Wstęp do metod numerycznych

Rozwiązywanie równań algebraicznych

P. F. Góra

http://th-www.if.uj.edu.pl/zfs/gora/

2010

Co to znaczy rozwiązać równanie?

Przypuśmy, że postawiono przed nami problem rozwiązania równania

$$f(x) = 0\,. \tag{1}$$

Przede wszystkim musimy ustalić co oznacza słowo “rozwiązać”. Można bowiem mieć na myśli dwie rzeczy

I. Znaleźć *wszystkie* rozwiązania (1).

II. Znaleźć *jakieś* rozwiązanie (1).

Pierwszy przypadek zachodzi wtedy, gdy o równaniu możemy dużo powiedzieć od strony analitycznej — na przykład gdy jest to równanie trygonometryczne lub wielomianowe. W przypadku ogólnym na ogół nie wiemy nawet czy jakiekolwiek rozwiązanie (1) istnieje, a jeśli tak, to ile ich jest. Dlatego w przypadku ogólnym zadowalamy się znalezieniem *jakiegoś*, pojedynczego rozwiązania (o ile warunki zadania nie stanowią inaczej).

O funkcji $f(x)$ zakładamy, że jest ciągła i — na ogół — różniczkowalna odpowiednią ilość razy.

Krotność miejsca zerowego

Mówimy, że x_0 jest miejscem zerowym funkcji $f(x)$ o krotności k, jeżeli w tym punkcie zeruje się funkcja wraz ze swoimi pochodnymi do rzędu $k-1$: $f(x_0) = f'(x_0) = f''(x_0) = \cdots = f^{(k-1)}(x_0) = 0$. Na przykład wielomian $P(x) = x^4 - x^3 - x^2 + x$ ma jednokrotne miejsce zerowe w $x = -1$, jednokrotne miejsce zerowe w $x = 0$ i dwukrotne miejsce zerowe w $x = 1$. Natomiast funkcja $f(x) = (x^2 - 1)\sinh^3 x$ ma jednokrotne miejsca zerowe w $x = \pm 1$ i trzykrotne miejsce zerowe w $x = 0$.

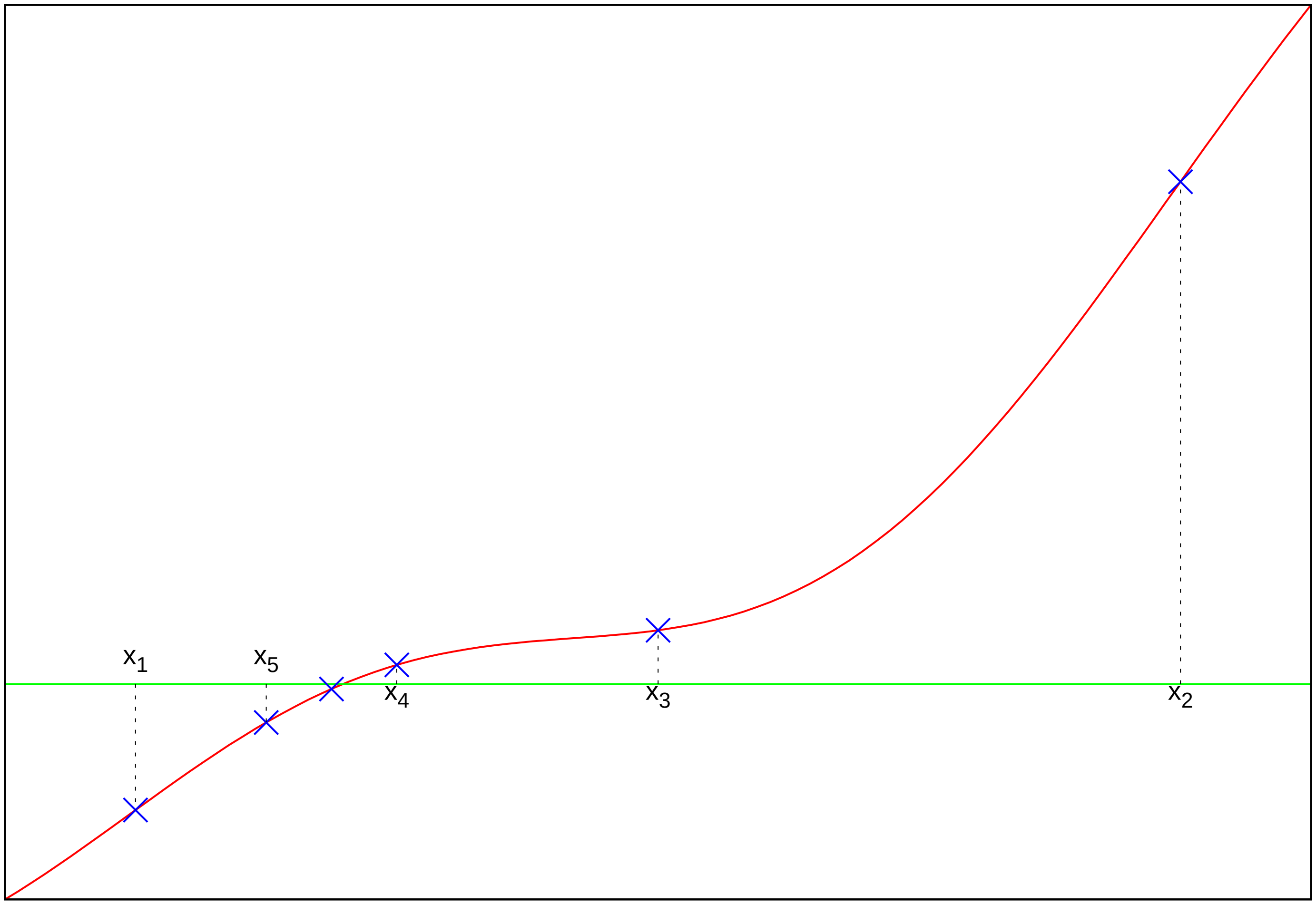
Funkcja zmienia znak w otoczeniu miejsca zerowego o krotności nieparzystej i *nie zmienia znaku* w otoczeniu miejsca zerowego o krotności parzystej.

