Gruppe 2: Veresa Eybl – 0306011
Christoph Saulder - 0400944

Aufgabe 1. Lösung nichtlinearer Gleichungen mit einer Variablen

1. *Teil: Nullstellenbestimmung*

Aufgabenstellung

Es sollten in Fortran verschiedene Verfahren zur iterativen Nullstellenbestimmung von Funktionen programmiert werden. Die Nullstellensuche ist die Suche nach der Lösung der Gleichung $f(x) = 0$, und kann iterativ auf unterschiedlichem Wege durchgeführt werden:

a) Bisektionsverfahren

Dieses Verfahren basiert auf zwei Startpunkten, die die Nullstelle einschließen. Bei jedem Iterationsschritt wird das Intervall (a, b) halbiert, und danach festgestellt ob die Nullstelle zwischen a und x oder x und b liegt.

$$x = \frac{a+b}{2} \qquad (1)$$

Dazu bietet es sich an, die Vorzeichen von a, x und b zu vergleichen, da diese auf den beiden Seiten der Nullstelle unterschiedlich sein müssen. Je nachdem werden dann a oder b durch x ersetzt und die Iteration von neuem begonnen.

b) Newton-Verfahren

Dieser Algorithmus wird auch Tangenten-Verfahren genannt, da hierbei die Ableitung der Funktion zu Hilfe genommen wird. Diese Methode funktioniert daher nur bei Funktionen, deren Ableitung bekannt ist.

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)} \qquad (2)$$

Für die Berechnung ist hier ein Startwert x_1 erforderlich.

c) Regula Falsi

Bei diesem Verfahren handelt es sich um eine Abwandlung des Newton-Algorithmus mit Ähnlichkeit zum Bisektionsverfahren. Es wird auch Sekanten-Verfahren genannt. Hierbei wird die analytische Ableitung der Funktion aus dem Newtonverfahren durch den Differenzenquotienten aus den letzten beiden Näherungslösungen ersetzt.

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)\cdot(x_i - x_{i-1})}{f(x_i) - f(x_{i-1})} \qquad (3)$$

Diese Methode ist in Fällen angebracht, wo die analytische Ableitung der Funktion nicht bekannt ist.

d) Fixpunkt-Verfahren

Diese Methode ist auch als „einfache Iteration“ bekannt. Beim Fixpunkverfahren muss das zu lösende Problem $f(x) = 0$ in diese Form gebracht werden: $x = \phi(x)$.

Dann sieht die Iteration folgendermaßen aus

$$x_{i+1} = \phi(x_i) \tag{4}$$

Wieder geht man von einer Startnäherung x_1 aus.
Die oben beschriebenen Verfahren sollten an den Funktionen aus Vorübung 0 getestet und auf ihre Genauigkeit überprüft werden. Außerdem sollte der Verlauf der Konvergenz bis auf die vorgegebene Genauigkeit von 10^{-4} von unterschiedlichen Startwerten aus betrachtet werden.

Testfunktionen

Die beiden Testfunktionen wurden Beispiel 0 entnommen:

$$f_1(x) = x^3 - 5x^2 + 100x - 400 \tag{5}$$

$$f_2(x) = e^{-x} - \frac{0.1}{1+x} \tag{6}$$

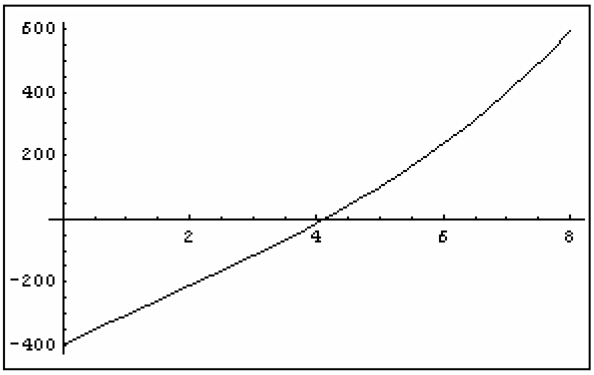

Abb. 1: $f_1(x)$

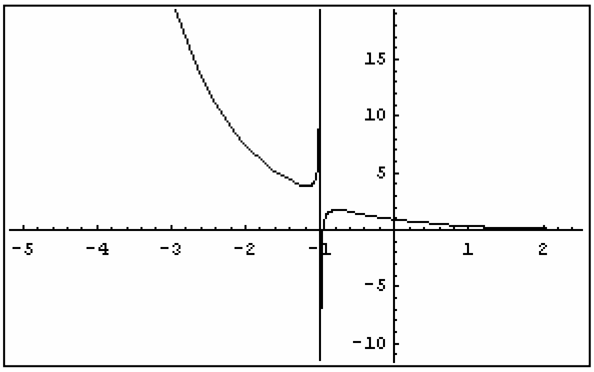

Abb. 2: f2(x)

