Численное решение уравнений. Метод бисекции, метод простых итераций, метод Ньютона

Чеховской Игорь Сергеевич

Приближенное решение уравнений

Конечное уравнение: $f(x) = 0$, $f(x)$ – некоторая функция (алгебраическая, тригонометрическая или их комбинация).
Не всякое конечное уравнение может быть решено точно:

- трансцендентные уравнения:

$$tg(x) = x$$

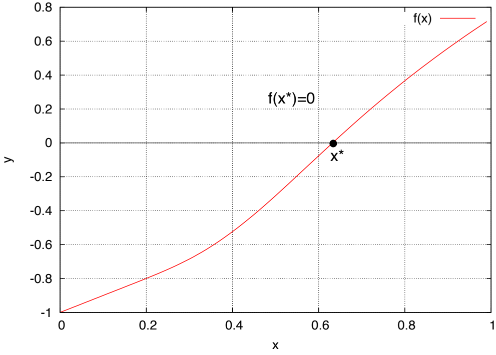
- алгебраические уравнения выше четвертой степени

Но задача может считаться решенной, если можно найти корень уравнения с необходимой точностью или найти отрезок $[a, b]$, в котором лежит уточняемый корень уравнения.

Нахождение примерных значений корня уравнений

Пример. Найти примерное значение корня уравнения:

$$f(x) = \frac{12}{e^{2/x} + 9} + x - 1 = 0$$



Примерное значение корня $x \approx 0.65$. Отрезок, в котором лежит корень $[0.6, 0.7]$.

Интервал изоляции корня

Теорема (Больцано-Коши о промежуточном значении)

Пусть функция f непрерывна на отрезке $[a, b]$, причем $f(a) \neq f(b)$. Тогда для любого числа C, заключенного между $f(a)$ и $f(b)$ найдется такая точка $\gamma \in (a, b)$, что $f(\gamma) = C$.

Следствие: Если функция f непрерывна на некотором отрезке $[a, b]$ и на концах этого отрезка принимает значения противоположных знаков $f(a) \cdot f(b) < 0$, то существует такая точка $\gamma \in (a, b)$ в которой $f(\gamma) = 0$.

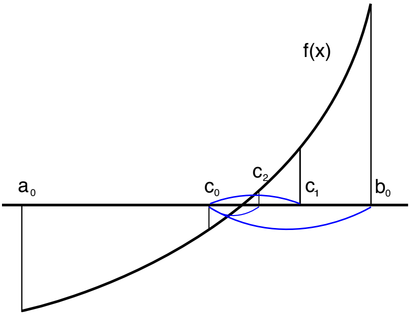
Если отрезок $[a, b]$ настолько мал, что в нем лежит в точности один корень, то он является **интервалом изоляции корня**.

Интервал изоляции корня

Достаточное условие того, что существует единственный корень уравнения $f(x) = 0$ на отрезке $[a, b]$:

1. Функция $f(x)$ непрерывна на отрезке $[a, b]$
2. Значения функции $f(x)$ на концах отрезка $[a, b]$ имеют разные знаки: $f(a) \cdot f(b) < 0$
3. Первая производная $f'(x)$ сохраняет определенный знак на всем отрезке, т.е. $f(x)$ – монотонная.

Метод деления отрезка пополам (метод бисекции, метод дихотомии)



1. Интервал изоляции корня $[a_0, b_0]$. Середина отрезка $c_0 = \frac{a_0+b_0}{2}$. Т.к. $f(c_0) \cdot f(b_0) < 0$, то $a_1 = c_0$, $b_1 = b_0$.
2. Интервал изоляции корня $[a_1, b_1]$. Середина отрезка $c_1 = \frac{a_1+b_1}{2}$. Т.к. $f(c_1) \cdot f(a_1) < 0$, то $a_2 = a_1$, $b_2 = c_1$.
3. Интервал изоляции корня $[a_2, b_2]$. Середина отрезка $c_2 = \frac{a_2+b_2}{2}$. Т.к. $f(c_2) \cdot f(a_2) < 0$, то $a_3 = a_2$, $b_3 = c_2$.
4. ...

Если требуется найти корень с точностью δ, деление продолжается пока длина отрезка $> 2\delta$. Проверка $|f(x)| < \text{const}$?