Metoda bisekcji

Jeżeli funkcja $f(x)$ jest ciągła i jeżeli znajdziemy dwa punkty, w których znak funkcji jest przeciwny, $f(x_1) \cdot f(x_2) < 0$, jako przybliżenie miejsca zerowego bierzemy środkowy punkt przedziału $[x_1, x_2]$, $x_3 = (x_1+x_2)/2$. Ustalamy, w którym z przedziałów $[x_1, x_3]$, $[x_3, x_2]$ funkcja zmienia znak, po czym powtarzamy całą procedurę dla tego przedziału. Procedurę kończymy, gdy znajdziemy x_n takie, że $|f(x_n)| \leqslant \varepsilon$, gdzie ε jest zadaną dokładnością poszukiwania rozwiązania równania (1).

Zbieżność metody bisekcji jest liniowa, to znaczy, że na ustalenie każdego kolejnego miejsca dziesiętnego w rozwinięciu miejsca zerowego potrzeba takiej samej liczby iteracji.

Metoda bisekcji działa dla miejsc zerowych o nieparzystej krotności i nie działa dla miejsc zerowych o krotności parzystej.



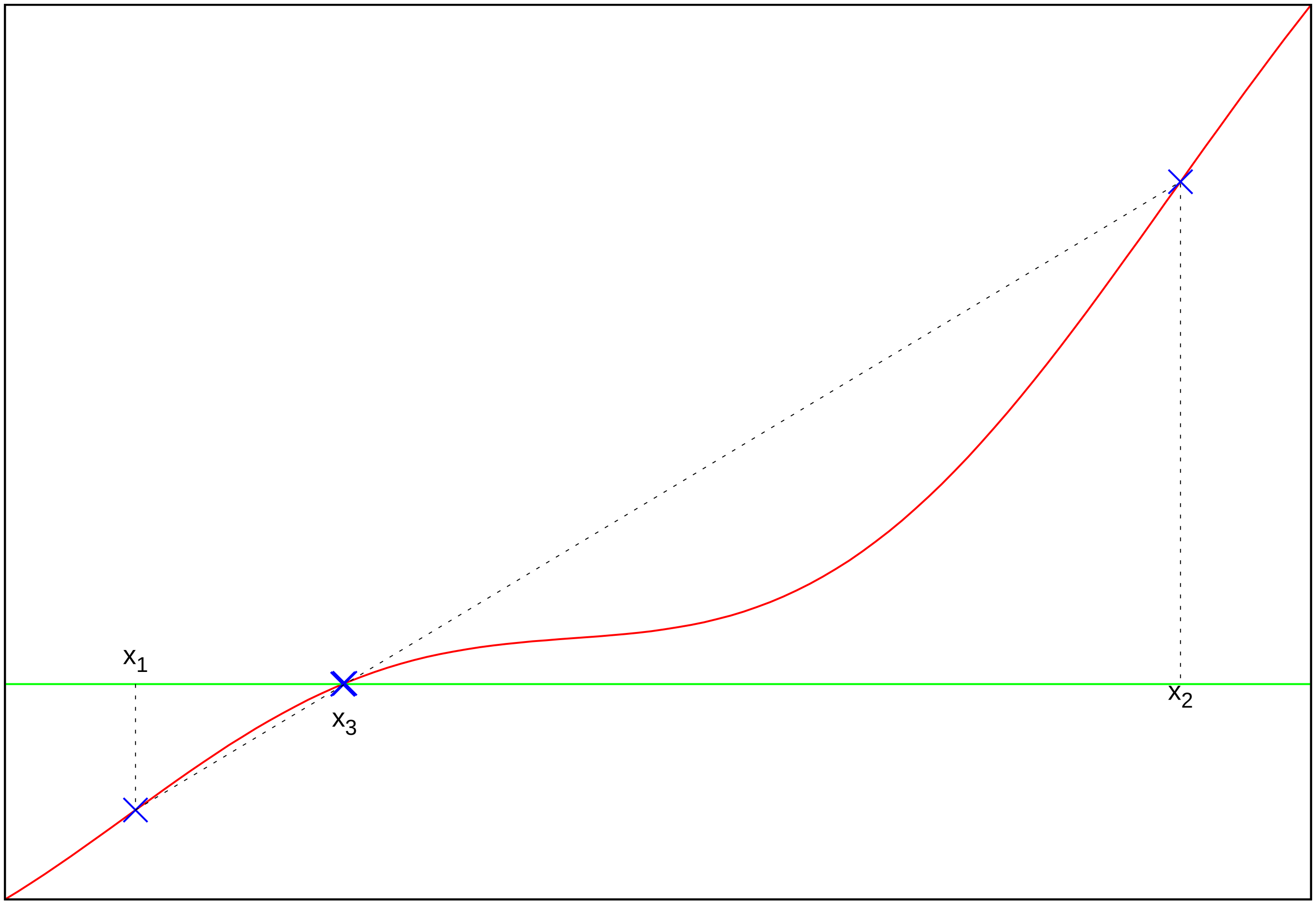
x1
x5
x4
x3
x2

Metoda *regula falsi*

Metoda *regula falsi*, czyli "metoda fałszywego położenia", jest jedną z najczęściej stosowanych metod poszukiwania rozwiązań równania (1). Punkt wyjścia jest podobny do metody bisekcji: Jeżeli funkcja $f(x)$ jest ciągła i jeżeli znajdziemy dwa punkty, w których znak funkcji jest przeciwny, $f(x_1) \cdot f(x_2) < 0$, jako przybliżenie miejsca zerowego bierzemy punkt przecięcia siecznej przechodzącej przez punkty $(x_1, f(x_1))$, $(x_2, f(x_2))$ z osią OX:

$$x_3 = \frac{f(x_1)x_2 - f(x_2)x_1}{f(x_1) - f(x_2)} \,. \tag{2}$$

Jeżeli $|f(x_3)| \leqslant \varepsilon$ (ε jak poprzednio), kończymy procedurę. Jeżeli nie, wybieramy ten z przedziałów $[x_1, x_3]$, $[x_3, x_2]$, w którym funkcja zmienia znak i postępujemy analogicznie.



x1
x3
x2

Metoda siecznych

Metoda siecznych jest nagminnie mylona z metodą *regula falsi*. Punktem wyjścia są dowolne dwa punkty, dla których $f(x_1) \neq f(x_2)$. Prowadzimy sieczną przez te punkty (bez względu na znak $f(x_1) \cdot f(x_2)$), i jako x_3 bierzemy miejsce zerowe tej siecznej, dane *także* wzorem (2). W kolejnych krokach bierzemy zawsze dwa ostatnie punkty, bez względu na to, czy funkcja zmienia znak.

Metoda siecznych i metoda *regula falsi* to są inne metody! Metoda siecznych może być zbieżna *szybciej* niż metoda *regula falsi*, ale — w odróżnieniu od *regula falsi* i metody bisekcji — w niektórych przypadkach zawodzi (nie jest zbieżna do miejsca zerowego).

Porównanie

Dla funkcji $f(x) = \frac{1}{8}x^4 + x^3 - x + \frac{1}{8}\sin(16x)$ z punktami startowymi $x_1 = 0.8$, $x_2 = 1.2$, metody zbiegały się do $|f(0.879312)| \leqslant 10^{-6}$, przy czym liczba kroków wyniosła odpowiednio

metoda	kroków
bisekcji	17
regula falsi	8
siecznych	4

Interpolacja odwrotna

Przypuśćmy, że mamy stabelaryzowane wartości funkcji w węzłach:

x_i	x_1	x_2	x_3	$\dots$	x_n
$f_i = f(x_i)$	f_1	f_2	f_3	$\dots$	f_n

(3)

przy czym — ważne! — stabelaryzowane wartości są ściśle monotoniczne, $f_1 > f_2 > \cdots > f_n$ (lub $f_1 < f_2 < \cdots < f_n$). Skoro funkcja jest monotoniczna, jest odwracalna, przy czym “węzły” i “wartości” zamieniają się miejscami:

f_i	f_1	f_2	f_3	$\dots$	f_n
$x_i = f^{-1}(f_i)$	x_1	x_2	x_3	$\dots$	x_n

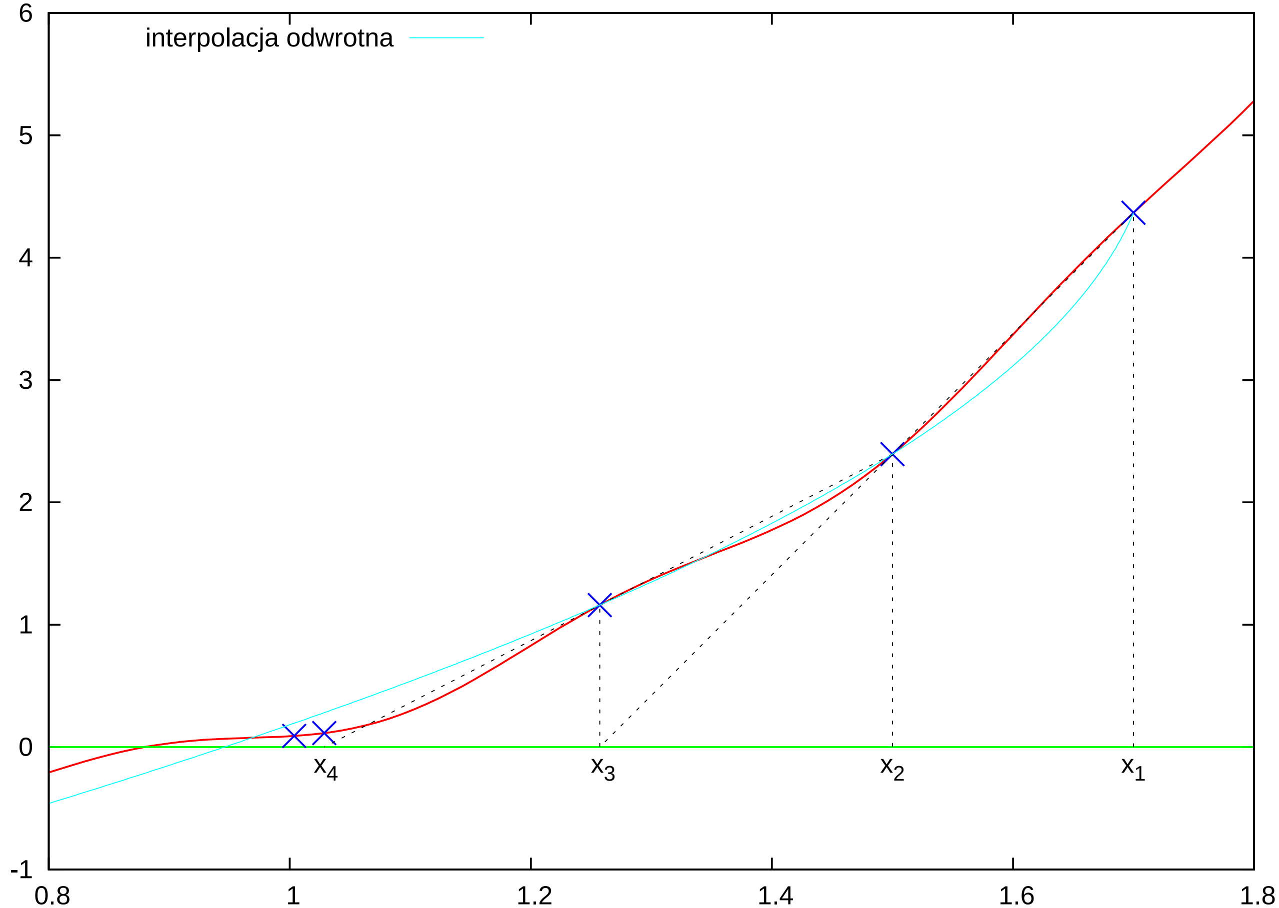
(4)

