

13

Der Bisektionsalgorithmus

Wir wenden uns nun der Entwicklung einer allgemeinen Methode zu, um mathematische Modelle zu lösen. Es stellt sich heraus, dass der Bisektionsalgorithmus, den wir benutzt haben, um $\sqrt{2}$ zu approximieren, genauso gut dazu dienen kann, eine Nullstelle einer beliebigen Lipschitz-stetigen Funktion f in einem gegebenen Intervall $[a, b]$ zu approximieren. Voraussetzung ist, dass das Intervall $[a, b]$ die Eigenschaft hat, dass $f(a)$ das entgegengesetzte Vorzeichen von $f(b)$ aufweist. In diesem Kapitel werden wir beschreiben, wie man den Bisektionsalgorithmus benutzt, um ein allgemeines Nullstellenproblem zu lösen, und wir zeigen, dass er konvergiert. Als Anwendung werden wir mit seiner Hilfe ein schwieriges chemisches Modell lösen. Wir werden auch einige praktische Sachverhalte im Zusammenhang mit der Verwendung des Bisektionsalgorithmus diskutieren.

13.1 Der Bisektionsalgorithmus für allgemeine Nullstellenprobleme

Wir betrachten das Problem, für eine gegebene Funktion f eine Nullstelle \bar{x} von

$$f(\bar{x}) = 0 \tag{13.1}$$

in einem gegebenen Intervall $[a, b]$ zu berechnen. Wir nehmen an, dass f auf $[a, b]$ Lipschitz-stetig ist und dass $f(a)$ und $f(b)$ entgegengesetzte Vorzeichen haben.¹

Genau wie beim Modell vom matschigen Hof erzeugt der Bisektionsalgorithmus zwei Folgen $\{x_i\}$ und $\{X_i\}$, die die Endpunkte von Intervallen $[x_i, X_i]$ sind, die eine Nullstelle \bar{x} von (13.1) einschliessen und mit wachsendem i kleiner werden. Da $f(a)$ und $f(b)$ entgegengesetzte Vorzeichen besitzen, setzen wir $x_0 = a$ und $X_0 = b$.

Im ersten Schritt überprüfen wir das Vorzeichen von f im Mittelpunkt $\bar{x}_1 = (x_0 + X_0)/2$. Falls $f(\bar{x}_1) = 0$, so haben wir eine Nullstelle gefunden und beenden den Algorithmus. Ansonsten hat $f(\bar{x}_1)$ das entgegengesetzte Vorzeichen, also das von $f(x_0)$ oder $f(X_0)$. Wir setzen $x_1 = x_0$ und $X_1 = \bar{x}_1$, falls $f(x_0)$ und $f(\bar{x}_1)$ entgegengesetzte Vorzeichen besitzen. Andernfalls setzen wir $x_1 = \bar{x}_1$ und $X_1 = x_1$.

Im zweiten Schritt vergleichen wir das Vorzeichen von $f(\bar{x}_2)$ im Mittelpunkt $\bar{x}_2 = (x_1 + X_1)/2$ mit den Vorzeichen von $f(x_1)$ und $f(X_1)$. Falls $f(\bar{x}_2) = 0$, beenden wir den Algorithmus, andernfalls definieren wir unter Verwendung der Punkte $\{x_1, \bar{x}_2, X_1\}$ das neue Intervall $[x_2, X_2]$ so, dass $f(x_2)$ und $f(X_2)$ entgegengesetzte Vorzeichen haben.

Wir fahren mit diesem Prozess fort und erzeugen eine Folge von Intervallen $[x_i, X_i]$, wobei jeweils $f(x_i)$ und $f(X_i)$ entgegengesetzte Vorzeichen aufweisen. Der Algorithmus kann folgendermaßen zusammengefasst werden.

Algorithmus 13.1 Bisektionsalgorithmus

1. Wir setzen die Anfangswerte $x_0 = a$ und $X_0 = b$, wobei $f(a)$ und $f(b)$ entgegengesetzte Vorzeichen besitzen.
2. Für zwei gegebene rationale Zahlen x_{i-1} und X_{i-1} mit der Eigenschaft, dass $f(x_{i-1})$ und $f(X_{i-1})$ entgegengesetzte Vorzeichen besitzen, setzen wir $\bar{x}_i = (x_{i-1} + X_{i-1})/2$.
 - Falls $f(\bar{x}_i) = 0$, beenden wir den Algorithmus.
 - Falls $f(\bar{x}_i)f(X_{i-1}) < 0$, so setzen wir $x_i = \bar{x}_i$ und $X_i = X_{i-1}$.
 - Falls $f(\bar{x}_i)f(x_{i-1}) < 0$, so setzen wir $x_i = x_{i-1}$ und $X_i = \bar{x}_i$.
3. Wir vergrößern i um 1 und gehen zurück zu Schritt 2.

¹Ein effizienter Weg, dies in der Praxis zu überprüfen, ist nachzuweisen, dass $f(a)f(b) < 0$ ist.