(Abb. erstellt mit Mathematica 5.0)

Für das Fixpunktverfahren müssen diese nach dem Muster $x = \phi(x)$ umgeformt werden:

$$x = 4 + 0.05x^2 - 0.01x^3 \tag{7}$$

$$x = 0.1e^x - 1 \tag{8}$$

Programmierung

Programmcode siehe Anhang.

Auswertung

Bisektionsverfahren

Das Bisektionsverfahren hat den Vorteil, dass es im Gegensatz zu anderen Methoden *immer* konvergiert Dies rührt daher, dass bei dieser Methode von vornherein eine Nullstelle im

Intervall eingeschlossen ist, um die herum das Intervall suzessive verkleinert wird. Allerdings handelt es sich nur um lineare Konvergenz, d.h. es sind viele Schritte notwendig um die Nullstelle zu erreichen. Für umfangreichere Berechnungen ist also das Bisektionsverfahren nicht unbedingt empfehlenswert, um die Rechenzeit möglichst gering zu halten.
In Tabelle 1 sind die Berechnungsschritte für die Funktion f_1 mit Startwerten von (2.0, 5.0) angegeben. Man kann hier gut sehen, dass die Anzahl der signifikanten Stellen nur linear zunimmt.

Tabelle 1:

steps	x	f(x)
0	3.5000000000000000	-0.6837500000000000E+02
1	4.2500000000000000	0.1145312500000000E+02
2	3.8750000000000000	-0.2939257812500000E+02
3	4.0625000000000000	-0.9222412109375000E+01
4	4.1562500000000000	0.1049713134765625E+01
5	4.1093750000000000	-0.4102451324462891E+01
6	4.1328125000000000	-0.1530433177947998E+01
7	4.1445312500000000	-0.2413808703422546E+00
8	4.1503906250000000	0.4039103165268898E+00
9	4.1474609375000000	0.8120084460824728E-01
10	4.1459960937500000	-0.8010597305838019E-01
11	4.1467285156250000	0.5434445483842865E-03
12	4.1463623046875000	-0.3978226191429712E-01
13	4.1465454101562500	-0.1961965811619848E-01
14	4.1466369628906250	-0.9538169144519770E-02
15	4.1466827392578125	-0.4497377888508680E-02
16	4.1467056274414063	-0.1976970567708403E-02
17	4.1467170715332031	-0.7167639840781059E-03
18	4.1467227935791016	-0.8665996145149069E-04

In den Abbildungen 3 bis 6 ist der in Tabelle 1 gezeigte Verlauf der Berechnung für verschiedene Methoden und Testfunktionen graphisch dargestellt. Auf der x-Achse sind die Ergebnisse der Berechnung schrittweise aufgetragen, die Anzahl der Schritte ist hierbei farbkodiert von rot (=0) bis blau.
In Abb. 3 ist leicht zu sehen, dass das Bisektionsverfahren gegenüber dem Newton-Algorithmus oder dem Fixpunktverfahren sehr lange braucht, nämlich 18 Iterationen, um zur Nullstelle zu gelangen, während das Newton-Verfahren nur 3 Schritte benötigt.