Wartość funkcji odwrotnej w zerze oznacza punkt, w którym funkcja ma miejsce zerowe! Aby znaleźć przybliżone miejsce zerowe funkcji $f(x)$, tworzymy wielomian interpolacyjny według tabeli (4) i obliczamy wartość tego wielomianu, czyli przbliżenia funkcji odwrotnej, w zerze.

Ze względów praktycznych interpolację odwrotną stosuje się dla niewielkiej liczby węzłów. Wynik interpolacji odwrotnej może służyć jako punkt startowy innych, bardziej dokładnych metod.

Jeżeli prowadzimy interpolację odwrotną opartą o dwa punkty, jest to równoważne jednemu krokowi metody siecznych.

Metoda siecznych i interpolacja odwrotna



Metoda Newtona

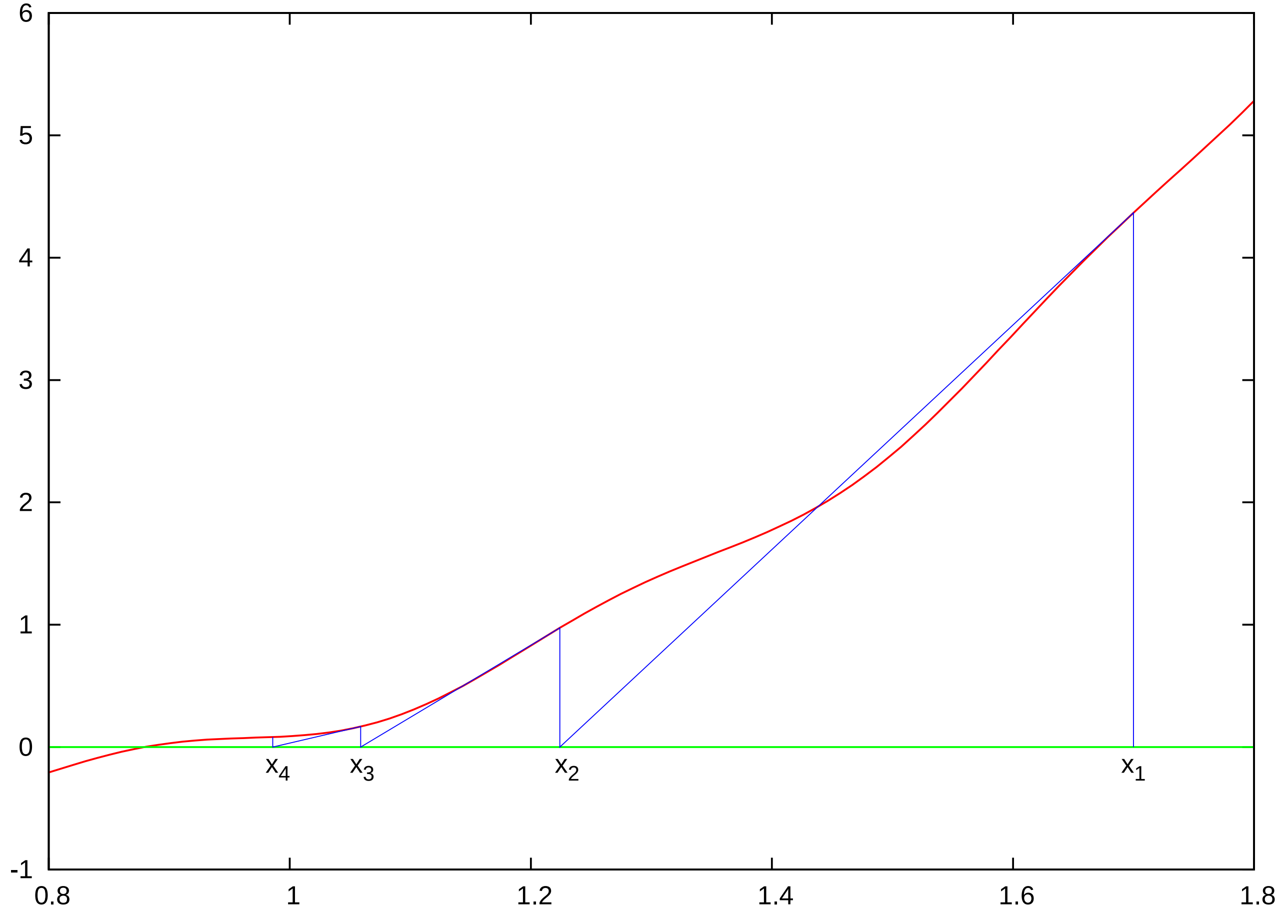
Przypuśćmy, że prawa strona rownania (1) jest różniczkowalna. Rozwijamy tę funkcję w szereg Taylora wokół pewnego punktu

