+1)} \\ y^{(k+1)} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} x^{(k)} \\ y^{(k)} \end{pmatrix}\right)$$

3.1 Das vektorwertige Newtonverfahren

Bsp 11 (adaptiert aus Hanke-Bourgeois, 2009, 174-175)

i	$x^{(i)}$	$y^{(i)}$	$\lvert x^{(i)} - x^{(i-1)} \rvert$	$\lvert y^{(i)} - y^{(i-1)} \rvert$
0	0	0	/	/
1	0.2083	0.1666	0.2083	0.1666
2	0.2041	0.1634	0.0042	0.0032
3	0.2041	0.1634	1.59e-06	1.11e-06
4	0.2041	0.1634	2.3e-13	1.7e-13
5	0.2041	0.1634	2.9e-16	2.3e-16

3.1 Das vektorwertige Newtonverfahren

- Die Lösung dieses Gleichungssystems kann bei höherdimensionalen Problemen sehr aufwendig werden, da in jedem Schritt die Jacobi-Matrix und ihr Inverses ausgewertet werden muss.

- Stattdessen: Approximation für $F'(x_k)$, z.B. $F'(x_0)$
- Dieses Verfahren wird auch vereinfachtes Newtonverfahren genannt
- Es ist jedoch deutlich langsamer: lineare statt quadratische Konvergenz

(Hanke-Bourgeois, 2009, S.176)

4 Finden von Extremwerten

Extremwerte (Amann, Escher, 2006, S. 333)

Es werden lokale und globale Extremwerte unterschieden. Es gilt: $x^* \in D$ ist ein lokales Minimum (bzw. Maximum), wenn es eine Umgebung U von x^* gibt, in der $f(x^*) < f(x)$ (bzw. $f(x^*) < f(x)$) für alle $x \in U$ gilt. Für globale Extremwerte, gilt diese Bedingung für alle $x \in D$.

- **Zusammenhang zu Nullstellen**:
  - Notwendige Bedingung: Ist f eine Extremstelle, so ist $f'(x^*) = 0$.
- **Probleme**:
  - notwendige Bedingung reicht nicht aus
  - mehrere Extremstellen: lokale/globale Extremstellen
  - Berechnung der Ableitung
- **Möglichkeiten**:
  - Anwendung der Iterationsverfahren auf die Ableitung
  - Intervalltrisektion: möglich, aber ineffizient
  - Goldener-Schnitt-Verfahren

(Moler, 2004, S.132)

4.1 Goldener-Schnitt-Verfahren

- Bestimmung von Extremstellen mittels Goldenen Schnitts

- **Voraussetzungen:**
  - Anfangswerte a und b
  - f ist unimodular

- **Algorithmus:**
  - Wähle Anfangswerte a und b
  - Setze $h = \rho(b - a)$ mit $\rho = 2 - \phi = \frac{3-\sqrt{5}}{2}$, $u = a + h$ und $v = b - h$
  - Bestimme f(u) und f(v)
  - Wenn $f(u) < f(v)$ setze b=v, sonst a=u

- Kombination mit IQI: Minimum der Parabel, die die drei Punkte interpoliert, als nächsten Punkt

(Dahlquist, Björck, 2008, S. 657-658; Moler, 2004, S.132)

Quellen

- Amann, Herbert, Escher, Joachim. *Analysis I*, Basel: 2006, Birkhäuser Verlag.
- Dahlquist, Germund, Björck, Ake. *Numerical Methods in Scientific Computing, Volume I*, 2008, SIAM.
- Hanke-Bourgeois, Martin. *Grundlagen der Numerischen Mathematik und des wissenschaftlichen Rechnens*, Wiesbaden: 2009, GWV Fachverlag.
- Moler, Cleve B. *Numerical Computing with Matlab*, 2004, SIAM.