Newton-Verfahren

Das Newton-Verfahren bietet einen leistungsfähigen Algorithmus, der aufgrund seiner Iterationsvorschrift mit quadratischer Konvergenz zur Nullstelle führt. Der Abstand der Zwischenwerte zur wahren Nullstelle, ε_i, wird durch folgende Formel beschrieben, wobei x_0 die wahre Nullstelle ist:

$$\varepsilon_{i+1} = -\varepsilon_i^{\,2} \cdot \frac{f''(x_0)}{2f'(x_0)} \tag{9}$$

Daraus geht hervor, dass das Newton-Verfahren quadratisch konvergiert, d.h. nahe an der wahren Nullstelle x_0 wird die Anzahl der signifikanten Stellen mit jedem Schritt verdoppelt. Graphisch dargestellt ist diese Eigenschaft besonders gut in Abb. 5. Die quadratische Konvergenz macht den Newton-Algorithmus zu einem geeigneten Instrument für numerische

Nullstellensuche, wenn die Konvergenzbedingung erfüllt ist, da dann das Verfahren sehr schnell zum Ergebnis kommt.
Die Konvergenzbedingung lautet für das Newtonverfahren:

$$\left|\frac{f(x)\cdot f''(x)}{f'(x)^2}\right| < 1 \qquad (10)$$

Wenn diese Bedingung für alle $x \in (a,b)$ gegeben ist, konvergiert das Verfahren.
In diesem Zusammenhang ist anzumerken, dass das Newton-Verfahren für die Funktion f_2 nur sehr langsam konvergiert (?), während Bisektionsverfahren und Regula falsi schon nach einigen Iterationen die Nullstelle erreichen. Die beim Newton-Verfahren erreichte Nullstelle entspricht auch nicht exakt der vom Bisektions-Algorithmus errechneten. Es muss daher angenommen werden, dass für diese Funktion das Newton-Verfahren nicht bis zur exakten Nullstelle konvergiert, und/oder dass die Präzisionsabfrage in der Programmierung nicht geeignet ist (Abfrage der Genauigkeit in x laut Angabe) und man daher besser eine Abfrage der Genauigkeit in y vornehmen sollte.

Fixpunktverfahren

Das Fixpunktverfahren hat den Nachteil, dass es eine relativ eingeschränkte Konvergenzbedingung bietet, nämlich $\left|\frac{d\phi}{dx}\right| < 1$. Das heißt, es muss sich um eine kontrahierende Abbildung handeln, damit das Verfahren konvergieren kann. Dabei kommt es noch auf die Art der Umformung an, da diese nicht eindeutig ist. Für die von uns gewählte Darstellung von ϕ (x) (siehe Formel 8) ist $|\phi'(x)| > 1$. Daher konvergiert dieses Verfahren nicht für Funktion 2, wie in den Abbildungen 5 und 6 bzw. 9 und 10 zu sehen ist.

Regula Falsi

Das Regula Falsi- oder Sekanten-Verfahren zeigt in seinem Konvergenzverhalten sehr große Ähnlichkeit zum Bisektionsverfahren. Dies ist sehr gut in den Abbildungen 7 bis 10 zu erkennen. Wie beim Bisektionsverfahren wird ein Start-Intervall gewählt, in dem die Nullstelle eingeschlossen ist, und der jeweils nächste Iterationswert wird in einer Abwandlung des Newton-Verfahrens berechnet. Da die Vorgehensweise dem Bisektionsverfahren ähnelt, zeigt sich bei der Regula Falsi ebenfalls lineares Konvergenzverhalten. Anhand der Abbildungen ist die Ähnlichkeit der beiden Verfahren in ihrem Konvergenzverhalten offensichtlich.

Tabelle 2: Anzahl der benötigten Iterationsschritte

	f_1 (2.0, 5.0)	**f_1 (3.5, 5.0)**	**f_2 (2.0, 5.0)**	**f_2 (3.0, 4.0)**
Bisektion	18	17	7	5
Newton	3	3	72	66
Fixpunkt	3	3	-	-
Regula Falsi	18	17	7	5