13.2 Wir lösen das Modell des chemischen Gleichgewichts

In Abschnitt 4.5 haben wir das Modell

$$S(0,02 + 2S)^2 - 1,57 \cdot 10^{-9} = 0 \quad (13.2)$$

hergeleitet, das die Löslichkeit S von $\text{Ba}(\text{IO}_3)_2$ in einer 0,020 mol/L Lösung von KIO_3 angibt. Wir benutzen nun den Bisektionsalgorithmus um (13.2) zu lösen.

Unglücklicherweise sind, wie erwähnt, die Nullstellen von (13.2) sehr klein, was es schwierig macht, die Funktion graphisch darzustellen und das Anfangsintervall $[a, b]$ zu bestimmen. Der Graph ist in Abbildung 13.1 dargestellt. Aus diesem Grund ändern wir zunächst den *Maßstab* des Problems

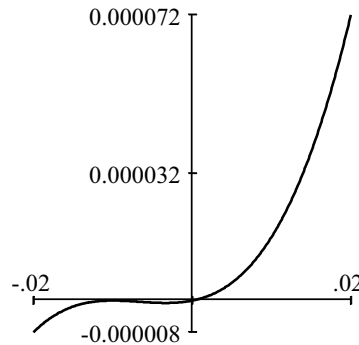


Abbildung 13.1: Eine graphische Darstellung der Funktion $S(0,02 + 2S)^2 - 1,57 \cdot 10^{-9}$ in Modell (13.2). Offensichtlich gibt es Nullstellen bei $-0,01$ und 0 , aber es ist schwierig sie zu finden!

hin zu geeigneteren Variablen. Die Änderung des Maßstabs eines Problems, ist in der Praxis oft notwendig, um die Nullstellen einfacher zu finden. Wir ändern die Variablen bei diesem Problem aus demselben Grund, aus dem wir Kilometer in Meter umändern, wenn wir messen möchten, wie weit ein Baby in 5 Minuten krabbelt. Wir können die Distanz in beiden Einheiten messen, allerdings führt die Einheit Kilometer auf ungünstig kleine Ergebnisse, zumindestens wenn wir etwas angeben wollen.²

Zunächst multiplizieren wir beide Seiten von (13.2) mit 10^9 und erhalten

$$10^9 \cdot S(0,02 + 2S)^2 - 1,57 = 0.$$

²Unglücklicherweise gibt es keine wirkliche „Technik“, um den Maßstab von Variablen zu ändern. Es erfordert einfach Übung und Erfahrung.

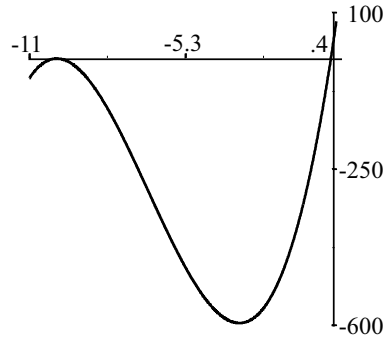


Abbildung 13.2: Eine graphische Darstellung der Funktion $f(x) = x(20 + 2x)^2 - 1,57$ in (13.3).

Als nächstes schreiben wir

$$\begin{aligned} 10^9 \cdot S (0,02 + 2S)^2 &= 10^3 \cdot S \cdot (10^3)^2 \cdot (0,02 + 2S)^2 \\ &= 10^3 \cdot S \cdot (10^3 \cdot (0,02 + 2S))^2 \\ &= 10^3 \cdot S \cdot (20 + 2 \cdot 10^3 \cdot S)^2. \end{aligned}$$

Ausgedrückt in der neuen Variablen $x = 10^3 S$, wollen wir die Nullstelle von

$$f(x) = x(20 + 2x)^2 - 1,57 = 0 \quad (13.3)$$

finden. Wenn wir eine Nullstelle x von (13.3) finden, dann können wir den physikalischen Wert finden, indem wir $S = 10^{-3}x$ berechnen.

Diese neue Funktion, die in Abbildung 13.2 gezeigt ist, besitzt vernünftige, größere Koeffizienten und die Nullstellen sind nicht annähernd so klein, wie bei der ursprünglichen Formulierung. Außerdem ist f ein Polynom und deshalb auf jedem beschränkten Intervall Lipschitz-stetig. Es scheint, dass f eine Nullstelle bei 0 hat, sowie eine weitere Nullstelle bei -10 . Wir ignorieren aber die negative Nullstelle, falls sie existiert, da wir keine „negative“ Löslichkeit haben können.

Da die positive Nullstelle von (13.3) in der Nähe der Null liegt, wählen wir $x_0 = -0,1$ and $X_0 = 0,1$ und wenden 20 Schritte des Algorithmus 13.1 an. Die Ergebnisse sind in Abbildung 13.3 gezeigt. Sie deuten darauf hin, dass die Nullstelle von (13.3) bei $x \approx 0,00392$ bzw. $S \approx 3,92 \cdot 10^{-6}$ liegt.