Метод деления отрезка пополам

Метод является частным случаем бинарного (двоичного) поиска.
Максимальная погрешность на каждом шаге: $\frac{1}{2}(b_n - a_n)$.
Если δ_0 – точность начального приближения, δ – требуемая точность, то необходимое число шагов

$$N \approx \log_2(\delta_0/\delta).$$

Если порядок корня определен (т.е. порядки a_n и b_n равны), то на каждом шаге метод уточняет очередной бит мантиссы.
Замечание. Для увеличения эффективности реализации метода на каждом шаге необходимо вычислять $f(x)$ один раз, а ранее найденные значения $f(a_n)$ и $f(b_n)$ сохранять в памяти.

Преимущества и недостатки метода бисекции

Преимущества:

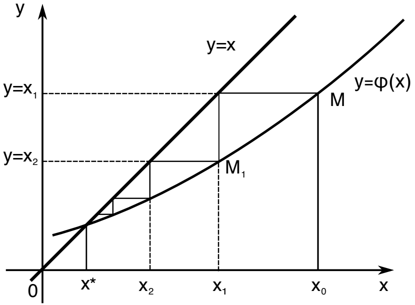
- Метод прост и надежен: к простому корню сходится для любых непрерывных функций $f(x)$, в том числе недифференцируемых
- Точность метода гарантируется

Недостатки:

- Низкая скорость сходимости – за одну итерацию точность увеличивается примерно вдвое
- Если на отрезке несколько корней, то неизвестно, к какому корню сойдется процесс
- Метод неприменим для нахождения корней четной кратности
- Для корней нечетной высокой кратности метод сходится, но менее точен и хуже устойчив к ошибкам округления возникающих при вычислениях $f(x)$
- Метод не обобщается на функции нескольких переменных

Метод простых итераций (метод последовательных приближений)

$$f(x) = 0 \qquad \longrightarrow \qquad \varphi(x) = x$$



Интервал изоляции корня $[a, b]$.
$x_0 \in [a, b]$ - начальное (нулевое) приближение.

$$x_1 = \varphi(x_0)$$
$$x_2 = \varphi(x_1)$$
$$x_3 = \varphi(x_2)$$
$$\dots$$
$$x_n = \varphi(x_{n-1})$$

Если последовательность $x_1, x_2, \dots, x_n \dots,$ имеет предел $\lim_{n\to\infty} x_n = x^*$, то x^* является корнем уравнения:

$$x^* = \lim_{n\to\infty} x_n = \lim_{n\to\infty} \varphi(x_{n-1}) = \varphi(\lim_{n\to\infty} x_{n-1}) = \varphi(x^*)$$

Сходимость метода простых итераций

Сжимающее отображение – отображение метрического пространства $(\mathbb{M}, \rho)$ в себя, уменьшающее расстояние между любыми двумя точками не менее чем в $\alpha > 1$ раз:

$$\forall x, y \in \mathbb{M}: \; \alpha \cdot \rho(Tx, Ty) \leqslant \rho(x, y).$$

Теорема

(Банаха о неподвижной точке) Сжимающее отображение T на полном метрическом пространстве имеет, и при том единственную, неподвижную точку: $Tx^* = x^*$.

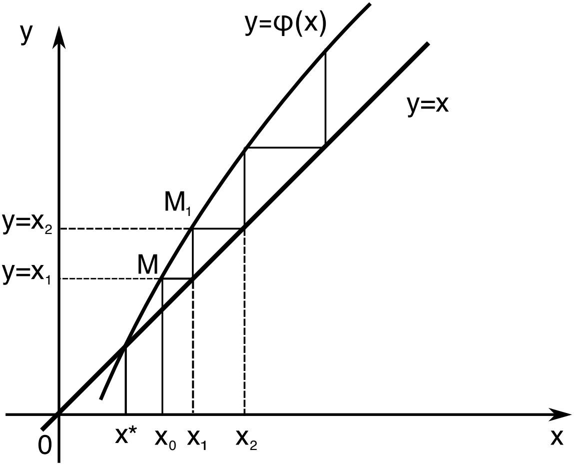
Теорема

Пусть отрезок $[a, b]$ является интервалом изоляции корня уравнения $x = \varphi(x)$ и во всех точках этого интервала производная $\varphi'(x)$ удовлетворяет неравенству

$$|\varphi'(x)| \leq q < 1.$$

Если при этом выполняется условие $a \leq \varphi(x) \leq b$, то итерационный процесс сходится, причем за нулевое приближение x_0 можно брать любую точку отрезка $[a, b]$.

