Metody Numeryczne, część 5
studia stacjonarne

Iteracyjne metody wyznaczania zer funkcji (root finding algorithms)

Krystyna Ziętak

listopad 2018

Spis treści

Pierwiastki wielomianu stopnia 2 czyli trójmianu $ax^2 + bx + c$, gdzie $a \neq 0$

$$x_1 = \frac{-b + \sqrt{\Delta}}{2a}, \quad x_2 = \frac{-b - \sqrt{\Delta}}{2a}$$

$$\Delta = b^2 - 4ac$$

If $\Delta < 0$, to pierwiastki są zespolone.

$$3x^2 - 2x + 1$$

$$\Delta = (-2)^2 - 4 \cdot 3 \cdot 1 = -8, \qquad \sqrt{\Delta} = 2\sqrt{2}i$$

$$x_1 = \frac{2 + 2\sqrt{2}i}{6}, \qquad x_2 = \frac{2 - 2\sqrt{2}i}{6}$$

- $f(x) = e^x + 1$ nie ma zera.
- $f(x) = e^x - 1$ ma jedno zero.
- $f(x) = \sin(x)$ ma nieskończenie wiele zer.
- $f(x) = x^2 - 4\sin(x)$ ma dwa zera.

Krotność zera funkcji

Zero r funkcji $f(x)$ jest k-krotne jeśli

$$f^{(j)}(r) = 0, \quad j = 1, \ldots, k-1$$

$$f^{(k)}(r) \neq 0$$

$f^{(j)}(x)$ jest pochodną rzędu j.
Uwaga. Dla $k = 1$ zero r jest pojedyncze, $f(r) = 0, f'(r) \neq 0$.

Zero $r = 1$ funkcji $f(x) = (x-1)^2$ jest podwójne, bo

$$f(1) = 0, \quad f'(1) = 0, \quad f''(1) \neq 0$$

Twierdzenie

Jeśli ciągła na przedziale $[a, b]$ funkcja $f(x)$ spełnia warunek

$$f(a)f(b) < 0,$$

to funkcja f ma zero w przedziale (a, b).

Uwaga. To jest warunek dostateczny, ale nie jest konieczny.

$$f(x) = (x-1)^2, \quad r_1 = r_2 = 1, \qquad f(x) \geq 0$$

Zero funkcji $f(x) = e^x + 2x - 3$ leży w przedziale $(0, \frac{3}{2})$, bo

$$f(0) = -2 < 0,$$

$$f\left(\frac{3}{2}\right) = e^{3/2} > 0$$

Zero funkcji $f(x)$ leży w przedziale $(0, 1)$, bo

$$f(0) = -2 < 0,$$

$$f(1) = e - 1 > 0$$

$e = 2.71828, \quad \sqrt{e} = 1.6487$

$$f\left(\frac{1}{2}\right) = e^{1/2} - 2 < 0$$

Wobec tego zero funkcji $f(x)$ leży w przedziale $(\frac{1}{2}, 1)$

Graficzna lokalizacja zer funkcji

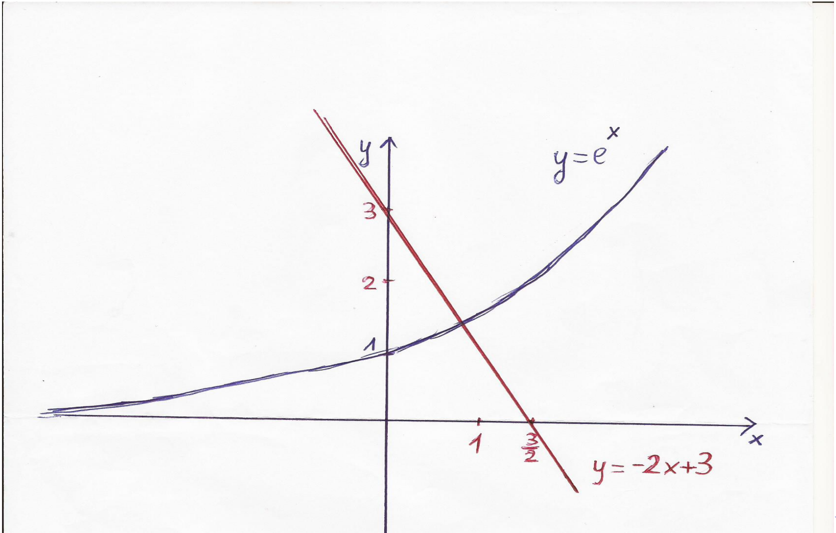
$$f(x) = e^x + 2x - 3$$

$$h(x) = e^x, \qquad g(x) = -2x + 3$$

$$f(x) = h(x) - g(x), \qquad h(x) = g(x)$$

Zero funkcji $f(x)$ jest punktem przecięcia wykresu funkcji $h(x)$ z wykresem funkcji $g(x)$

$$e^x + 2x - 3 = 0, \qquad e^x = -2x + 3$$



Niech przedział $[a_0, b_0]$ taki, że $f(a_0)f(b_0) < 0$.
Wówczas w przedziale (a_0, b_0) ciągła funkcja f ma zero.

