Приступая к изложению азов вычислительной математики, хотелось бы отметить, что численные методы, которые мы будем здесь обсуждать, являются в большинстве случаев приближенными, то есть позволяют получить лишь некоторое (требуемое, разумное) приближение к искомому решению рассматриваемой задачи. Реализация численных методов сводится к выполнению многих (тысяч или миллионов) простейших арифметических операций типа: «сложить», «умножить», «разделить». При этом следует помнить, раз и навсегда уяснить, что получить точные результаты посредством выполнения этих операций на ЭВМ принципиально нельзя даже в том случае, если численный метод является точным.

Результаты вычислений всегда содержат ***неустранимые погрешности***. Источником их являются, во-первых, погрешности исходных данных, во-вторых, погрешности округлений, неизбежные при выполнении арифметических операций на ЭВМ. Ошибки округления отсутствуют, если вычисления ведутся по правилам арифметики целых чисел, однако при решении инженерных задач целыми числами никак нельзя обойтись.

В зависимости от способа вычислений неустранимые погрешности искажают результат в большей или в меньшей степени. С этим обстоятельством необходимо считаться, так как при неправильной (неграмотной, нерациональной) организации вычислений можно получить абсурдные результаты. В подтверждение сказанного приведем простые примеры.

Пример 1. Пусть надо решить систему двух линейных уравнений

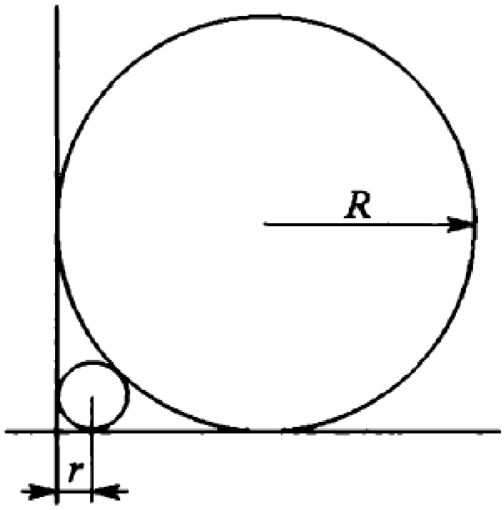
$$\begin{cases} -10^{-7}x_1 + x_2 = 1, \\ \quad x_1 \; + \; 2x_2 = 4. \end{cases}$$

Первый метод. Исключая x_1 из первого уравнения: $x_1 = 10^7 x_2 - 10^7$, и подставляя это выражение во второе уравнение, получаем $x_2 = \dfrac{10^7+4}{10^7+2}$. Проведя вычисления с семью значащими цифрами (что типично при работе в режиме с ординарной точностью), получаем $x_2 = 1.000000$, $x_1 = 0.000000$, что совершенно неверно, как видно из второго уравнения.

Второй метод. Исключая x_1 из второго уравнения: $x_1 = 4 - 2x_2$, получаем для x_2 формулу $x_2 = \dfrac{1+4\cdot 10^{-7}}{1+2\cdot 10^{-7}}$. После вычислений получаем $x_2 = 1.000000$, $x_1 = 2.000000$ – правильное (с точностью до шести десятичных цифр) решение.

Погрешности входных данных также могут сильно повлиять на результаты.

Пример 2. Пусть требуется найти объем шара, касающегося цилиндра радиуса R и двух касательных к нему взаимно перпендикулярных плоскостей.



Легко видеть, что радиус шара r равен $r = R\frac{\sqrt{2}-1}{\sqrt{2}+1}$ и, следовательно, объем

$$V = \frac{4}{3}\pi R^3 \left(\frac{\sqrt{2}-1}{\sqrt{2}+1}\right)^3.$$

Займемся вычислениями последнего множителя $S = \left(\frac{\sqrt{2}-1}{\sqrt{2}+1}\right)^3$. Домножая знаменатель на сопряженное число, можно записать

$$S = \left(\sqrt{2}-1\right)^6 = \left(3-2\sqrt{2}\right)^3 = 99-70\sqrt{2}.$$

Рассматривая последние три формулы как три метода вычисления величины S, приведем результаты расчетов в таблице, привлекая для иррационального числа $\sqrt{2}$ следующие приближения $\sqrt{2} \approx \frac{7}{5} = 1,4$ (относительная погрешность примерно 1%) и $\sqrt{2} \approx \frac{17}{12} = 1,41(6)$ (относительная погрешность примерно 0.18%):

$\sqrt{2}$	$(\sqrt{2}-1)^6$	$(3-2\sqrt{2})^3$	$99-70\sqrt{2}$
7/5	0.004096	0.008000	1
17/12	0.005233	0.004630	−0.1(6)…

Вычисления проводились с большим количеством значащих цифр, так что различие результатов, к которым приводят эти три «метода», обусловлено различным влиянием погрешности в приближенном представлении исходной константы $\sqrt{2}$ при разных способах расчета.

Вообще говоря, нетрудно понять, каким образом в рассмотренном случае формируются абсурдные результаты. Представим себе два близких по величине числа:

$$x = 0,abcdefg, \quad y = 0,abcde_1 f_1 g_1 .$$

Здесь a, b, ... – цифры после десятичной точки в записи чисел. Таким образом, в рассмотренном случае числа x, y отличаются друг от друга пятой и далее (после десятичной точки) цифрами. Разность этих чисел будет величиной пятого порядка малости: $\sim 10^{-5}(efg - e_1 f_1 g_1)$. Допустим, что цифры f, f_1 и далее искажены за счет каких-то ошибок (исходных или погрешностей округления, если величины x, y получены в процессе предшествующих вычислений), тогда в вычисленной разности $(x-y)$ мы получим только одну правильную цифру $(e-e_1)$, то есть ошибка результата на данной элементарной арифметической операции резко возрастает (если и цифры e, e_1 неверны, то результат $(x-y)$ просто не имеет ничего общего с правильным). Именно таков «механизм» формирования результатов в наших примерах. В первом случае при вычислении x_1 по формуле $10^7 x_2 - 10^7$ все учитываемые цифры совпадали, в итоге – результат абсолютно неверен. Во втором примере в последнем столбце таблицы точный результат определяется пятой и последующими значащими цифрами чисел 99 и $70\sqrt{2}$ (третьей и последующими цифрами после десятичной точки), в то время как вторая значащая цифра при $\sqrt{2} \approx \frac{7}{5}$ (третья при $\sqrt{2} \approx \frac{17}{12}$) искажена за счет погрешности $\sqrt{2}$ – результаты также абсурдны.