13.3 Der Bisektionsalgorithmus konvergiert

Um zu zeigen, dass der Bisektionsalgorithmus gegen eine Nullstelle von (13.1) konvergiert, zeigen wir, dass die Folge $\{x_i\}$ eine Cauchy-Folge ist und daher einen Grenzwert besitzt. Anschließend zeigen wir, dass ihr Grenzwert eine Nullstelle ist.

Die Konvergenz des Algorithmus wird auf dieselbe Art nachgewiesen, wie bei der Berechnung von $\sqrt{2}$. Im Schritt i ist f im Mittelpunkt \bar{x}_i von x_{i-1} und X_{i-1} entweder Null und wir haben eine Nullstelle gefunden, d.h. $f(\bar{x}_i) = 0$, oder $f(\bar{x}_i)$ hat entgegengesetztes Vorzeichen von entweder $f(x_{i-1})$ oder $f(X_{i-1})$. Wir erhalten dann ein neues Intervall $[x_i, X_i]$, welches halb so groß ist wie das vorige. Nach i Schritten gilt

$$0 \leq X_i - x_i \leq 2^{-i}(X_0 - x_1) = 2^{-i}(b - a).$$

Wir argumentieren genauso wie bei der Berechnung von $\sqrt{2}$ und erhalten

$$|x_i - x_j| \leq 2^{-i}(b - a), \quad \text{falls } j \geq i. \quad (13.4)$$

Dies bedeutet, dass $\{x_i\}$ eine Cauchy-Folge ist und deshalb gegen eine eindeutige reelle Zahl \bar{x} konvergiert.

Um zu überprüfen, dass \bar{x} eine Nullstelle von f ist, benutzen wir die Definition

$$f(\bar{x}) = f(\lim_{i \rightarrow \infty} x_i) = \lim_{i \rightarrow \infty} f(x_i).$$

Dies ergibt Sinn, da f auf $[a, b]$ Lipschitz-stetig ist. Nehmen wir jetzt an, dass $f(\bar{x})$ ungleich Null ist, zum Beispiel $f(\bar{x}) > 0$. Da f auf einem Intervall um \bar{x} herum Lipschitz-stetig ist, liegen die Werte von $f(x)$ nahe bei $f(\bar{x})$ für alle Punkte x nahe bei \bar{x} . Da $f(\bar{x}) > 0$ ist, bedeutet dies, dass $f(x) > 0$ für x nahe bei \bar{x} ist.

Genauer gesagt: Wenn wir $\delta > 0$ hinreichend klein wählen, dann ist f für alle Punkte im Intervall $(\bar{x} - \delta, \bar{x} + \delta)$ positiv (vgl. Abbildung 13.4). Wenn wir i aber so wählen, dass $2^{-i} < \delta$, dann haben sowohl x_i als auch X_i maximal den Abstand δ von \bar{x} . Dann aber sind $f(x_i)$ und $f(X_i)$ beide positiv (vgl. Abbildung 13.4). Dies widerspricht der Wahl von x_i und X_i im Bisektionsalgorithmus, da $f(x_i)$ und $f(X_i)$ entgegengesetzte Vorzeichen besitzen müssen. Ein ähnliches Argument funktioniert für $f(\bar{x}) < 0$. Deshalb gilt $f(\bar{x}) = 0$.

Wir fassen dies in folgendem Satz zusammen.

Satz 13.1 Satz von Bolzano *Wenn f auf einem Intervall $[a, b]$ Lipschitz-stetig ist, und $f(a)$ und $f(b)$ entgegengesetzte Vorzeichen besitzen, dann hat f mindestens eine Nullstelle in (a, b) und der Bisektionsalgorithmus, der*

i	x_i	X_i
0	-0,100000000000000	0,100000000000000
1	0,000000000000000	0,100000000000000
2	0,000000000000000	0,050000000000000
3	0,000000000000000	0,025000000000000
4	0,000000000000000	0,012500000000000
5	0,000000000000000	0,006250000000000
⋮	⋮	⋮
10	0,003906250000000	0,004101562500000
⋮	⋮	⋮
15	0,00391845703125	0,00392456054688
⋮	⋮	⋮
20	0,00392189025879	0,00392208099365

Abbildung 13.3: 20 Schritte des Bisektionsalgorithmus, angewendet auf (13.3) unter Verwendung von $x_0 = -0,1$ und $X_0 = 0,1$.

mit $x_0 = a$ und $X_0 = b$ beginnt, konvergiert gegen eine Nullstelle von f in (a, b) .³

Wir benennen diesen Satz nach Bolzano,⁴ der eine frühe Version bewies.

Eine Konsequenz von Bolzanos Satz ist der folgende wohlbekannte und wichtige Satz, den wir Sie in Aufgabe 13.9 zu beweisen bitten.

Satz 13.2 Der Zwischenwertsatz *Nehmen wir an, dass f auf einem Intervall $[a, b]$ Lipschitz-stetig ist. Dann gibt es für jedes d zwischen $f(a)$ und $f(b)$ mindestens einen Punkt c zwischen a und b , so dass $f(c) = d$ ist.*

³Es kann sehr wohl mehr als eine Nullstelle von f in (a, b) geben, und wenn es mehr als eine Nullstelle gibt, ist unklar, welche Nullstelle durch den Bisektionsalgorithmus gefunden wird.