Idea metody bisekcji

- Zaczynamy od przedziału $[a_0, b_0]$ zawierającego zero funkcji ciągłej $f(x)$.
- Wyznaczamy coraz mniejsze podprzedziały zawierające zero funkcji $f(x)$.
- Środek ostatniego wyznaczonego podprzedziału przyjmujemy za przybliżenie zera funkcji $f(x)$.

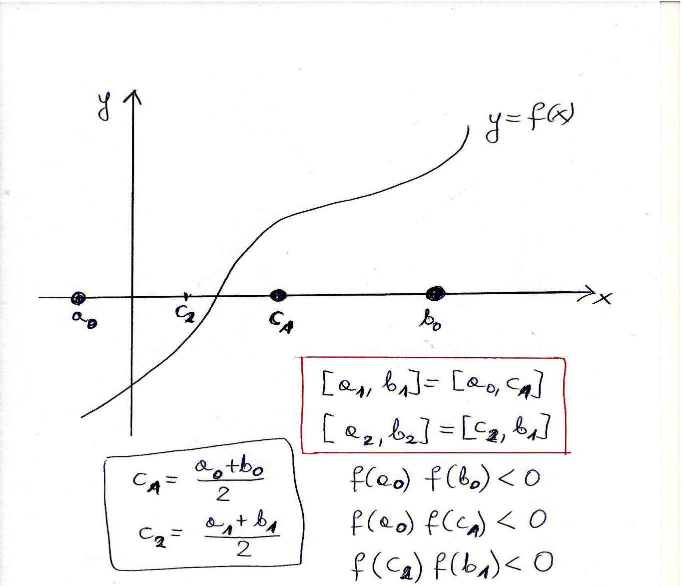
- Niech $c_1 = (a_0 + b_0)/2$ (środek przedziału). Dzielimy przedział $[a_0, b_0]$ na dwa podprzedziały $[a_0, c_1]$, $[c_1, b_0]$.
- Jeśli $f(a_0)f(c_1) < 0$, to funkcja f ma zero w przedziale (a_0, c_1). Wówczas przyjmujemy $[a_1, b_1] = [a_0, c_1]$.
- Jeśli $f(a_0)f(c_1) > 0$, to funkcja f ma zero w przedziale (c_1, b_0). Wówczas przyjmujemy $[a_1, b_1] = [c_1, b_0]$.

$[a_1, b_1] \subset [a_0, b_0]$

Powtarzamy to postępowanie dla nowego przedziału $[a_1, b_1]$.
itd

$$\cdots \subset [a_3, b_3] \subset [a_2, b_2] \subset [a_1, b_1] \subset [a_0, b_0]$$

Metoda bisekcji (połowienia przedziału)- ilustracja



Niech przedział $[a, b]$ taki, że $f(a)f(b) < 0$. Wówczas w przedziale (a, b) funkcja f ma jakieś zero.

Algorytm bisekcji

- **Repeat** $c = (a + b)/2$
  if $f(b)f(c) < 0$ **then** $a = c$ **else** $b = c$
- **until** $\mathrm{abs}(b - a) \leq \delta \mathrm{abs}(b)$

Środek ostatniego przedziału przyjmujemy jako przybliżenie zera funkcji $f(x)$.

Uwaga praktyczna: obliczać c z wzoru $c = a + \frac{b-a}{2}$ (dokładność)

Zamiast badać, czy $f(b)f(c) < 0$, lepiej jest sprawdzać, czy

$$\mathrm{sgn}(f(b)) \neq \mathrm{sgn}(f(c))$$

Zastanów się dlaczego?

Zadanie domowe

Zlokalizuj graficznie zero funkcji $f = e^x - \sin(x)$.
Narysuj wykresy funkcji $h(x) = e^x$ i $g(x) = \sin(x)$ na przedziale $[-2\pi, 2\pi]$.
Oceń, w jakim punkcie te wykresy się przecinają.