Как можно понять из приведенных примеров, операция вычитания близких (и тем более больших) по величине чисел чревата неприятностями при машинных вычислениях. И, следовательно, помня об этом, при планировании вычислений (в частности, при выборе алгоритма) следует по возможности избегать ситуаций, когда возникает необходимость в выполнении этих операций. В первом примере в этой связи следует выбрать второй способ решения. Во втором примере предпочтительным является первый «метод» вычисления результата – $\left(\sqrt{2}-1\right)^6$.

Почему так – можно понять, привлекая аппарат математического анализа к исследованию влияния ошибок входных данных на результат вычислений. Пусть вычисляется величина $\varphi(x,y)$. При неточных входных данных: $\tilde{x} = x \pm \Delta x$, $\tilde{y} = y \pm \Delta y$, ошибка результата оценивается сверху следующим образом:

$$|\Delta\varphi| \le |\varphi(\tilde{x},\tilde{y}) - \varphi(x,y)| \le \left|\frac{\partial\varphi}{\partial x}\right| \cdot |\Delta x| + \left|\frac{\partial\varphi}{\partial y}\right| \cdot |\Delta y|.$$

Объективной мерой погрешности является относительная ошибка – отношение погрешности величины к самой величине (по модулю). В данном случае

$$\delta = \left|\frac{\Delta\varphi}{\varphi}\right| \le \frac{1}{|\varphi|}\left(\left|\frac{\partial\varphi}{\partial x}\right| \cdot |\Delta x| + \left|\frac{\partial\varphi}{\partial y}\right| \cdot |\Delta y|\right).$$

Например, для $\varphi = \left(\sqrt{2}-1\right)^6$, $x = \frac{7}{5}$ ($\Delta x \sim 0{,}0143$), $y = 1$ ($\Delta y = 0$), имеем

$$\delta \le \left|\frac{\Delta\varphi}{\varphi}\right| \le \frac{1}{|\varphi|}\left|\frac{\partial\varphi}{\partial x}\right| \cdot |\Delta x| = \frac{1}{\left(\sqrt{2}-1\right)^6} \cdot 6\left(\sqrt{2}-1\right)^5 \Delta x = \frac{6}{\sqrt{2}-1}\Delta x \approx 0{,}207\,,$$

то есть погрешность результата (0.004096) в этом случае составляет ≈21%. Точно так же можно проанализировать погрешность остальных результатов и прийти тем самым к уже упомянутому выводу о том, что первый «метод» вычислений – предпочтительней.

При получении оценки для относительной погрешности надо, согласно определению относительной погрешности, привлекать точное значение результата $\varphi(x,y)$, но оно-то как раз и неизвестно и является целью вычислений. Тем не менее, оценку неустранимой погрешности можно получить, исходя из следующего приближенного определения относительной погрешности:

$$\delta \approx \left|\frac{\Delta\varphi}{\varphi}\right| \le \frac{1}{|\tilde{\varphi}|}\left(\left|\frac{\partial\varphi}{\partial x}\right|\cdot|\Delta x| + \left|\frac{\partial\varphi}{\partial y}\right|\cdot|\Delta y|\right),$$

где $\tilde{\varphi} = \varphi(\tilde{x},\tilde{y})$ – вычисленный результат.

Отмеченные обстоятельства предопределяют, что при использовании численных методов наряду с конечными результатами столь же важное значение будут иметь оценка их достоверности и оценка возможного влияния на результаты разного рода погрешностей.

ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ НЕЛИНЕЙНЫХ УРАВНЕНИЙ С ОДНИМ НЕИЗВЕСТНЫМ

Решение уравнений является одной из задач, наиболее часто встречающихся в практике инженера. Любое уравнение с одним неизвестным можно записать в виде $f(x)=0$. ***Решить уравнение*** – это значит найти те значения x, называемые ***корнями уравнения*** или ***нулями функции*** $f(x)$, которые обращают уравнение в верное тождество.

Однако, далеко не всегда уравнение можно решить точно. Для некоторых классов уравнений известны формулы, позволяющие точно найти корни уравнения, например, корни квадратного и биквадратного уравнений. Некоторые (тригонометрические, показательные, логарифмические) уравнения могут быть решены путем приведения их к простейшему виду и использованию таблиц. К сожалению, такие приемы могут быть применены лишь к сравнительно узкому классу уравнений.

На практике часто встречаются уравнения, которые нельзя решить элементарными приемами, при этом для практических нужд их точное решение не является необходимым. Кроме того, в некоторых случаях уравнение содержит коэффициенты, известные лишь приближенно и сама задача о точном нахождении корней теряет смысл. Поэтому все большее значение приобретают способы численного (приближенного) нахождения корней уравнения и оценки степени их точности.

Пусть дано уравнение $f(x)=0$, где функция *f(x)* определена и непрерывна на конечном или бесконечном интервале $a<x<b$. Всякое число ξ, такое, что $f(\xi)=0$, называется ***корнем (решением) уравнения*** или ***нулем функции*** *f(x)*. ***Найти корень уравнения*** $f(x)=0$ ***с заданной точностью*** ε

означает, что если ξ – точное значение корня, а x – его приближенное значение, то $|\xi - x| \le \varepsilon$.