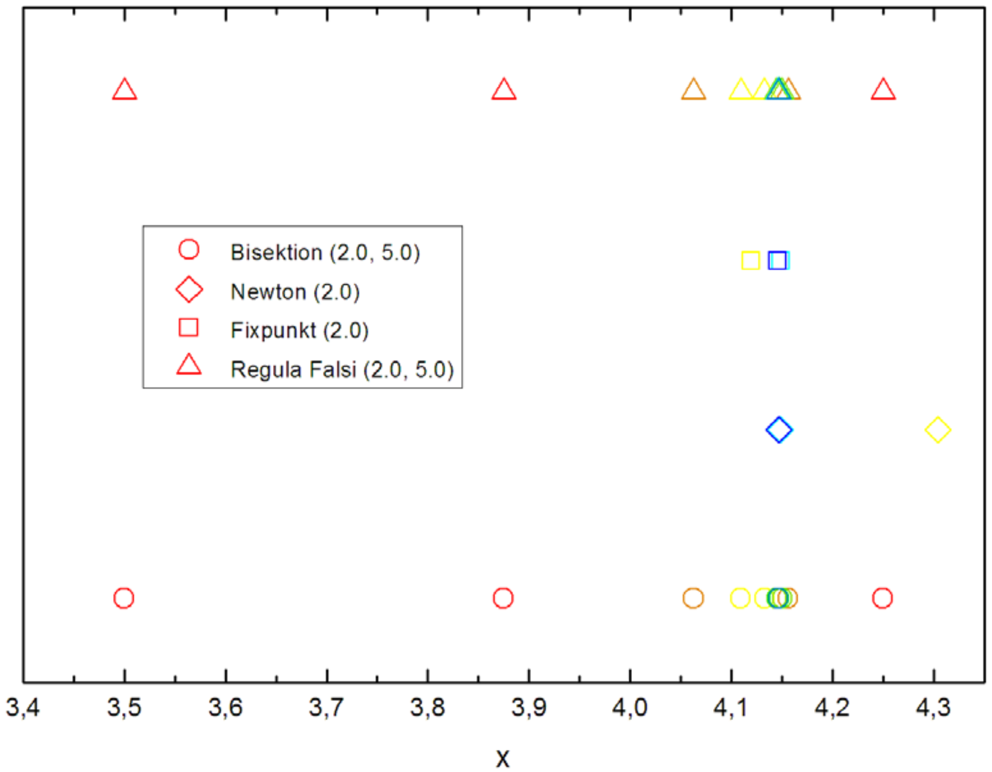

Abb. 3: Vergleich der Berechnung der Nullstelle mit der Funktion f_1 und Startwerten bzw. –Intervallen von 2.0, (5.0)

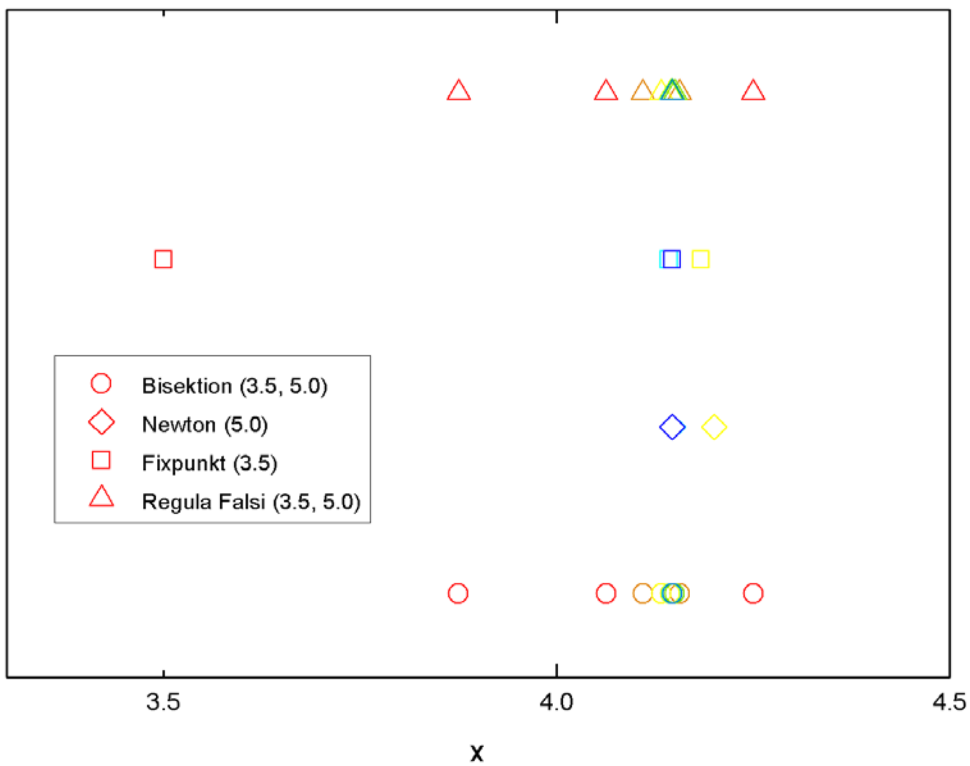

Abb. 4: Vergleich der Berechnung der Nullstelle mit der Funktion f1 und Startwerten bzw. –Intervallen von 3.5, (5.0)