⁴Bernard Placidus Johann Nepomuk Bolzano (1781–1848) lebte und arbeitete in der heutigen Tschechischen Republik. Zum römisch katholischen Priester geweiht, hielt er Positionen als Professor der Theologie und Philosophie inne, während er beachtliche Zeit der Mathematik widmete. Insbesondere kümmerte sich Bolzano um die Grundlagen der Mathematik. Er versuchte, die Analysis auf ein strengeres Fundament zu stellen, indem er die „infinitesimalen Größen“ entfernte. Er untersuchte auch unendliche Mengen und die Unendlichkeit und ahnte wohl Cantor voraus. Bolzano gebrauchte eine moderne Definition der Stetigkeit einer Funktion und leitete sowohl seinen nach ihm benannten Satz, als auch den Zwischenwertsatz her. Sein Beweis war jedoch unvollständig, da ihm die rigorose Theorie der reellen Zahlen fehlte. Bolzano gebrauchte die Idee einer Cauchy-Folge auch einige Jahre vor Cauchy, obgleich Cauchy dies wahrscheinlich nicht wußte. Ein Großteil von Bolzanos Arbeit wurde niemals veröffentlicht, was den Einfluss seiner Ergebnisse verringerte.

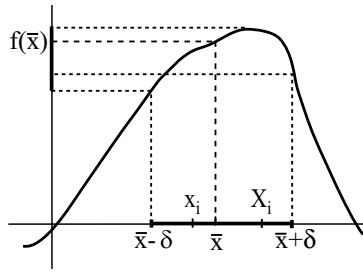


Abbildung 13.4: Wenn f Lipschitz-stetig und $f(\bar{x}) > 0$ ist, dann ist f positiv in allen Punkten nahe \bar{x} .

Bezüglich der Diskussion in Abschnitt 12.3 impliziert dieser Satz, dass das Bild eines Intervalls unter einer Lipschitz-stetigen Funktion wieder ein Intervall ist.

13.4 Wann man den Bisektionsalgorithmus beendet

Da wir jetzt wissen, dass $\{x_i\}_{i=0}^{\infty}$ gegen \bar{x} konvergiert, wäre es nützlich zu wissen, wie schnell die Folge konvergiert. Mit anderen Worten, wir hätten gerne eine Abschätzung des Fehlers der Iteration

$$|x_i - \bar{x}| = \left| x_i - \lim_{j \rightarrow \infty} x_j \right| \quad (13.5)$$

für jedes i . Erinnern Sie sich daran, dass wir \bar{x} nicht kennen, deshalb können wir nicht einfach $|\bar{x} - x_i|$ berechnen! Es ist wichtig, über eine Abschätzung für (13.5) zu verfügen, zum Beispiel um zu wissen, wie viele Iterationen des Bisektionsalgorithmus ausgeführt werden müssen, um den Wert von \bar{x} bis auf eine vorgegebene Genauigkeit zu bestimmen.

Die Differenz (13.5) kann beliebig klein gemacht werden, indem i groß genug gewählt wird, wir möchten aber über präzisere Informationen verfügen. Wenn $j \geq i$, dann stimmt x_j in einer größeren Anzahl von Dezimalstellen mit \bar{x} überein als x_i . Deshalb liegt x_j für großes j viel näher an \bar{x} als an x_i und $|x_i - x_j|$ ist eine gute Approximation von $|x_i - \bar{x}|$. Wir schätzen unter Verwendung der Dreiecksungleichung ab

$$\begin{aligned} |x_i - \bar{x}| &= |(x_i - x_j) + (x_j - \bar{x})| \\ &\leq |x_i - x_j| + |x_j - \bar{x}|. \end{aligned}$$

Diese Ungleichung schätzt die Distanz zwischen x_i und \bar{x} unter Verwendung der Distanz zwischen x_i und x_j und der Distanz zwischen x_j und \bar{x} ab. Für

ein beliebiges gegebenes $\epsilon > 0$ ist jetzt $|x_j - \bar{x}| \leq \epsilon$, wenn j hinreichend groß ist. Deshalb impliziert (13.4), dass für ein beliebiges $\epsilon > 0$

$$|x_i - \bar{x}| \leq 2^{-i}(b - a) + \epsilon.$$

Da ϵ beliebig klein gewählt werden kann, schlußfolgern wir

$$|x_i - \bar{x}| \leq 2^{-i}(b - a).$$

BEISPIEL 13.1. Da $2^{-10} \approx 10^{-3}$ ist, erhalten wir ungefähr 3 Dezimalstellen für 10 sukzessive Schritte des Bisektionsalgorithmus. Wir können diese vorhergesagte Zunahme an Genauigkeit zum Beispiel in den in Abbildung 10.3 und Abbildung 13.3 aufgelisteten Zahlen erkennen.

13.5 Potenzfunktionen

Da wir jetzt mit dem Bisektionsalgorithmus Nullstellen berechnen können, können wir a^r für eine beliebige positive reelle Zahl a und eine beliebige reelle Zahl r definieren. Bis jetzt haben wir nur a^r definiert, wenn r eine ganze Zahl ist.