Ограничимся обсуждением проблемы поиска действительных корней. Задача разбивается на два этапа:

1. локализация (отделения) корней, то есть предварительный анализ расположения корней на оси x, в результате которого выявляются такие отрезки оси x, каждому из которых принадлежит не более одного корня;
2. вычисление с требуемой точностью корня (корней), принадлежащих заданному отрезку (заданным отрезкам).

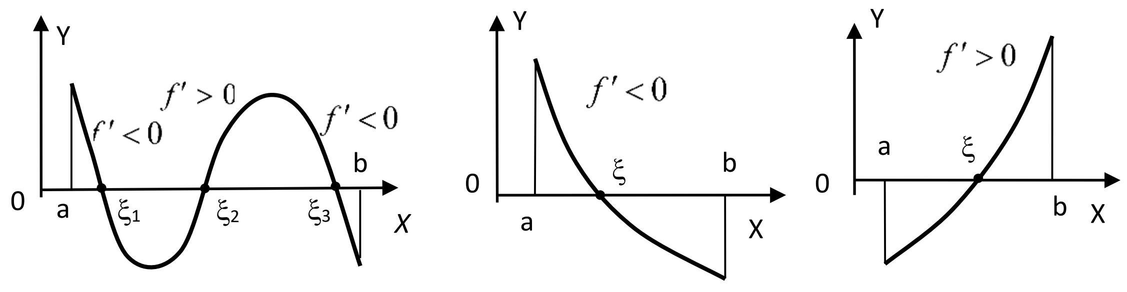
§1.1. Отделение (локализация) корней уравнения

Локализация корней выходит за рамки собственно вычислительной математики. Это скорее предмет математического анализа. На этом этапе можно воспользоваться компьютерной техникой для того, чтобы вычислить таблицу значений функции *f(x)* или построить график этой функции. При решении задач физического содержания зачастую отрезок $[a,b]$, содержащий требуемый корень, известен из физических соображений.

Отделить корень ξ уравнения $f(x)=0$ – значит указать окрестность точки ξ, не содержащую других корней этого уравнения. При отделении корней уравнения $f(x)=0$ полезной является известная из математического анализа следующая теорема.

Теорема. Если функция $f(x)$ непрерывна и монотонна на отрезке $[a;b]$, а ее значения на концах этого отрезка принимают разные знаки, то есть $f(a)\cdot f(b)<0$, то внутри этого отрезка существует, по крайней мере один корень ξ уравнения $f(x)=0$.

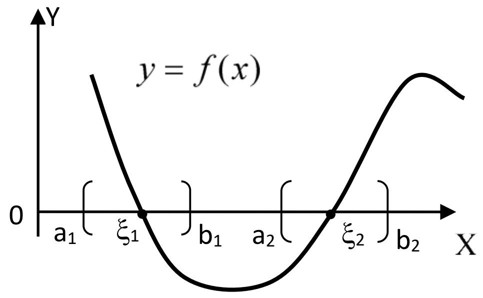
Достаточным признаком монотонности функции $f(x)$ ***на отрезке*** $[a;b]$ является сохранение знака производной этой функции, то есть корень будет единственным, если $f'(x)$ сохраняет свой знак внутри интервала $(a;b)$.



Графический метод отделения корней уравнения

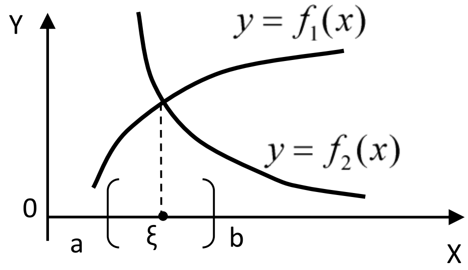
Корни уравнения $f(x)=0$ могут быть отделены графическим путем. Для этого необходимо построить график функции $y=f(x)$ и определить интервалы, на каждом из которых находится один корень уравнения $f(x)=0$.

Графически, найти корень уравнения – это значит найти абсциссу точки пересечения графика функции *y*=*f(x)* с прямой *y*=0 (осью абсцисс).



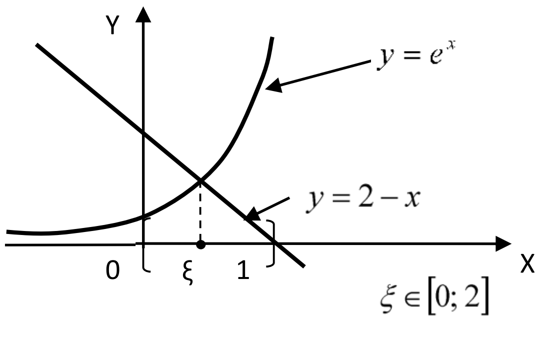
$$\xi_1 \in [a_1, b_1], \quad \xi_2 \in [a_2, b_2]$$

На практике часто оказывается удобным исходное уравнение $f(x) = 0$ заменить равносильным ему уравнением $f_1(x) = f_2(x)$, где $f_1(x)$ и $f_2(x)$ функции более простые, чем *f(x)*. Тогда, построив графики функций $y = f_1(x)$ и $y = f_2(x)$, можно определить интервалы, содержащие по одному корню исходного уравнения. Корни уравнения представляют собой абсциссы точек пересечения указанных графиков.



Пример. Отделить графическим путем корни уравнения $e^x + x - 2 = 0$.
Решение. Представим исходную функцию в виде $f_1(x) = f_2(x)$. Построим графики этих функций.

$$e^x = 2 - x,$$
$$f_1(x) = e^x,$$
$$f_2(x) = 2 - x.$$



На чертеже видно, что графики пересекаются в единственной точке, абсцисса которой находится внутри отрезка [0;2]. Следовательно, данное уравнение имеет единственный корень, лежащий внутри отрезка [0;2]. Требуется уточнить корень с заданной точностью.