Пример расходящегося итерационного процесса



Модификации метода простых итераций

- Использование обратной функции $\varphi^{-1}(x)$ при $|\varphi'(x)| \geq q > 1$.
- Использование корректирующего множителя: $\varphi(x) = x - \lambda f(x)$, $\lambda \neq 0$.

$$x_{n+1} = x_n - \lambda f(x_n)$$

Достаточное условие сходимости:

$$\forall x: \ |\varphi'(x)| = |1 - \lambda f'(x)| \leq q < 1$$

Тогда

$$\forall x: \ 0 < 1 - q \leq \lambda f'(x) \leq 1 + q < 2$$

- $\lambda f'(x) > 0$,
- $|k| = \frac{1}{|\lambda|} > \frac{\max\limits_x |f'(x)|}{2}$.

Скорость (порядок) сходимости

Погрешность:

$$R_n = x_* - x_n,$$

$$R_{n+1} = x_* - x_{n+1}.$$

Тогда

$$R_{n+1} \approx (1 - \lambda f'(x_*))R_n = qR_n^1, \quad q \approx \frac{x_n - x_{n-1}}{x_{n-1} - x_{n-2}}.$$

Порядок сходимости **первый** (погрешность уменьшается в геометрической прогрессии).
Если δ_0 – точность начального приближения, δ – требуемая точность, то необходимое число шагов

$$N \approx \frac{\log(\delta_0/\delta)}{-\log|\varphi'|},$$

т.е. при $|\varphi'(x_*)| < 0.5$ сходится быстрее метода деления отрезка пополам.

Преимущества и недостатки метода простых итераций

Преимущества:

- Не накапливаются ошибки вычислений
- Метод может быть обобщен на многомерный случай

Недостатки:

- Для сходимости метода необходимо выполнение условия $|\varphi'(x)| < 1$ как минимум вблизи корня.

Метод Ньютона (метод касательных)

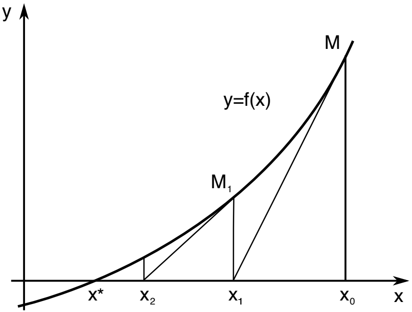
Ищем решение уравнения $f(x) = 0$. Если x_n - некоторое приближение к корню x^*, а $f(x)$ имеет непрерывную производную, то:

$$0 = f(x^*) = f(x_n + (x^* - x_n)) = f(x_n) + (x^* - x_n)f'(\xi)$$

имеем следующий итерационный процесс:

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

Геометрический смысл:



Уравнение касательной в точке x_0:

$$y = f(x_0) + (x - x_0)f'(x_0)$$

В качестве приближенного корня уравнения $f(x) = 0$ выбирается абсцисса точки пересечения касательной с осью $0x$:

$$x_1 = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)}$$

Условие и скорость сходимости метода Ньютона

Частный случай метода простых итераций с $\varphi(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)}$.
Если начальное приближение выбрано близко к корню, то итерации сходятся. При произвольном начальном приближении метод сходится при выполнении условия:

$$|f(x)f''(x)| < (f'(x))^2$$

Итерации сходятся к корню с той стороны, с которой $f(x)f''(x) > 0$.
Для кратного корня скорость геометрической прогрессии.
Для простого корня (т.к. $x^* - x_n = \varphi(x^*) - \varphi(x_{n-1})$ и $\varphi'(x^*) = 0$):

$$x_n - x^* = \frac{1}{2}(x_{n-1} - x^*)^2 \varphi''(\xi), \qquad \xi \in (x_{n-1}, x^*)$$

Погрешность очередного приближения $\approx$ квадрату погрешности предыдущего.