$$f(x_0 + \delta) \simeq f(x_0) + \delta \cdot f'(x_0) \tag{5}$$

a następnie żądamy, aby lewa strona rozwinięcia (5) znikała. Jak duży krok δ powinniśmy wykonać? $\delta = -f(x_0)/f'(x_0)$. Przyjmujemy, że przesuwamy się do punktu $x_1 = x_0 + \delta$ i powtarzamy całą procedurę. Przesuwamy się do kolejnego punktu — i tak dalej. Prowadzi to do iteracji

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)} . \tag{6}$$

Interpretacja geometryczna metody Newtona — metoda stycznych



Kryterium zbieżności

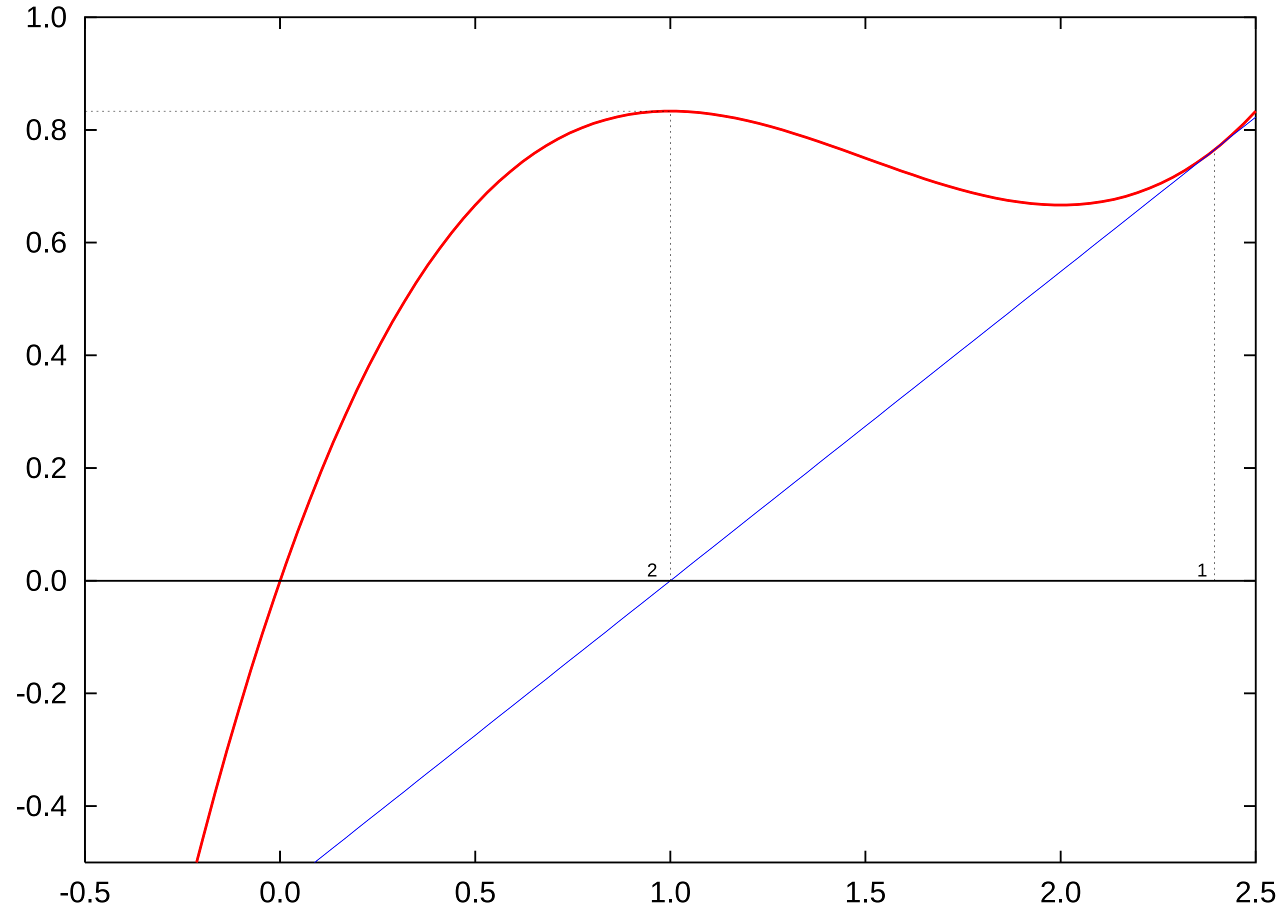
Zauważmy, że punkt stały iteracji (6) jest rozwiązaniem równania $f(x) = 0$. Formalnie, jeżeli funkcja