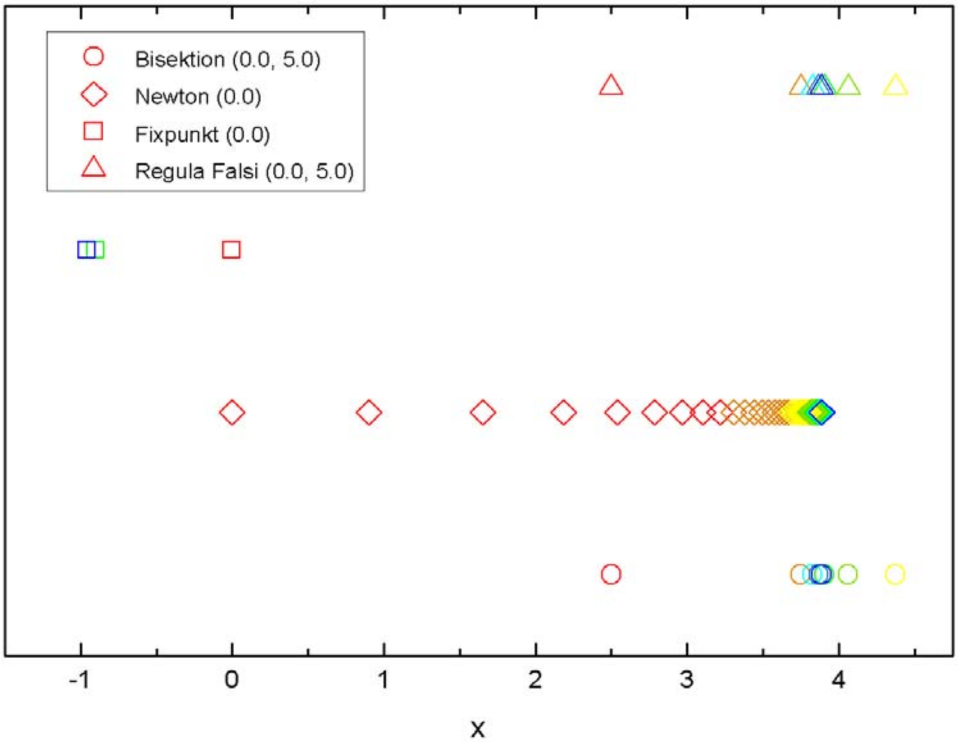

Abb. 5: Vergleich der Berechnung der Nullstelle mit der Funktion f2 und Startwerten bzw. –Intervallen von 0.0, (5.0)