Для вычисления корней с требуемой точностью (***уточнение корня***) обычно применяют какую-либо итерационную процедуру, состоящую в построении числовой последовательности x_n, сходящейся к искомому корню ξ данного уравнения. Имеются различные способы построения таких последовательностей, и выбор алгоритмов их построения для нахождения корня уравнения – весьма важный момент при практическом решении задачи. Немалую роль играют такие свойства алгоритма, как простота, надежность, экономичность и так далее. Одной из характеристик вычислительного алгоритма является его скорость сходимости.

Определение. Последовательность x_n, сходящаяся к пределу ξ $\left(\xi \neq x_n\right)$, имеет скорость сходимости порядка α, если при $n \to \infty$

$$\left|x_{n+1} - \xi\right| = \mathrm{O}(\left|x_n - \xi\right|^{\alpha}).$$

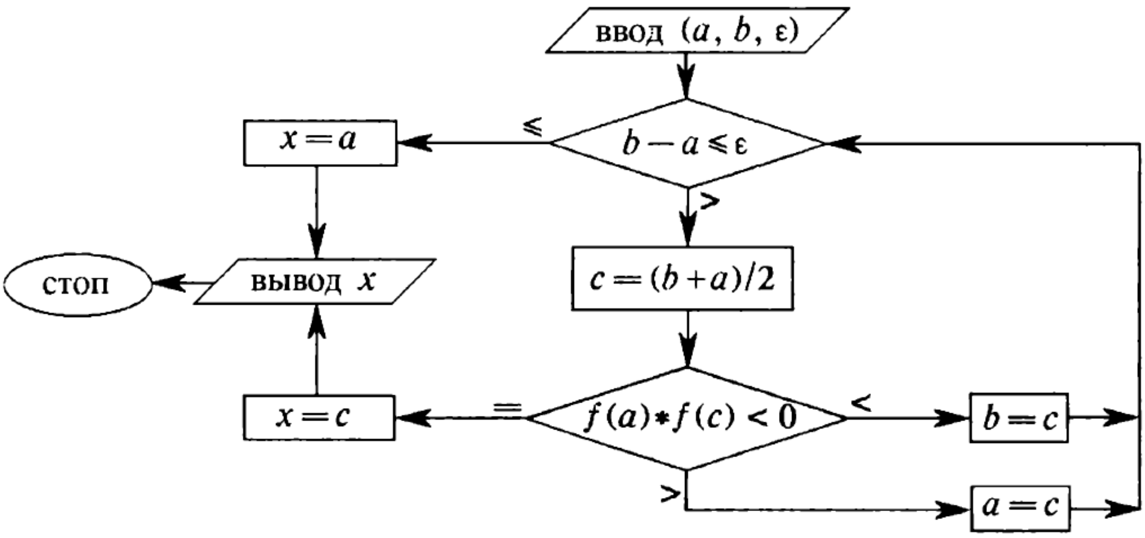
Сходимость при $\alpha = 1$ называется линейной или первого порядка, сходимость при $1 < n < 2$ – сверхлинейной, при $n = 2$ – квадратичной и так далее. С ростом значения α вычислительный алгоритм построения последовательности x_n усложняется, и условия, обеспечивающие сходимость последовательности x_n, становятся более жесткими.

§1.2. Уточнение корня

Полагая, что корни локализованы, будем заниматься следующей конкретной задачей: вычислить с заданной точностью ε корень уравнения, принадлежащий отрезку $[a,b]$. Предполагается, что на отрезке $[a,b]$ находится единственный корень. Кроме того, мы будем полагать, что искомый корень является не кратным, а простым. Некоторые замечания по поводу вычисления кратных корней будут сделаны ниже, по ходу изложения материала.

Метод половинного деления.

Этот метод состоит в следующем. Делим отрезок $\left[a,b\right]$ пополам: $c = \dfrac{\left[a,b\right]}{2}$. Проверяя знаки $f(a)$, $f(b)$, $f(c)$, выясняем, какой половине исходного отрезка принадлежит корень. Последнюю снова делим пополам и так далее, до тех пор, пока не выполнится условие $\dfrac{b-a}{2^n} < \varepsilon,$ где n – число проведенных делений исходного отрезка пополам. После этого любую точку последнего отрезка можно взять в качестве ответа $\bar{x}$. Приведем формализованное (в виде фрагмента блок-схемы) описание сформулированного алгоритма решения рассматриваемой задачи.



Данный метод можно рассматривать как последовательное уточнение локализации искомого корня: на каждом шаге размер окрестности, которой он принадлежит, уменьшается вдвое. Очевидно, что метод половинного деления работает, если при переходе через корень функция *f(x)* меняет знак, то есть он может быть использован для вычисления корней нечетной кратности (однократный (простой) корень, трехкратный и так далее).

Метод Ньютона.

Перейдем к обсуждению еще одного простого, но более эффективного, метода вычисления корня. Зададим некоторое начальное (нулевое) приближение вычисляемого корня $x_0 \in [a,b]$ и линеаризуем функцию *f(x)* в окрестности точки x_0, представив ее в виде отрезка ряда Тейлора

$$f(x) \approx f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0)$$

и вместо нелинейного уравнения $f(x) = 0$ решим линеаризованное уравнение

$$f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) = 0,$$

трактуя его решение как первое приближение к искомому значению корня. Получим

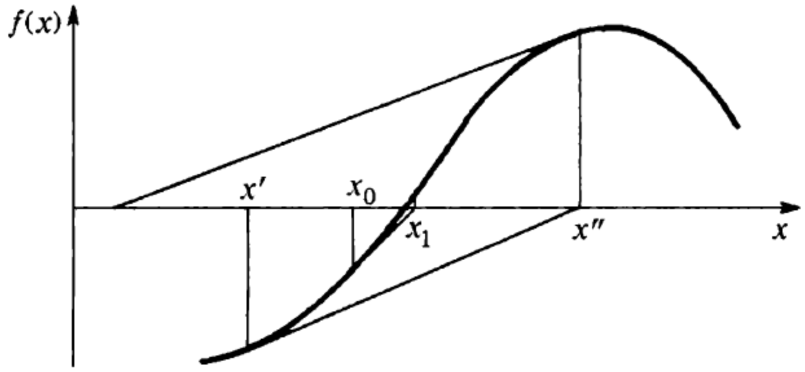
$$x_1 = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)}.$$

Продолжая этот итерационный процесс, приходим к формуле Ньютона

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

для вычисления последовательности приближений к искомому решению.