Zuerst betrachten wir den Fall, dass r rational ist, d.h. $r = p/q$ für ganze Zahlen p und q . Für $a > 0$ definieren wir $a^{p/q}$ als die positive Nullstelle von

$$f(x) = x^q - a^p = 0. \quad (13.6)$$

Solch eine Nullstelle existiert nach dem Mittelwertsatz, da a^p eine feste positive Zahl ist, so dass $x^q > a^p$ für alle hinreichend großen x und ebenso $x^q < a^p$ für $x = 0$ ist. Wenn wir $x_0 = 0$ definieren und X_0 hinreichend groß wählen, dann konvergiert der Bisektionsalgorithmus, auf $[x_0, X_0]$ gestartet gegen einer Nullstelle von (13.6).

BEISPIEL 13.2. Erinnern wir uns, dass wir $2^{1/2} = \sqrt{2}$ als die Nullstelle von $f(x) = x^2 - 2^1$ definiert haben und den Wert errechnet haben, indem wir den Bisektionsalgorithmus angewendet haben, mit dem Intervall $[1, 2]$ als Startwert, wobei $f(1) < 0$ und $f(2) > 0$ war.

Unter Verwendung dieser Definition ist es möglich zu zeigen, dass die Eigenschaften von Exponenten, wie zum Beispiel $a^r a^s = a^{r+s}$, $a^{-r} = 1/a^r$ und $(a^r)^s = a^{rs}$, die für ganzzahlige Exponenten gelten, auch für die rationalen Exponenten gelten. Es ist jedoch schwierig, dies zum jetzigen Zeitpunkt zu tun, während es nach Einführung der Definition des Logarithmus leicht fällt. Deshalb verschieben wir den Beweis dieser Eigenschaften auf das Kapitel 28.

Auf die Diskussion über die reellen Zahlen aufbauend, wird a^r für eine reelle Zahl r definiert, indem man den Grenzwert von a^{r_i} für $i \rightarrow \infty$ dafür wählt, wobei r_i die abgeschnittene Dezimaldarstellung von r mit i Dezimalstellen darstellt. Um jedoch zu zeigen, dass dies Sinn ergibt, müssen wir zeigen, dass a^r in r Lipschitz-stetig ist, und unter Verwendung dieser Definition ist dies nicht einfach. So verschieben wir ein weiteres Mal die Diskussion dieser Definition, bis wir den Logarithmus kennengelernt haben, der alles viel einfacher macht.

Mit der Fähigkeit, den Wert von a^r für eine beliebige nicht-negative Zahl a und eine gegebene reelle Zahl r zu berechnen, ist es natürlich, die **Potenzfunktion** mit der Potenz r als

$$x^r,$$

zu definieren, wobei x eine nicht-negative reelle Zahl ist. Hier betrachten wir r als eine feste reelle Zahl. Und wieder verschieben wir die Diskussion der Details, bis wir den Logarithmus benutzen können. Allerdings ist es möglich zu zeigen, dass x^r auf beschränkten Intervallen (für $r \geq 1$), sowie auf reellen Intervallen $[a, b]$ mit $a > 0$ für $0 \leq r < 1$ Lipschitz-stetig ist. In Abbildung 13.5 zeigen wir graphische Darstellungen von x^r für diese beiden Fälle.

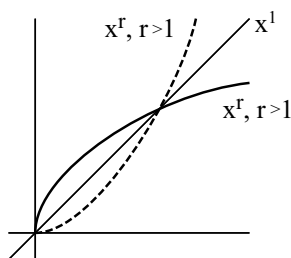


Abbildung 13.5: Graphische Darstellungen von x^r für $r < 1$, $r = 1$ und $r > 1$.

BEISPIEL 13.3. Wir überprüfen, dass $x^{1/2} = \sqrt{x}$ auf einem beliebigen beschränkten Intervall $[a, b]$ mit $a > 1$ Lipschitz-stetig ist. Die Eigenschaften von Exponenten implizieren

$$(x^{1/2} - y^{1/2})(x^{1/2} + y^{1/2}) = ((x^{1/2})^2 - (y^{1/2})^2) = x - y;$$

deshalb gilt

$$|x^{1/2} - y^{1/2}| = \frac{x - y}{|x^{1/2} + y^{1/2}|} \leq \frac{1}{2a^{1/2}} |x - y|,$$

vorausgesetzt, dass $x \geq a > 0$ und $y \geq a > 0$. Deshalb ist die Lipschitz-Konstante von \sqrt{x} auf $[a, b]$ der Wert $1/2\sqrt{a}$. Wenn a kleiner wird, wird die Konstante größer. Wenn wir den Graphen von x^r für $r < 1$ in Abbildung 13.5 untersuchen, sehen wir, dass wenn x nahe 0 liegt, die Funktion große Veränderungen im Wert für kleine Veränderungen im Argument erfährt.