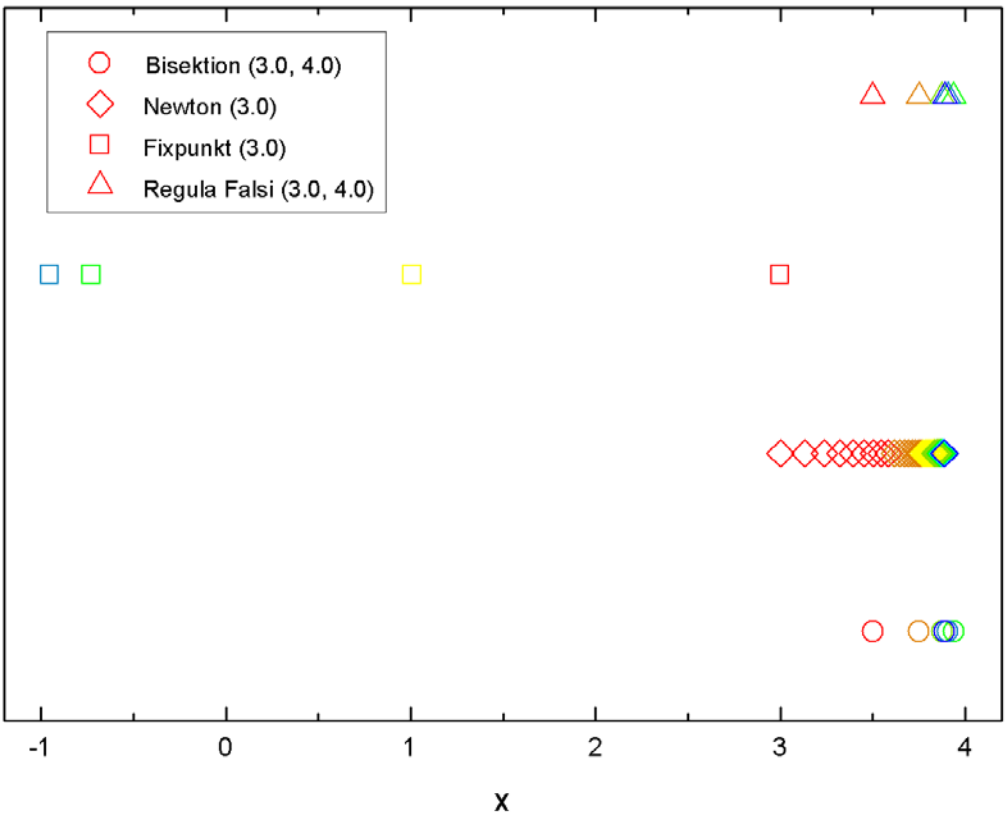

Abb. 6: Vergleich der Berechnung der Nullstelle mit der Funktion f2 und Startwerten bzw. –Intervallen von 3.0, (4.0)

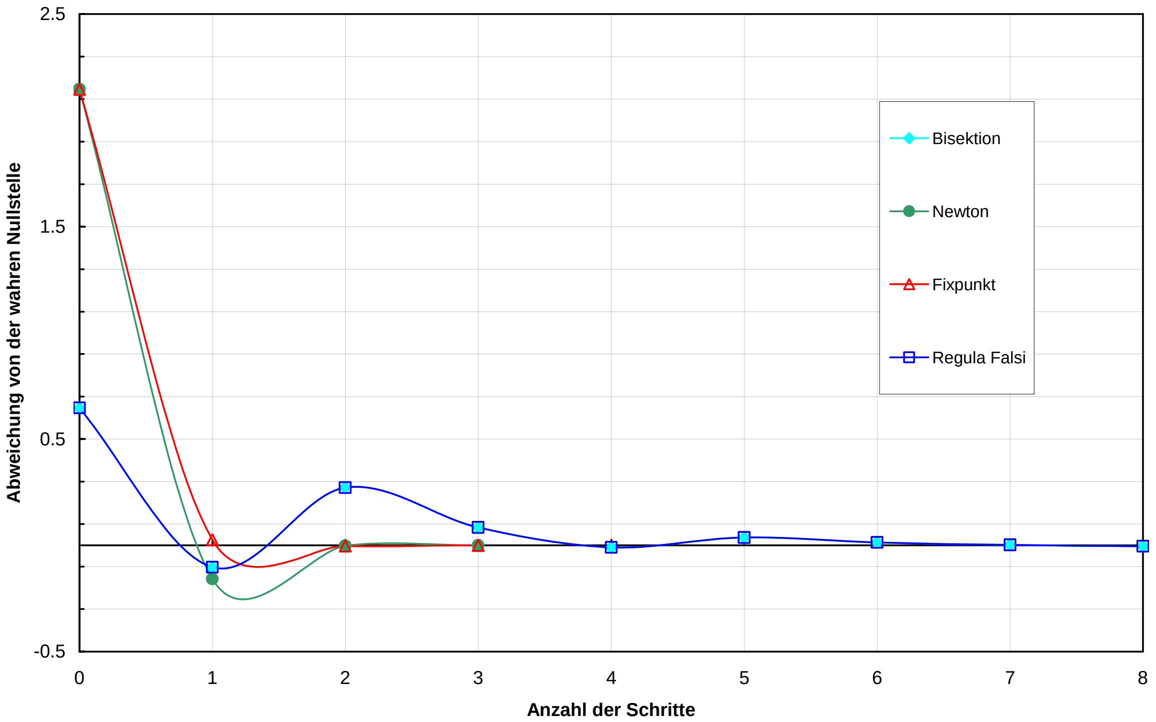

Abb. 7: Vergleich der Konvergenz der Verfahren anhand von Funktion f1 und Startwerten bzw. – Intervallen von 2.0, (5.0)