$$g(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)} \tag{7}$$

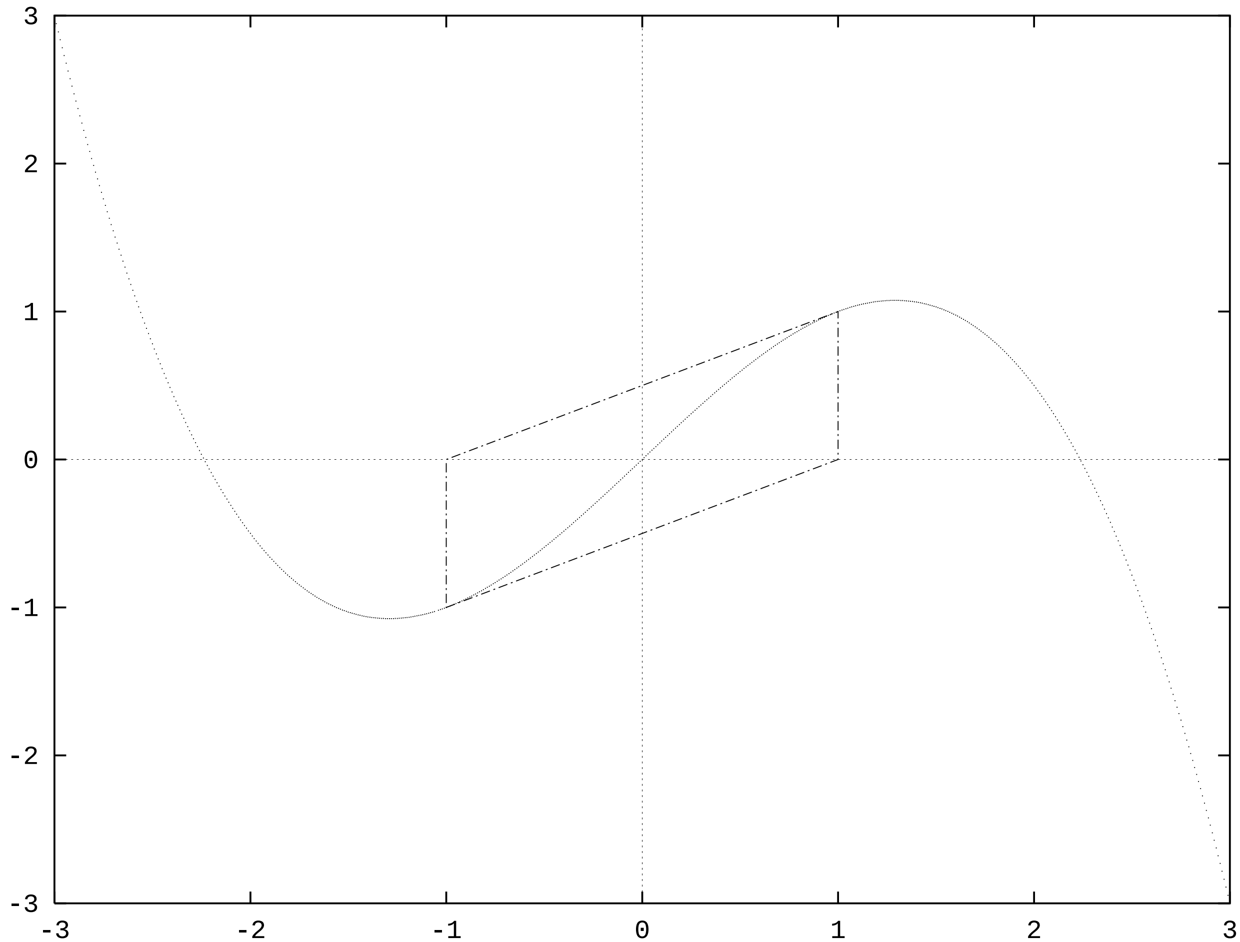
(i) jest ciągła oraz (ii) przeprowadza pewien przedział domknięty $[a, b]$ w ten sam przedział domknięty $[a, b]$, to na mocy twierdzenia Brouwera iteracja (6) ma w tym przedziale punkt stały, będący rozwiązaniem równania (1).

Problem leży w spełnieniu warunku (ii)

