Wie bei der Berechnung einer n-ten Wurzel einer komplexen Zahl mit Hilfe eines Näherungsverfahrens, werden in der Mathematik häufig Probleme dadurch gelöst, dass man eine Startschätzung x_0 für die Lösung vorgibt und diese immer wieder (iterativ) in eine Formel steckt, so dass das Ergebnis dieser Iteration sich mehr und mehr der Lösung des Problems annähert. Auch in der Berechnung von Wellenfunktionen (self-consitent-field, SCF), in der Berechnung von Gleichgewichtskonzentrationen von kompetitiven Bindungsvorgängen, in der Rekonstruktion in bildgebenden Verfahren... wendet man diese Lösungsmethode an.

Im Prinzip steck man die Startschätzung x_0 in eine Funktion ϕ und erhält $x_1 = \phi(x_0)$ als verbesserte Näherungslösung. Dann rechnet man $x_2 = \phi(x_1)$, dann $x_3 = \phi(x_2)$ und so weiter, bis man nahe genug an einen Fixpunkt dieser Fixpunktiteration heran kommt. Die Funktion ϕ ist so gebastelt, dass ein Fixpunkt dieser Funktion eine Lösung des Problems darstellt.

Die Frage an die Mathematik lautet also: "Wie konstruiert man solche Fixpunktfunktionen?" Genauer genommen, müssen mehrere Fragen beantwortet werden, um geeignete Fixpunktfunktionen zu finden:

- **Hat die Funktion ϕ überhaupt einen Fixpunkt?**
- **Ist dieser Fixpunkt (auf einer Teilmenge des Definitionsbereichs) eindeutig?**
- **Wird dieser Fixpunkt durch Fixpunktiteration erreicht?**
- **Wie schnell wird dieser Fixpunkt durch Iteration erreicht?**

Zu jeder Frage gibt es (mehrere) geeignete mathematische Werkzeuge, um eine Antwort zu geben.

Hat die Funktion ϕ überhaupt einen Fixpunkt?

Hier gibt es einige mathematische Sätze, die sich schnell prüfen lassen. Ein Beispiel für einen solchen Satz lautet: *Ist ϕ eine stetige reelle Funktion, die alle Punkte aus dem Intervall [a; b] wieder auf das Intervall [a; b] abbildet, dann besitzt sie einen Fixpunkt.* [Der Satz gilt auch für konvexe, kompakte Definitions-/Wertebereiche bei den komplexen Zahlen (Folgerung aus dem Fixpunktsatz von Brouwer).]

$\phi(x) = 1 - x^2$ ist ein Beispiel für eine solche Funktion. Wenn man x zwischen 0 und 1 wählt, so ist auch $\phi(x)$ zwischen 0 und 1. Ein Fixpunkt liegt bei $x = \frac{1}{2}\left(\sqrt{5} - 1\right)$. Erfüllt eine Funktion die Voraussetzungen des Satzes von Brouwer nicht, dann kann sie immer noch einen Fixpunkt haben. Dann kann man das halt nur nicht mit Hilfe dieses Satzes zeigen.

Ist dieser Fixpunkt (auf einer Teilmenge des Definitionsbereichs) eindeutig?

Auch hier gibt es mathematische Sätze, mit denen man prüfen kann, ob ein Fixpunkt eindeutig ist. *Ist die (stetig differenzierbare) Funktion ϕ so konstruiert, dass sie alle Punkte aus einem Intervall $[a; b]$ wieder in dieses Intervall abbildet, so dass weiterhin $\phi(a) > a$ und*

$\phi(b) < b$ und weiterhin $\phi'(x)$ für alle $b > x > a$ nicht 1 ergibt, dann hat sie auf dem Intervall $[a; b]$ einen eindeutigen Fixpunkt.

Nehmen wir als Beispiel wieder die Funktion $\phi(x) = 1 - x^2$ auf dem Intervall $[a; b] = [0; 1]$. Dass dieses Intervall auf sich selber abgebildet wird, hatten wir schon erwähnt. Auch gilt $\phi(0) = 1 > 0$ und $\phi(1) = 0 < 1$. Bleibt nur noch die Bedingung mit der Ableitung zu prüfen. Tatsächlich ist $\phi'(x) = -2x$ nicht 1 für $1 > x > 0$. Damit gelten alle Voraussetzungen des Satzes und damit ist der gegebene Fixpunkt auf dem Intervall $[0; 1]$ tatsächlich eindeutig. Erfüllt eine Funktion die Voraussetzungen des obigen Satzes nicht, dann kann sie immer noch einen eindeutigen Fixpunkt haben. Dann kann man das halt nur nicht mit Hilfe dieses Satzes zeigen.

Wird dieser Fixpunkt durch Fixpunktiteration erreicht?

Hier gibt es in der Mathematik besonders einen Satz (Fixpunktsatz von Banach), der zum (positiven) Beantworten dieser Frage verwendet werden kann: *Bildet die Fixpunktfunktion ϕ das Intervall $[a; b]$ wieder auf $[a; b]$ ab und gilt für eine Zahl $q < 1$ die Kontraktionseigenschaft, dass $|\phi(x) - \phi(y)| \leq q \cdot |x - y|$ für alle Zahlen $x, y \in [a; b]$ im Intervall, dann konvergiert die Fixpunktiteration für jeden Startwert aus dem Intervall gegen den (auf dem Intervall) eindeutigen Fixpunkt von ϕ.* Als Kontraktionszahl q kann man wählen: $q = \max\{|\phi'(x)|;\ x \epsilon [a; b]\}$.

[Der Satz gilt auch für abgeschlossene, zusammenhängende Mengen und komplexe Zahlen.]

Die Bedingungen des Satzes von Banach gelten nicht für die Funktion $\phi(x) = 1 - x^2$. Und tatsächlich: Setzt man als Startwert $x_0 = 1$, dann alterniert die Iteration zwischen den Werten 0 und 1 und konvergiert daher nicht.

Wie schnell wird der Fixpunkt durch Iteration erreicht?

Gelten jedoch die Voraussetzungen des Fixpunktsatzes von Banach für eine Funktion ϕ, dann kann man abschätzen, wie gut die Iteration den Fixpunkt $\tilde{x}$ approximiert:

A-priori Fehlerschätzung:

$$|x_n - \tilde{x}| \leq \frac{q^n}{1 - q} \cdot |x_0 - x_1|$$

A-posteriori Fehlerschätzung:

$$|x_{n+1} - \tilde{x}| \leq \frac{q}{1 - q} \cdot |x_{n+1} - x_n|$$

Diese beiden Formeln können Sie sich merken. Auf der linken Seite steht jeweils die Abweichung der Iterierten von der Lösung und auf der rechten Seite steht eine Abschätzung (nach oben) von diesem Fehler.