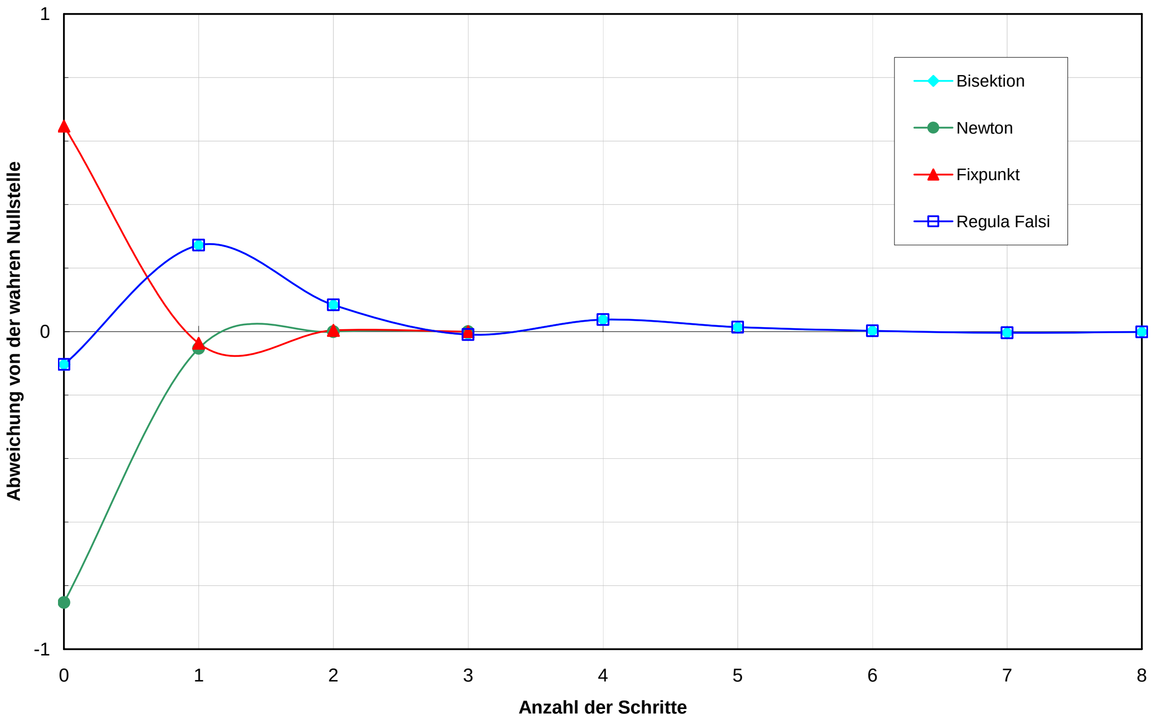

Abb. 8: Vergleich der Konvergenz der Verfahren anhand von Funktion f1 und Startwerten bzw. – Intervallen von 3.5, (5.0)