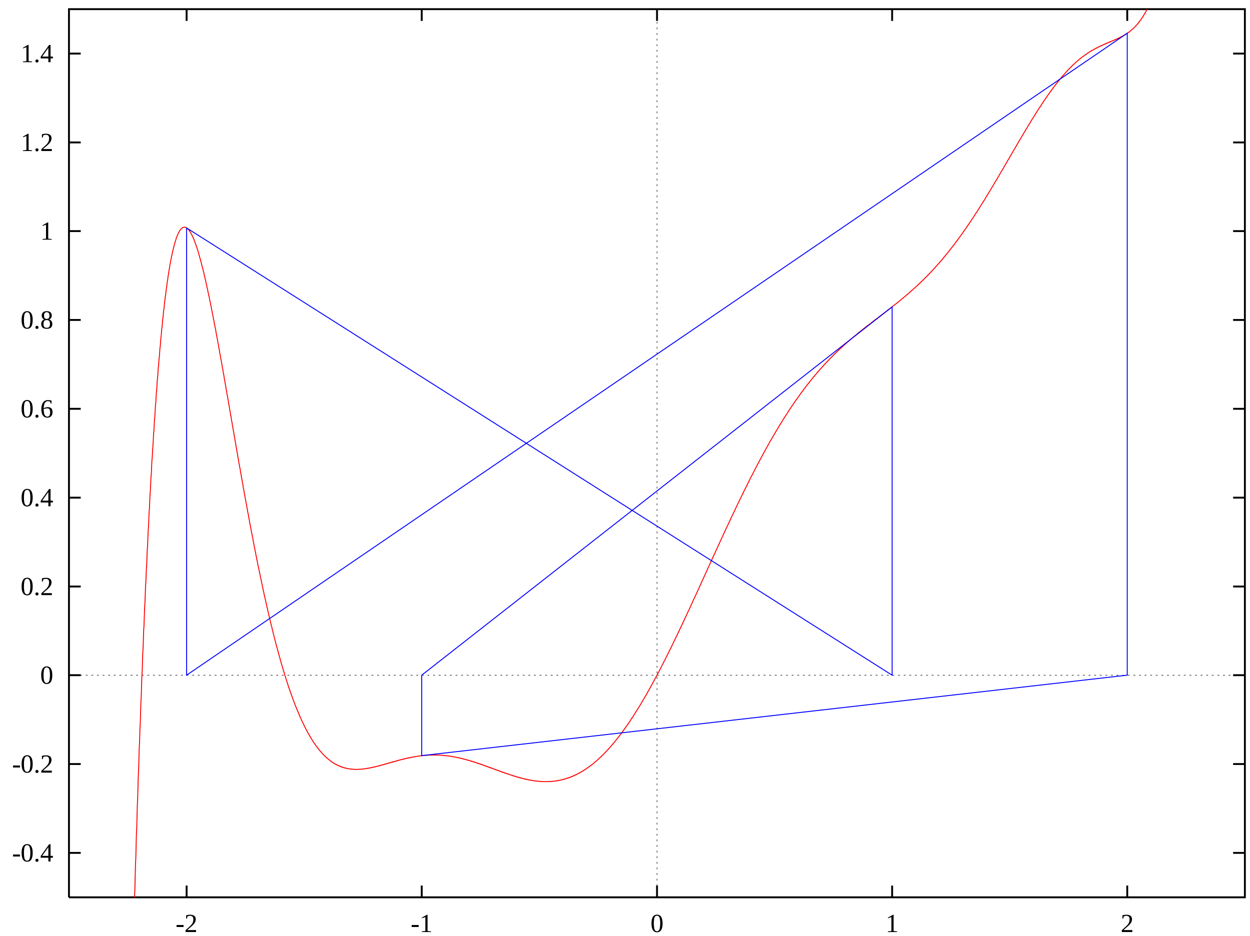
Metoda Newtona może być rozbieżna!