Геометрическая интерпретация этого процесса, показанная на следующем рисунке, делает понятным другое название этого метода – ***метод касательных***. Из полученной для этого метода формулы вытекает **условие применимости метода**: функция $f(x)$ должна быть дифференцируемой и $f'(x)$ в окрестности корня не должна менять знак.



Если первая или ряд последующих производных обращаются в ноль в точке корня, а в окрестности корня $f'(x_0)\neq 0$, то формула метода касательных сохраняет смысл, и, таким образом, метод Ньютона можно использовать и для вычисления кратных корней, но при этом «качество» метода, которое присуще применительно к однократному корню, теряется.

Выясним, далее, условия сходимости последовательности значений $\{x_n\}$, вычисляемых по формуле метода касательных, к корню уравнения $f(x)=0$. Предполагая, что $f(x)$ дважды непрерывно дифференцируема, запишем формулу Тейлора для $f(x_*)$ (x_* – искомый корень) в окрестности *n*-го приближения

$$f(x_*)=0=f(x_n)+f'(x_n)(x_*-x_n)+\frac{1}{2}f''(\xi)(x_*-x_n)^2,$$

где $\xi\in[x_*,x_n]$.

Разделив последнее соотношение на $f'(x_n)$ и перенеся первые два слагаемых из правой части в левую, получим

$$\left[x_n-\frac{f(x_n)}{f'(x_n)}\right]-x_*=\frac{1}{2}\frac{f''(\xi)}{f'(x_n)}(x_n-x_*)^2,$$

что, учитывая $x_{n+1}=x_n-\dfrac{f(x_n)}{f'(x_n)}$, переписываем в виде

$$x_{n+1}-x_*=\frac{1}{2}\frac{f''(\xi)}{f'(x_n)}(x_n-x_*)^2.$$

Отсюда

$$|x_{n+1}-x_*|=\frac{1}{2}\frac{|f''(\xi)|}{|f'(x_n)|}|x_n-x_*|^2$$

и следует оценка

$$|x_{n+1}-x_*|\leq\frac{1}{2}\frac{M_2}{m_1}|x_n-x_*|^2,$$

где $M_2=\max\limits_{[a,b]}|f''(x)|,\ m_1=\min\limits_{[a,b]}|f'(x)|$.

Очевидно, что ошибка на каждом шаге убывает, если выполнено

$$\frac{1}{2}\frac{M_2}{m_1}|x_n - x_*| < 1.$$

Полученное условие показывает, что сходимость зависит от выбора начального приближения. Это хорошо видно и из геометрической интерпретации метода (см. рисунок выше): если в качестве начального приближения взять значение x', то на сходимость последующих приближений (x'' и так далее) рассчитывать не приходится. С другой стороны, как видно, всегда можно добиться выполнения полученного условия за счет более точного выбора начального приближения x_0, то есть за счет более локализации искомого корня, которой можно достичь, например, с помощью метода половинного деления.

Оценка $|x_{n+1} - x_*| \le \frac{1}{2}\frac{M_2}{m_1}|x_n - x_*|^2$, характеризует скорость убывания погрешности для метода Ньютона: на каждом шаге погрешность пропорциональна квадрату предыдущей. Это очень высокая скорость. Например, если в некотором приближении получена одна точная цифра после запятой, то в следующем можно ожидать две точные цифры, далее – четыре и так далее. Для сравнения в методе половинного деления ошибка на каждом шаге уменьшается в два раза, то есть

$$\left|x_{n+1} - x_*\right| \le \frac{1}{2}\left|x_n - x_*\right| \le \ldots \le \frac{1}{2^{n+1}}(b-a).$$

Здесь, чтобы получить четыре точные цифры результата, надо выполнить столько делений исходного отрезка пополам, чтобы

$$\frac{1}{2^{n+1}}(b-a) \le \frac{1}{2}\cdot 10^{-4}.$$

Отсюда $n \ge \dfrac{4 + \lg(b-a)}{\lg 2}$. Например, при $b - a = 1$ получим $n \ge 14$. Правда, надо учесть, что в методе деления отрезка пополам для перехода к очередному приближению достаточно вычислить только одно значение функции $f(x)$, в то время как метод Ньютона требует еще вычисления производной от нее.

Метод простых итераций.

Теперь рассмотрим более общий итерационный процесс, то есть метод последовательных приближений, частным случаем которого является и метод Ньютона. Представим уравнение $f(x) = 0$ в виде $x = \varphi(x)$. Очевидно, что искомый корень при подстановке его в последнее равенство превращается в тождество

$$x_* \equiv \varphi(x_*).$$

Рассмотрим последовательность значений x, которая определяется следующим образом:

$$x_{n+1} = \varphi(x_n) \ \ (x_0 \in [a,b] \text{задано}).$$

Оказывается, при определенных свойствах функции $\varphi(x)$ последовательность $x_{n+1}=\varphi(x_n)$ сходится к корню уравнения $f(x)=0$. Достаточные условия сходимости формулируются в теореме.