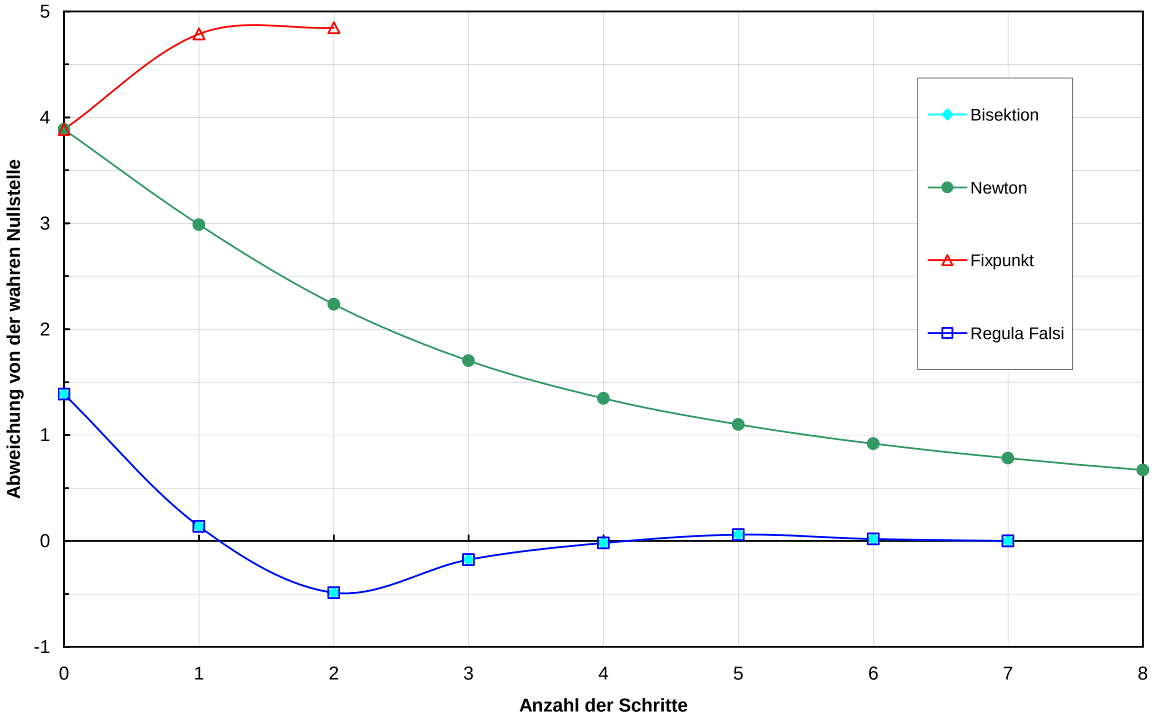

Abb. 9: Vergleich der Konvergenz der Verfahren anhand von Funktion f2 und Startwerten bzw. – Intervallen von 0.0, (5.0)

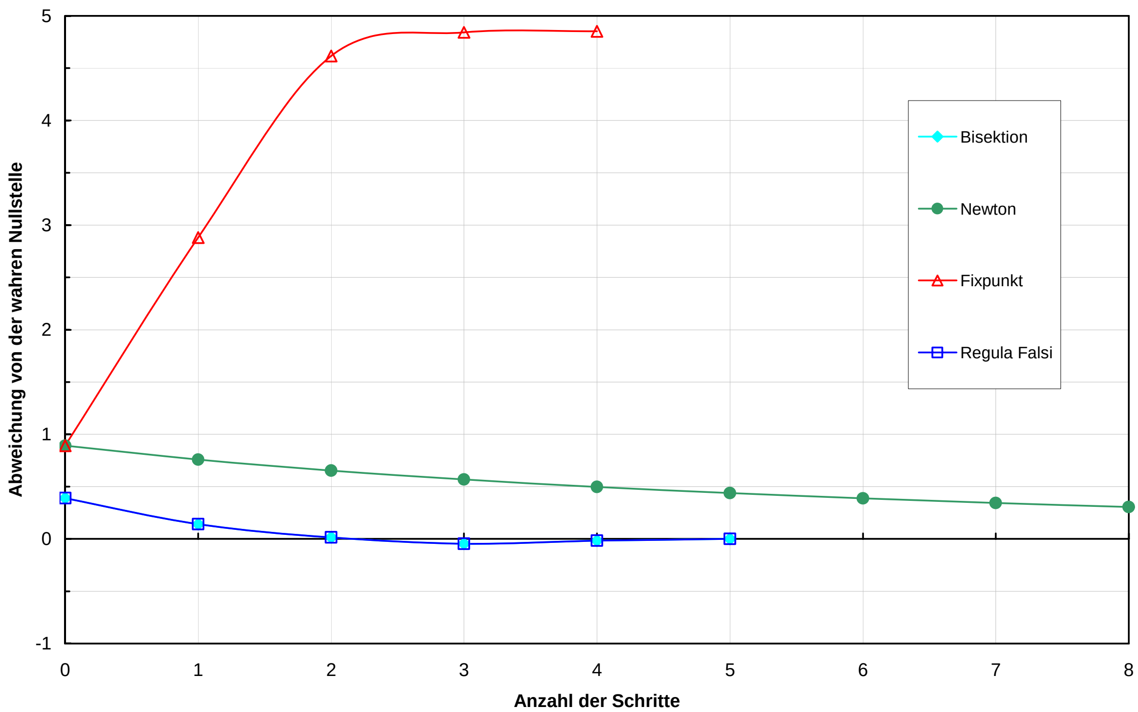

Abb. 10: Vergleich der Konvergenz der Verfahren anhand von Funktion f2 und Startwerten bzw. – Intervallen von 3.0, (4.0)