Преимущества и недостатки метода Ньютона

Преимущества:

- Быстрая сходимость метода (особенно для простых корней)
- Метод может быть обобщен на многомерный случай

Недостатки:

- Необходимо знать начальное приближение для корня.
- Необходимо знать первую производную $f'(x)$. (Устраняется применением метода секущих)

Метод Ньютона для систем уравнений

Необходимо найти решение нелинейной системы уравнений $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = 0$ или

$$f_k(x_1, x_2, \ldots, x_n) = 0 \qquad 1 \leq k \leq n$$

Если известно некоторое приближение $\mathbf{x^{(n)}}$ к корню $\mathbf{x}^*$, то вводя приращение $\mathbf{\Delta x} = \mathbf{x}^* - \mathbf{x^{(n)}}$

$$\mathbf{f}(\mathbf{x^{(n)}} + \mathbf{\Delta x}) = 0 \approx \mathbf{f}(\mathbf{x^{(n)}}) + \mathbf{J^{(n)}} \mathbf{\Delta x} \Rightarrow \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial f_k(\mathbf{x^{(n)}})}{\partial x_i} \Delta x_i^{(n)} = -f_k((\mathbf{x^{(n)}}))$$

$1 \leq k \leq n$, т.е. система линейных уравнений на $\mathbf{\Delta x^{(n)}} = \mathbf{x^{(n+1)}} - \mathbf{x^{(n)}}$.

$$x_i^{(n+1)} = x_i^{(n)} - \left[\left(J^{(n)} \right)^{-1} \right]_{ij} f_j(x^{(n)})$$

В малой окрестности корня итерации сходятся, если $detJ = det \left[\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{x}} \right] \neq 0$, *причем сходимость квадратичная.*

Пример решения системы двух уравнений

$$\begin{cases} f(x,y)=0 \\ \varphi(x,y)=0 \end{cases}$$

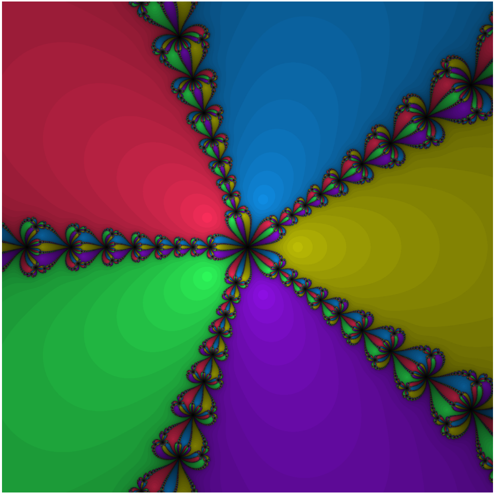
Пусть x_0, y_0 - начальные приближения, поправки h и k: $x^* = x_0 + h$, $y^* = y_0 + k$.
Разлагая в ряд Тейлора, имеем систему линейных уравнений на поправки $h_1 = x_1 - x_0$ и $k_1 = y_1 - y_0$:

$$\begin{cases} f(x_0,y_0) + h_1\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_0 + k_1\left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)_0 = 0 \\ \varphi(x_0,y_0) + h_1\left(\frac{\partial \varphi}{\partial x}\right)_0 + k_1\left(\frac{\partial \varphi}{\partial y}\right)_0 = 0 \end{cases}$$

Поправка на n-ом шаге:

$$\begin{cases} h_{n+1} = x_{n+1} - x_n = \frac{f_y'^{(n)}\varphi^{(n)} - \varphi_y'^{(n)} f^{(n)}}{f_x'^{(n)}\varphi_y'^{(n)} - f_y'^{(n)}\varphi_x'^{(n)}} \\ k_{n+1} = y_{n+1} - y_n = \frac{\varphi_x'^{(n)} f^{(n)} - f_x'^{(n)}\varphi^{(n)}}{f_x'^{(n)}\varphi_y'^{(n)} - f_y'^{(n)}\varphi_x'^{(n)}} \end{cases}$$

Бассейны Ньютона



$$p(z) = z^5 - 1$$

Метод секущих

В общей формуле итерационного процесса $x_{n+1} = x_n - \lambda f(x_n)$ вместо $\lambda = \frac{1}{f'}$ выберем