Теорема. Пусть в окрестности искомого корня $U_* = \{x \mid |x-x_*| \le r\}$ функция $\varphi(x)$ удовлетворяет условию Коши-Липшица с константой, меньшей единицы, то есть для любых x', x'' из этой окрестности:

$$|\varphi(x')-\varphi(x'')| \le q|x'-x''|,\ q = const < 1.$$

Тогда последовательность $x_{n+1}=\varphi(x_n)$ с $x_0 \in \{x \mid |x-x_0| \le r\}$ сходится к корню, то есть $x_n \to x_*$ при $n \to \infty$, и имеет место оценка погрешности

$$|x_n - x_*| \le q^n |x_0 - x_*|.$$

Покажем сначала, что все x, определяемые итерационным процессом $x_{n+1}=\varphi(x_n)$, принадлежат окрестности $\{x \mid |x-x_*| \le r\}$. В самом деле, если x и $y=\varphi(x)$, то

$$|y-x_*| = |\varphi(x)-\varphi(x_*)| \le q|x-x_*| \le |x-x_*| \le r.$$

Далее, $|x_n - x_*| = |\varphi(x_{n-1})-\varphi(x_*)| \le q|x_{n-1}-x_*|$, откуда $|x_n-x_*| \le q^n|x_0-x_*|$, то есть доказано утверждение теоремы из которого непосредственно следует сходимость $x_n \xrightarrow[n\to\infty]{} x_*$. На практике вместо условия $|\varphi(x')-\varphi(x'')| \le q|x'-x''|$ обычно требуют выполнения условия $|\varphi'(x)| \le q < 1$ (для всех x из окрестности корня $\{x \mid |x-x_*| \le r\}$) из которого следует $|\varphi(x')-\varphi(x'')| \le q|x'-x''|$ по теореме о среднем из математического анализа.

В силу очевидной неоднозначности перехода от $f(x)=0$ к $x=\varphi(x)$ практически всегда можно подобрать $\varphi(x)$ таким образом, чтобы в некоторой окрестности корня выполнялось условие $|\varphi(x')-\varphi(x'')| \le q|x'-x''|$. Может быть, при этом окажется необходимым вернуться к этапу локализации, чтобы сузить рассматриваемую окрестность.

Что касается скорости сходимости метода простых итераций, то из утверждения теоремы следует, что $|x_n-x_*| \le q^n|x_0-x_*|$ и на каждом шаге погрешность убывает в q раз. Таким образом, погрешности ведут себя как члены убывающей геометрической прогрессии со знаменателем q. В этой связи говорят, что метод простых итераций сходится со скоростью геометрической прогрессии. Или, замечая что последовательные погрешности связаны друг с другом линейным неравенством $|x_{n+1}-x_*| \le q|x_n-x_*|$, говорят, что метод простых итераций представляет собой ***линейный итерационный процесс*** (или ***метод первого порядка***).

Последнее имеет смысл, если в любой сколь угодно малой окрестности корня константа q ограничена снизу, то есть $q > q_0 > 0$. Например, очевидно, что при

$$\varphi(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)}$$

получаем метод Ньютона (как частный случай метода простых итераций). Легко устанавливается, что для него $|\varphi'(x)| \xrightarrow[x \to x_0]{} 0$ то есть q не ограничено снизу. Как следствие мы получили ранее соотношение

$$| x_{n+1} - x_* | \le \frac{1}{2}\frac{M_2}{m_1} | x_n - x_* |^2$$

между последовательными погрешностями метода Ньютона, которое позволяет трактовать последний как квадратичный итерационный процесс (или метод второго порядка).

Используя неравенство

$$|x_n - x_*| \le q^n |x_0 - x_*|,$$

можно получить априорную оценку количества итераций (приближений), которые нужно выполнить, чтобы получить результат с требуемой точностью. Для этого, очевидно, достаточно решить относительно n неравенство

$$q^n |x_0 - x_*| \le \varepsilon .$$

Мажорируя (ограничивая сверху) неизвестную величину $|x_0 - x_*|$, например, размером рассматриваемой окрестности $(b-a)$, получаем:

$$n \ge \frac{\lg \frac{\varepsilon}{b-a}}{\lg q} .$$

При решении практических задач итерационный метод типа $x_{n+1} = \varphi(x_n)$ (отличный от метода Ньютона) может оказаться предпочтительней метода Ньютона, потому что последний требует вычислений $f'(x)$ на каждой итерации. Подходящую функцию $\varphi(x)$, обеспечивающую переход от $f(x) = 0$ к $x = \varphi(x)$, можно искать, например, в виде $\varphi(x) = x - g(x) f(x),$, подбирая функцию $g(x)$ так, чтобы на $[a,b]$ выполнилось условие $|\varphi'(x)| \le q < 1$ для всех x из окрестности корня $\{x \,|\, |x - x_*| \le r\}$.

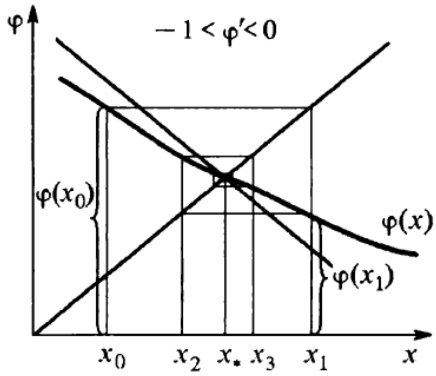
Остановимся несколько подробней на оценке погрешности для метода простых итераций. Прежде всего отметим, что наряду с оценкой из теоремы $|x_n - x_*| \le q^n |x_0 - x_*|$ можно получить оценку, не зависящую от точного значения корня:

$$|x_n - x_*| \le \frac{q^n}{1-q} |x_1 - x_0| .$$

На практике, однако, найти $q = \max\limits_{[a,b]} |\varphi'(x)|$ удается далеко не всегда. Тем более, для метода Ньютона может оказаться затруднительным получить оценки $M_2 = \max\limits_{[a,b]} |f''(x)|$ и $m_1 = \min\limits_{[a,b]} |f'(x)|$, которые можно было бы (в соответствии с