13.6 Die Berechnung von Nullstellen mit dem Dekasektionsalgorithmus

Es stellt sich heraus, dass es viele verschiedene Wege gibt, eine Nullstelle von einer Funktion zu berechnen. Die Wahl der Methode hängt vom Sachverhalt des Problems ab, das wir lösen müssen.

Um darzustellen, wie eine andere Methode funktionieren kann, beschreiben wir eine Abwandlung des Bisektionsalgorithmus, genannt der „Dekasektionsalgorithmus“. Genauso wie der Bisektionsalgorithmus erzeugt der Dekasektionsalgorithmus eine Folge von Zahlen $\{x_i\}_{i=0}^{\infty}$, die gegen eine Nullstelle \bar{x} konvergiert. Beim Dekasektionsalgorithmus gibt es jedoch eine enge Verbindung zwischen dem Index i von x_i und der Anzahl von Dezimalstellen, die x_i und \bar{x} gemeinsam haben.

Der Dekasektionsalgorithmus funktioniert genauso wie der Bisektionsalgorithmus, mit der Ausnahme, dass bei jedem Schritt das gegenwärtige Intervall in 10 Teilintervalle anstelle von 2 unterteilt wird. Wir beginnen genauso wie zuvor, indem wir $x_0 = a$ und $X_0 = b$ wählen, so dass $f(x_0)f(X_0) < 0$ ist. Als nächstes berechnen wir den Wert von f in neun Punkten mit gleichen Abständen zwischen x_0 und X_0 . Genauer gesagt, wir setzen $\delta_0 = (X_0 - x_0)/10$ und überprüfen die Vorzeichen von f in den Punkten $x_0, x_0 + \delta_0, x_0 + 2\delta_0, \dots, x_0 + 9\delta_0, x_0 + 10\delta_0 = X_0$. Es muss zwei aufeinander folgende Punkte geben, bei denen f entgegengesetzte Vorzeichen aufweist, deshalb setzen wir x_1 und X_1 als die zwei aufeinander folgenden Punkte, für die $f(x_1)f(X_1) < 0$ gilt.

Wir fahren jetzt mit dem Algorithmus fort, indem wir f in neun Punkten mit gleichen Abständen, $x_1 + \delta_1, x_1 + 2\delta_1, \dots, x_1 + 9\delta_1$ mit $\delta_1 = (X_1 - x_1)/10$, auswerten. Wir wählen zwei aufeinanderfolgende Zahlen x_2 und X_2 aus den Zahlen $x_1, x_1 + \delta_1, x_1 + 2\delta_1, \dots, x_1 + 9\delta_1, X_1$ mit $f(x_2)f(X_2) < 0$. Wir fahren mit der Berechnung von $[x_3, X_3]$ usw. fort.

Nach Konstruktion gilt

$$|x_i - X_i| \leq 10^{-i}(b - a)$$

und mit demselben Argument, das wir für den Bisektionsalgorithmus verwendet haben, folgern wir

$$\lim_{i \rightarrow \infty} x_i = \bar{x} \quad \text{und} \quad \lim_{i \rightarrow \infty} X_i = \bar{x}; \quad (13.7)$$

und außerdem

$$|x_i - \bar{x}| \leq 10^{-i}(b - a).$$

Wir erhalten also ungefähr eine Stelle an Genauigkeit für jeden Schritt des Dekasektionsalgorithmus.

In Abbildung 13.6 sind die ersten 14 Schritte dieses Algorithmus, angewendet auf $f(x) = x^2 - 2$ und beginnend auf $[1, 2]$, dargestellt.

i	x_i	X_i
0	1,000000000000000	2,000000000000000
1	1,400000000000000	1,500000000000000
2	1,410000000000000	1,420000000000000
3	1,414000000000000	1,415000000000000
4	1,414200000000000	1,414300000000000
⋮	⋮	⋮
9	1,414213562000000	1,414213563000000
⋮	⋮	⋮
14	1,41421356237309	1,41421356237310

Abbildung 13.6: 14 Schritte des Dekasektionsalgorithmus, angewendet auf $f(x) = x^2 - 2$ und ausgeführt durch eine *MATLAB*® m-Datei.

Sobald wir mehr als eine Methode für die Berechnung einer Nullstelle einer Funktion haben, liegt es nahe zu fragen, welche Methode die „beste“ ist. Selbstverständlich müssen wir entscheiden, was wir mit der „besten“ meinen. Für dieses Problem könnte „beste“ zum Beispiel „die genaueste“ oder die „billigste“ bedeuten.

Bei diesem Problem jedoch ist die Genauigkeit offensichtlich kein Thema, da sowohl der Dekasektions- als auch der Bisektionsalgorithmus ausgeführt werden können, bis wir 16 Stellen, oder wieviele Stellen auch immer in der Gleitpunkt-Darstellung benutzt werden, erhalten. Deshalb vergleichen wir die Methoden anhand der Berechnungszeit, die wir benötigen, um eine bestimmte Genauigkeit zu erreichen. Diese Berechnungszeit wird oft die **Kosten** der Berechnung genannt, ein Überbleibsel aus den Tagen, als die CPU-Zeit tatsächlich pro Sekunde erworben wurde.