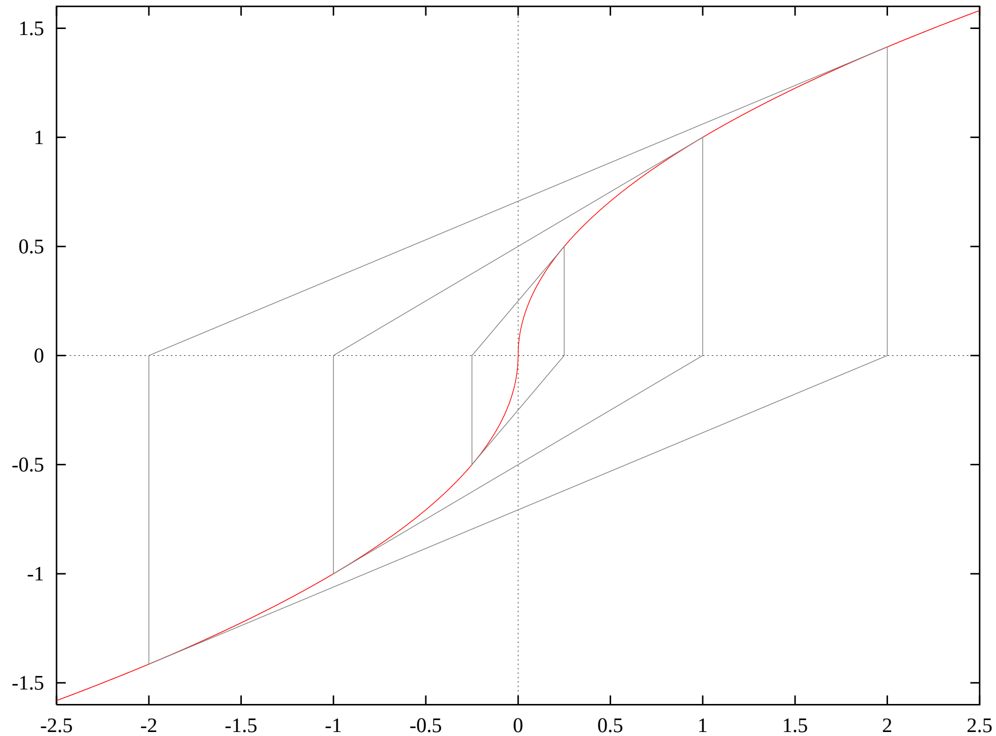
Metoda Newtona może prowadzić do cykli



Przykład czterocyklu



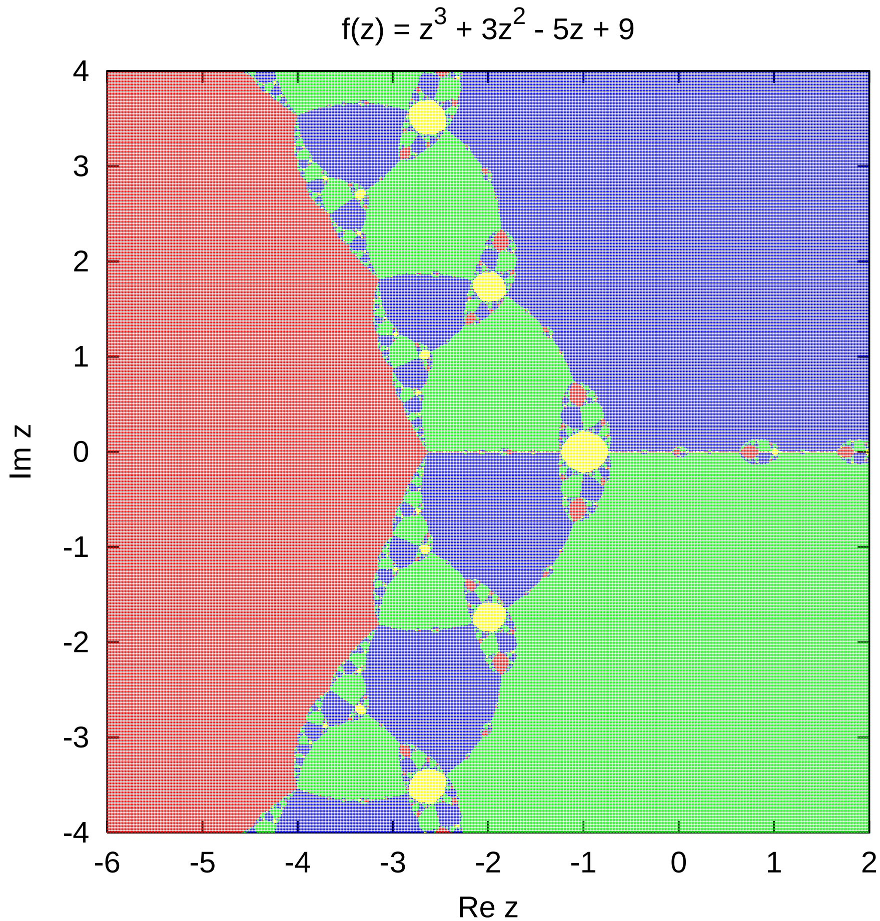
Inny przykład cyklu



Metoda Newtona zastosowana do funkcji $f(x) = \begin{cases} \sqrt{x} & x \geqslant 0 \\ -\sqrt{-x} & x < 0 \end{cases}$.

- Metoda Newtona jest zbieżna *kwadratowo* do jednokrotnych miejsc zerowych (liczba iteracji potrzebnych do ustalenia każdego kolejnego miejsca dziesiętnego zmniejsza się o połowę).
- Metoda Newtona jest tym szybciej zbieżna, im bliżej poszukiwanego miejsca zerowego leży początkowe przybliżenie. Jeżeli początkowe przybliżenie jest "niedobre", metoda Newtona może zawieść.
- Metoda Newtona jest zbieżna liniowo do wielokrotnych miejsc zerowych.
- Metodę Newtona można łatwo uogólnić na przypadek zespolony, aczkolwiek iteracja (6) zastartowana z rzeczywistego punktu początkowego dla rzeczywistej funkcji $f(x)$ pozostaje rzeczywista.
- Granice basenów atrakcji poszczególnych miejsc zerowych w metodzie Newtona na płaszczyźnie zespolonej bardzo często są *fraktalne*.

Wielomian ze stabilnym dwucyklem



Tłumiona metoda Newtona

W pewnych przypadkach — na przykład aby uciec ze stabilnego wielocyklu — zamiast metody Newtona (6) stosuje się *tłumioną metodę Newtona* (ang. *damped Newton method*)

$$x_{n_1} = x_n - \alpha \frac{f(x_n)}{f'(x_n)} \tag{8}$$

gdzie $\alpha \in (0, 1]$. Aby uciec z wielocyklu, na 2-3 kroki metodę Newtona zastępuje się metodą tłumioną.

Metody wykorzystujące drugą pochodną

Metoda Newtona opiera się na rozwinięciu Taylora (5) do pierwszego rzędu. Możemy to uogólnić na rozwinięcie do rzędu drugiego:

$$f(x_0+\delta) \simeq f(x_0) + \delta \cdot f'(x_0) + \frac{1}{2}\delta^2 \cdot f''(x_0)\,. \tag{9}$$

Jak poprzednio, żądamy, aby lewa strona znikała, co prowadzi do kroku

$$\delta = \frac{-f'(x_0) \pm \sqrt{\left[f'(x_0)\right]^2 - 2f(x_0)f''(x_0)}}{f''(x_0)}\,, \tag{10}$$

a dalej, po prostych przekształceniach, do iteracji

$$x_{n+1} = x_n - \frac{2f(x_n)}{f'(x_n) \pm \sqrt{\left[f'(x_n)\right]^2 - 2f(x_n)f''(x_n)}}\,. \tag{11}$$

Znak w mianowniku (11) wbieramy tak, aby moduł mianownika był większy. W odróżnieniu od metody Newtona, metoda (11) może prowadzić do zespolonych iteratów także dla rzeczywistych wartości początkowych.

Metoda Halleya

Inną metodę daje zastosowanie metody Newtona do równania

$$g(x) = \frac{f(x)}{\sqrt{|f'(x)|}} = 0\,. \tag{12}$$

Każdy pierwiastek $f(x)$, który *nie* jest miejscem zerowym pochodnej, jest pierwiastkiem $g(x)$; każdy pierwiastek $g(x)$ jest pierwiastkiem $f(x)$ (rozwiązaniem równania (1)). Po przekształceniach algebraicznych otrzymujemy iterację

$$x_{n+1} = x_n - \frac{2f(x_n)f''(x_n)}{2\left[f'(x_n)\right]^2 - f(x_n)f''(x_n)} \tag{13a}$$

lub w postaci alternatywnej

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}\left[1 - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}\cdot\frac{f''(x_n)}{2f'(x_n)}\right]^{-1}\,. \tag{13b}$$