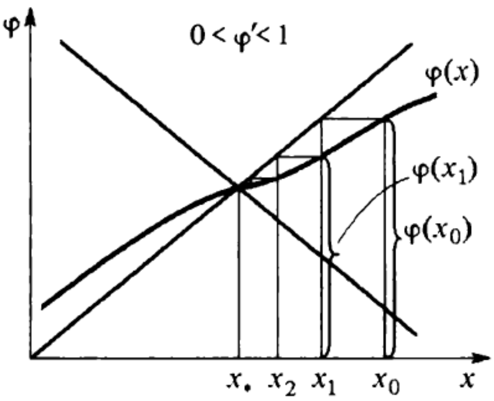
$|x_{n+1}-x_*|\le \frac{1}{2}\frac{M_2}{m_1}|x_n-x_*|^2$) использовать для контроля за текущей погрешностью в процессе вычислений. Поэтому при проведении расчетов довольно часто контроль достигнутой точности осуществляется на основе следующего приближенного условия: проверяется неравенство $\left|x_{n+1}-x_n\right|\le\varepsilon$, как только оно выполнится, считается, что последнее вычисленное значение x_{n+1} является требуемым результатом.

При сходимости последовательных приближений к корню с разных сторон,



что имеет место, если $\varphi'<0$ в рассматриваемой окрестности величина $\left|x_{n+1}-x_n\right|$ мажорирует истинную погрешность, $\left|x_{n+1}-x_n\right|>\left|x_{n+1}-x_*\right|$, и поэтому данный критерий окончания вычислений является вполне объективным.

Если же $\varphi'>0$, то сходимость к корню носит односторонний характер, и условие $\left|x_{n+1}-x_n\right|\le\varepsilon$ может выполниться гораздо раньше нужного требования $\left|x_{n+1}-x_*\right|\le\varepsilon$. В этом случае контроль достигнутой точности лучше осуществлять по проверке неравенства $\frac{1}{1-q}\left|x_{n+1}-x_n\right|\le\varepsilon$,



которое вытекает из легко устанавливаемой оценки

$$\left|x_{n+1}-x_n\right|\le\frac{1}{1-q}\left|x_{n+1}-x_n\right|\le\frac{q}{1-q}\left|x_n-x_{n-1}\right|.$$

Правда, при этом все-таки надо предварительно получить оценку q.

Метод релаксаций

Как было отмечено выше, для перехода от $f(x)=0$ к $x=\varphi(x)$, функцию $\varphi(x)$ можно искать в следующем виде: $\varphi(x)=x-g(x)f(x)$. Часто полагают $g(x)=\tau=const,$, записывая уравнение $f(x)=0$ в виде

$$x=x-\tau f(x)=\varphi(x)$$

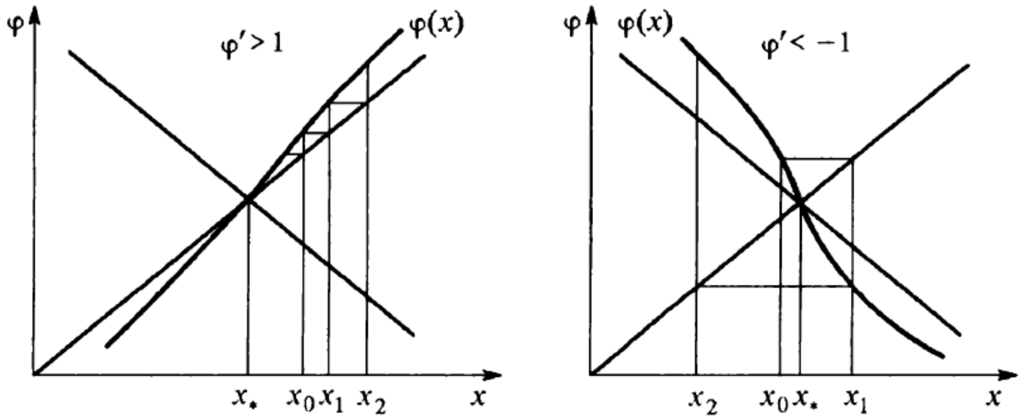
и подбирая параметр τ так, чтобы в рассматриваемой окрестности выполнялось условие сходимости

$$\left|\varphi'(x)\right|=\left|1-\tau f'(x)\right|<1.$$

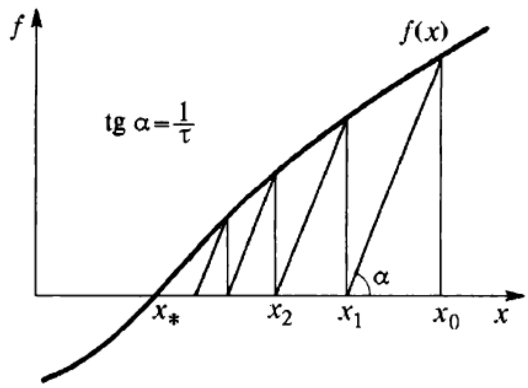
Таким образом построенный ***метод называется методом релаксаций***, τ – ***релаксационный параметр***.

Геометрическая интерпретация рассмотренных методов

Метод простых итераций допускает наглядную геометрическую трактовку. В самом деле, решение уравнения $x = \varphi(x)$ – это точка пересечения прямой $y = x$ с кривой $x = \varphi(x)$ в плоскости (x, y). На рисунках выше и ниже иллюстрируются различные ситуации: сходимость к корню односторонняя, с разных сторон, расходящиеся итерационные процессы.