Die Kosten, die mit einem dieser Algorithmen verbunden sind, können bestimmt werden, indem man die Kosten pro Iteration ermittelt und sie dann mit der Gesamtanzahl von Iterationen, die man benötigt, um die gewünschte Genauigkeit zu erhalten, multipliziert. In einem Schritt des Bisektionsalgorithmus muss der Computer den Mittelpunkt zwischen zwei Punkten berechnen, die Funktion f an diesem Punkt auswerten und den Wert vorübergehend speichern, das Vorzeichen des Funktionswerts überprüfen und dann die neuen Iterierten x_i und X_i speichern. Wir nehmen

an, dass die Zeit, die der Computer benötigt, um jede dieser Operationen auszuführen, gemessen werden kann und wir definieren

$$\begin{aligned} C_m &= \text{Die Kosten für die Berechnung des Mittelpunktes} \\ C_f &= \text{Die Kosten für die Auswertung von } f \text{ an einem Punkt} \\ C_{\pm} &= \text{Die Kosten für die Überprüfung des Vorzeichens einer Variablen} \\ C_s &= \text{Die Kosten der Speicherung einer Variablen.} \end{aligned}$$

Die Gesamtkosten eines Schritts des Bisektionsalgorithmus betragen

$$C_m + C_f + C_{\pm} + 4C_s,$$

und die Kosten nach N_b Schritten belaufen sich auf

$$N_b(C_m + C_f + C_{\pm} + 4C_s). \quad (13.8)$$

Ein Schritt des Dekasektionsalgorithmus hat wesentlich höhere Kosten, da es 9 zu überprüfende Zwischenpunkte gibt. Die Gesamtkosten nach N_d Schritten des Dekasektionsalgorithmus belaufen sich auf

$$N_d(9C_m + 9C_f + 9C_{\pm} + 20C_s). \quad (13.9)$$

Andererseits nimmt die Differenz $|x_i - \bar{x}|$ mit einem Faktor von $1/10$ in jedem Schritt des Dekasektionsalgorithmus ab, im Vergleich zu einem Faktor von $1/2$ in jedem Schritt des Bisektionsalgorithmus. Da $1/2^3 > 1/10 > 1/2^4$ ist, bedeutet dies, dass der Bisektionsalgorithmus zwischen 3 und 4 mal so viele Schritte benötigt wie der Dekasektionsalgorithmus, um die anfängliche Größe $|x_0 - \bar{x}|$ um einen gegebenen Faktor zu verringern. Deshalb ist $N_b \approx 4N_d$. Dies führt zu Kosten des Bisektionsalgorithmus in Höhe von

$$4N_d(C_m + C_f + C_{\pm} + 4C_s) = N_d(4C_m + 4C_f + 4C_{\pm} + 16C_s)$$

verglichen mit (13.9). Dies bedeutet, dass die Verwendung des Bisektionsalgorithmus billiger ist, als die des Dekasektionsalgorithmus.

Kapitel 13 Aufgaben

13.1.

Implementieren Sie Algorithmus 13.1, um eine Nullstelle einer allgemeinen Funktion f herauszufinden. Testen Sie ihr Programm, indem Sie eine Nullstelle von $f(x) = x^2 - 2$ berechnen; beginnen Sie mit dem Intervall $[1, 2]$ und vergleichen Sie ihre Ergebnisse mit Abbildung 10.3.

Die Aufgaben 13.2–13.5 benutzen den Bisektionsalgorithmus, um eine Modellgleichung zu lösen. Das Programm aus Aufgabe 13.1 wird hier von Nutzen sein.

13.2. Im Modell für die Löslichkeit von $\text{Ba}(\text{IO}_3)_2$ nehmen wir an, dass K_{sp} für $\text{Ba}(\text{IO}_3)_2$ der Wert $1,8 \cdot 10^{-5}$ ist. Bestimmen Sie die Löslichkeit S auf 10 Dezimalstellen genau.

13.3. Bestimmen Sie im Modell für die Löslichkeit von $\text{Ba}(\text{IO}_3)_2$ die Löslichkeit von $\text{Ba}(\text{IO}_3)_2$ in einer $0,037 \text{ mol/L}$ Lösung von KIO_3 auf 10 Dezimalstellen genau.

13.4. Die Leistung P , die in eine Last R eines einfachen Klasse A–Verstärkers mit Ausgangswiderstand Q und Ausgangsspannung E eingespeist wird, ist

$$P = \frac{E^2 R}{(Q + R)^2}.$$

Bestimmen Sie alle möglichen Lösungen R für $P = 1$, $Q = 3$ und $E = 4$ auf 10 Dezimalstellen genau.

13.5. Das Van der Waals–Modell für ein Mol eines idealen Gases, einschließlich den Effekten der Größe der Moleküle und den Anziehungskräften, ist

$$\left(P + \frac{a}{V^2}\right) (V - b) = RT,$$

wobei P der Druck, V das Volumen des Gases, T die Temperatur, R die universelle Gas-Konstante, a eine Konstante, die von der Größe der Moleküle und den Anziehungskräften abhängig ist, und b eine Konstante ist, die von dem Volumen aller Moleküle in einem Mol abhängt. Bestimmen Sie alle möglichen Volumen V des Gases für $P = 2$, $T = 15$, $R = 3$, $a = 50$ und $b = 0,011$ auf 10 Dezimalstellen.