$$\lambda = \frac{x_n - x_{n-1}}{f(x_n) - f(x_{n-1})} \simeq \frac{1}{f'(x_n)}$$

т. е. возьмем обратное значение конечной разности.
Исследуем сходимость итерационного процесса вблизи корня. Для этого в формуле
$x_{n+1} = x_n - \frac{(x_n - x_{n-1}) \cdot f(x_n)}{f(x_n) - f(x_{n-1})}$
разложим все $f(x_k)$ в ряд в т. x_*:
$x_{n+1} = \frac{x_n - (z_n - z_{n-1}) \cdot \left[f'(x_*) \cdot z_n + \frac{1}{2} f''(x_*) \cdot z_n^2\right]}{f' z_n + f'' \frac{z_n^2}{2} - f' z_{n-1} - f'' \frac{z_{n-1}^2}{2}}$
где $z_n \equiv x_n - x_* = -R_n$
$z_{n+1} = z_n - \frac{(z_n - z_{n-1}) \cdot f' \cdot z_n \cdot \left[1 + \frac{f''}{2f'} z_n\right]}{(z_n - z_{n-1}) \cdot \left[f' + \frac{1}{2} f'' \cdot (z_n + z_{n-1})\right]} = z_n - z_n \cdot \frac{1 + a z_n}{1 + a(z_n + z_{n-1})}, \quad a \equiv \frac{f''(x_*)}{2f'(x_*)}$
$z_{n+1} \simeq z_n - z_n \cdot (1 + a z_n)(1 - a(z_n + z_{n-1})) \simeq$
$z_n - z_n (1 + a z_n - a(z_n + z_{n-1})) = a z_n z_{n-1}$

Метод секущих

Итого, получим

$z_{n+1} = a z_n z_{n-1}, \quad a \equiv \frac{f''(x_0)}{2f'(x_*)}, \quad z_n \equiv x_n - x_*$

Для простых итераций имеем $z_{n+1} = q \cdot z_n^1$, для метода Ньютона $z_{n+1} = \gamma z_n^2$.

Попробуем найти аналогичную (степенную) зависимость между $x_{n+1} - x_*$ и $x_n - x_*$ для метода секущих в виде $z_{n+1} = a^\alpha z_n^\beta$:

$$a^\alpha z_n^\beta = a z_n z_{n-1} \Rightarrow a^{\alpha-1} z_n^{\beta-1} = z_{n-1} \Rightarrow a^{\alpha-1}\left(a^\alpha z_{n-1}^\beta\right)^{\beta-1} = z_{n-1} \quad \Rightarrow$$

$$a^{\alpha-1+\alpha(\beta-1)} z_{n-1}^{\beta^2-\beta-1} = 1 \quad \Rightarrow \quad \begin{cases} \alpha\beta - 1 = 0 \\ \beta^2 - \beta - 1 = 0 \end{cases} \Rightarrow \quad \beta_\pm = \frac{1}{2} \pm \frac{\sqrt{5}}{2}$$

$\beta_- < 0$ – соответствует расходящемуся итерационному процессу, поэтому берем $\beta = \frac{1}{2} + \frac{\sqrt{5}}{2} \approx 1.618$.

Итерации в методе секущих сходятся быстрее, чем простые итерации при $\lambda = const$, но медленнее (по числу шагов), чем метод Ньютона.

Метод секущих

Заметим, однако, что в методе Ньютоне на каждом шаге требуется вычисление $f(x_n)$ и $f^{'}(x_n)$. Полагая время их вычисления приблизительно одинаковым и при том существенным по сравнению с временем выполнения одной арифм. операции, получим, что на каждую пару таких вычислений приходится один шаг м. Ньютона и увеличение точности $z_{n+1} = \gamma z_n^2$.
За то же время можно выполнить две итерации м. секущих, получив $z_{n+2} = a^\alpha z_{n+1}^\beta = a^\alpha (a^\alpha z_n^\beta)^\beta = a^{\alpha+\alpha\beta} z_n^{\beta^2}$, $\beta^2 \approx 2.618$. Т. е. м. секущих может сходиться быстрее, чем м. Ньютона!

Условие остановки итераций
Формула м. секущих включает в себя разделенную разность, погрешность вычисления которой м. б. велика при малых $|x_n - x_{n-1}|$.
Метод Гарвика:

- выбираем δ и выполняем итерации, пока $|x_{n+1} - x_n| > \delta$ (до попадания в окрестность корня, где хорошо работает разложение в ряд Тейлора)
- продолжаем выполнять итерации, пока $|x_{n+1} - x_n|$ убывает. Рост свидетельствует о начале "разболтки"

Ссылки

Калиткин Н. Н.: Численные методы

Смирнов С. В.: ОСНОВЫ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ ФИЗИКИ, Часть I
http://www.phys.nsu.ru/smirnov/ovf1.pdf

Методы Мюллера, Стеффенсена:
https://arxiv.org/pdf/1708.01144.pdf