Метод релаксаций по сути означает, что функцию $f(x)$ в исходном уравнении $f(x) = 0$ мы заменяем в окрестности всех приближений x_n прямой $y = f(x_n) + \dfrac{1}{\tau}(x - x_n)$ с постоянным наклоном, и в качестве очередного приближения рассматриваем точку пересечения ее с осью абсцисс



Иногда вместо метода Ньютона, чтобы избавиться от необходимости вычислять $f'(x)$ на каждом шаге итераций, используют так называемый ***модифицированный (или огрубленный) метод Ньютона***:

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_0)} .$$

Очевидно, это есть частный случай метода релаксаций с релаксационным параметром

$$\tau = \frac{1}{f'(x_0)} .$$

Метод секущих

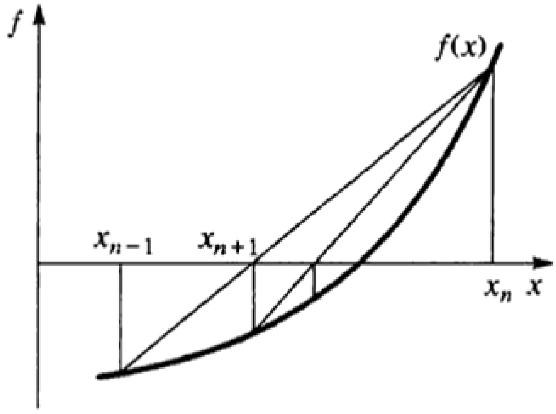
Метод Ньютона требует вычисления производной $f'(x)$ при вычислении каждого приближения. Это может заметно понизить его реальную эффективность (в смысле затрат машинного времени). Если на $(n+1)$-м шаге (полагая, что величина $|x_n - x_{n-1}|$ достаточно мала) использовать в формуле Ньютона приближение

$$f'(x_n) \approx \frac{f(x_n) - f(x_{n-1})}{x_n - x_{n-1}},$$

то мы придем к формуле

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

которая определяет ***метод секущих***. Название связано с геометрической интерпретацией метода.



Нетрудно убедиться, что хорда к кривой $f(x)$, проведенная через точки $\left(x_{n-1}, f\left(x_{n-1}\right)\right)$ и $\left(x_n, f\left(x_n\right)\right)$, пересекает ось абсцисс в точке x_{n+1}. Можно доказать, что метод секущих сходится медленнее, чем метод Ньютона, но быстрее, чем какой-либо линейный итерационный процесс (в частности, модифицированный метод Ньютона).

Об условиях сходимости метода простых итераций

Можно доказать справедливость следующих утверждений.

Утверждение 1. Пусть в окрестности $U_a = \left\{x \,|\, |x-a| \le r\right\}$ функция $\varphi(x)$ удовлетворяет условиям:

1) Коши-Липшица: для любых $x', x'' \in U_a$ $|\varphi(x') - \varphi(x'')| \le q(x' - x'')$, причем $q = const < 1$;

2) $|\varphi(a) - a| \le (1-q)r$.

Тогда:

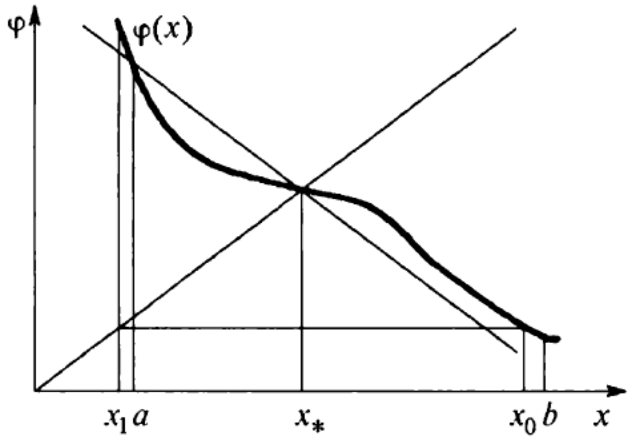
1) в U_a существует одно и только одно решение уравнения $x = \varphi(x)$;

2) если $x_0 \in U_a$, то приближения x_n, вычисляемые по формуле $x_{n+1} = \varphi(x_n)$, сходятся к корню уравнения $x = \varphi(x)$;

3) справедлива оценка $|x_n - x_*| \le q^n |x_0 - x_*|$.

Очевидно, что это более сильное утверждение, нежели теорема о достаточном условии сходимости итераций, сформулированная в выше. Окрестность, определенная в данном утверждении, никоим образом не связана с неизвестным решением x_*. Более того, само существование решения является следствием условий 1), 2) утверждения 1.

Обратим внимание на следующее обстоятельство. Если известно, что искомый корень принадлежит рассматриваемой окрестности, одного условия 1) может оказаться недостаточно для сходимости итераций. При нарушенном условии 2) вычисляемые приближения могут в этом случае выйти за пределы окрестности, где выполнено условие сходимости 1). С этим надо считаться, так как на практике, решая нелинейное уравнение, мы ищем конкретный корень, принадлежащий окрестности, найденной на стадии локализации решения. Последняя, однако, не обязана совпадать с окрестностью $U_* = \{x \,|\, |x - x_*| \le r\}$. из теоремы о достаточном условии сходимости (центром которой является искомый корень). В итоге можно столкнуться с ситуацией, показанной на рисунке:



на отрезке $[a,b]$ выполнено условие 1), но уже x_1 выходит за пределы $[a,b]$; сходимость, как видно, отсутствует. В этом случае целесообразно вернуться к этапу локализации корня, чтобы уменьшить размер окрестности (например, методом половинного деления), из которой выбирается начальное приближение. Конструктивность такого подхода опирается на следующее утверждение.

Утверждение 2. Пусть функция $\varphi(x)$ в окрестности $U_b = \{x \,|\, |x - b| \le r\}$ удовлетворяет условию Коши-Липшица и известно, что $x_* \in U_b$. Тогда существует такая окрестность $U \in U_b$, содержащая искомое решение $(x_* \in U)$, что если выбрать $x_0 \in U$, то последовательные приближения $x_{n+1} = \varphi(x_n)$ сходятся к решению x_*, и имеет место оценка $|x_n - x_*| \le q^n |x_0 - x_*|$.