Die Aufgaben 13.6–13.8 behandeln die Genauigkeit des Bisektionsalgorithmus. Das Programm aus Aufgabe 13.1 kann hier wieder nutzbringend verwendet werden.

13.6. (a) Führen Sie 30 Schritte des Bisektionsalgorithmus aus, angewendet auf $f(x) = x^2 - 2$ und beginnen Sie mit (1) $x_0 = 1$ und $X_0 = 2$; (2) $x_0 = 0$ und $X_0 = 2$; (3) $x_0 = 1$ und $X_0 = 3$ und (4) $x_0 = 1$ und $X_0 = 20$. Vergleichen Sie die Fehler $|x_i - \sqrt{2}|$ der Ergebnisse bei jedem Schritt und erklären Sie die beobachtete Differenz in der Genauigkeit.

(b) Unter Verwendung der Ergebnisse aus (a), stellen Sie (1) $|X_i - x_i|$ in Abhängigkeit von i ; (2) $|x_i - x_{i-1}|$ in Abhängigkeit von i und (3) $|f(x_i)|$ in Abhängigkeit von i graphisch dar. Bestimmen Sie für jeden Fall, ob die graphisch dargestellte Größe mit einem Faktor von $1/2$ nach jedem Schritt abnimmt.

13.7. Stellen Sie die Ergebnisse von 40 Schritten des Bisektionsalgorithmus, angewendet auf $f(x) = x^2 - 2$ unter Verwendung von $x_0 = 1$ und $X_0 = 2$, dar. Beschreiben Sie alles, was Sie bei den letzten 10 Werten von x_i und X_i bemerken und erklären Sie, was Sie erkennen. *Hinweis:* Beachten Sie die Gleitpunktdarstellung auf dem Computer, den Sie benutzen.

13.8. Wenden Sie den Bisektionsalgorithmus auf die Funktion

$$f(x) = \begin{cases} x^2 - 1, & x < 0 \\ x + 1, & x \geq 0 \end{cases}$$

an und beginnen Sie mit $x_0 = -0,5$ und $X_0 = 1$. Erklären Sie die Ergebnisse.

Die Aufgaben 13.9 und 13.10 befassen sich mit dem Zwischenwertsatz.

13.9. Zeigen Sie, dass Satz 13.2 wahr ist.

13.10. Wandeln Sie Algorithmus 13.1 ab, so dass Sie ein Programm zu erhalten, das einen Punkt c mit $f(c) = d$ berechnet, wobei d eine beliebige Zahl zwischen $f(a)$ und $f(b)$ und f auf $[a, b]$ Lipschitz-stetig ist. Testen Sie es, indem Sie den Punkt herausfinden, an dem $f(x) = x^3$ gleich 9 ist. Beachten Sie, dass $f(2) = 8$ und $f(3) = 27$ ist.

Aufgabe 13.11 behandelt die Potenzfunktion. Bevor Sie dieses Problem angehen, sehen Sie noch einmal Beispiel 13.3 durch.

13.11. (a) Beweisen Sie, dass $x^{1/3}$ auf jedem beschränkten Intervall $[a, b]$ mit $a > 0$ Lipschitz-stetig ist. (b) Beweisen Sie, dass $x^{3/2}$ auf jedem beschränkten Intervall $[a, b]$ mit $a \geq 0$ Lipschitz-stetig ist.

Die Aufgaben 13.12 und 13.13 befassen sich mit Abwandlungen des Bisektionsalgorithmus.

13.12. (a) Schreiben Sie einen Algorithmus für den Dekasektionsalgorithmus in einer ähnlichen Form nieder, wie den Algorithmus 13.1. (b) Programmieren Sie den Algorithmus und berechnen Sie dann $\sqrt{2}$ auf 15 Stellen. (c) Zeigen Sie, dass (13.7) gilt. (d) Zeigen Sie, dass (13.9) gültig ist.

13.13. (a) Entwickeln Sie einen Trisektionsalgorithmus, um eine Nullstelle von $f(\bar{x}) = 0$ zu berechnen. (b) Implementieren Sie den Algorithmus. (c) Berechnen Sie $\sqrt{2}$ auf 15 Stellen. (c) Zeigen Sie, dass die Endpunkte, die vom Algorithmus erzeugt wurden, eine Cauchy-Folge bilden. (d) Zeigen Sie, dass der Grenzwert der Folge \bar{x} ist; (e) Schätzen Sie $|x_i - \bar{x}|$ ab. (e) Berechnen Sie die Kosten des Algorithmus und vergleichen Sie ihn mit den Kosten des Bisektions- und des Dekasektionsalgorithmus.

Angewandte Analysis in einer Unbekannten
Estep, D.

2005, XXII, 678 S., Softcover

ISBN: 978-3-540-21898-2