Przykład dla metody bisekcji

Chcemy wyznaczyć zero funkcji f leżące najbliżej 0.

$$f(x) = e^x - \sin(x).$$

Zastosujemy metodę bisekcji.

zob. D. Kincaid, W. Cheney, *Analiza Numeryczna*, WNT, Warszawa 2006, str. 66.

Metoda bisekcji zastosowana do rozwiązania równania $e^x - \sin(x) = 0$, czyli wyznaczenia zera funkcji $e^x - \sin(x)$. Zero leży w przedziale $[a_0, b_0] = [-4, -3]$.

(zob. D. Kincaid, W. Cheney)

k	c_k	$f(c_k)$
1	-3.5000	-0.321
2	-3.2500	$-0.694_{10} - 1$
4	-3.1875	$0.625_{10} - 1$
...	...	...
13	-3.1829	$0.122_{10} - 3$
14	-3.1830	$0.193_{10} - 4$
15	-3.1831	$-0.124_{10} - 4$
16	-3.1831	$0.345_{10} - 5$

Iteracyjne metody wyznaczania zera funkcji

- Chcemy wyznaczyć zero r funkcji $f(x)$

$$f(r) = 0.$$

- Dane jest x_0 - początkowe przybliżenie zera r.
- Wyznaczamy ciąg kolejnych przybliżeń $x_1, x_2, \dots$ zbieżny (przy pewnych założeniach) do r.

- Przykładem takiej metody jest metoda Newtona.
- W metodzie siecznych musimy mieć dwa początkowe przybliżenia zera funkcji.

Metoda Newtona (stycznych)

x_0 - dane początkowe przybliżenie zera r funkcji f.
Wyznaczamy ciąg kolejnych przybliżeń:

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}, \qquad k = 0, 1, 2, \ldots$$

Metoda siecznych

x_0, x_1 dwa początkowe przybliżenia zera r funkcji f.
Wyznaczamy ciąg kolejnych przybliżeń:

$$x_{k+1} = x_k - \frac{x_k - x_{k-1}}{f(x_k) - f(x_{k-1})} f(x_k), \quad k = 1, 2, 3, \ldots$$

Uwaga. Przy pewnych założeniach o początkowych przybliżeniach i o funkcji f ciągi kolejnych przybliżeń są zbieżne do zera funkcji f.

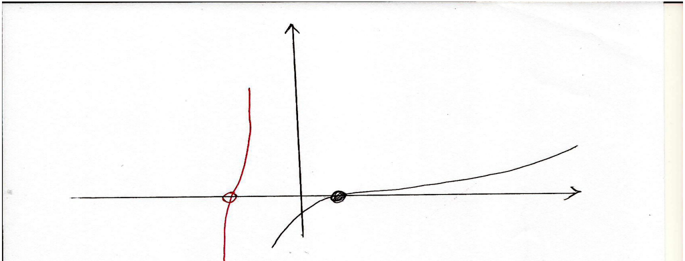
Kryterium STOPu

Kolejne przybliżenia $x_0, x_1, \ldots$ wyznaczamy tak długo aż (δ, η, max_{iter} są dane)

$$|x_{k+1} - x_k| \leq \delta |x_k|$$

Dodatkowe kryteria stopu

- $|f(x_{x+1})| \leq \eta$
- $k > max_{iter}$



Metoda Newtona

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}, \qquad k = 0, 1, 2, \ldots$$

x_0 - dane początkowe przybliżenie zera r funkcji f.
Następne przybliżenie zera r funkcji f, czyli przybliżenie x_1, wyznaczamy z powyższego wzoru dla $k = 1$.

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

itd.

Przykład obliczeń trzema metodmi dla $f(x) = x^2 - 4\sin(x)$

zobacz:

Michael T. Heath, *Scientific Computing. An Introductory Survey*, McGraw-Hill, New York 2002

http://web.engr.illinois.edu/ heath/scicomp/notes/index.html

zob. też M.T. Heath:
http://web.engr.illinois.edu/ heath/iem/

Metoda bisekcji

$$a_0 = 1, \quad b_0 = 3$$

a	$f(a)$	b	$f(b)$
1	-2.365	3	8.43
1	-2.365	2	0.36
1.5	-1.79	2	0.36
1.75	-0.87	2	0.36

Po dwudziestu iteracjach

$$a = 1.933753, \quad f(a) = -0.000\,004$$

$$b = 1.933754, \quad f(b) = 0.000\,001$$

Metoda Newtona

$$x_0 = 3$$

k	x_k	$f(x_k)$
0	3	8.43
1	2.15	1.29
2	1.95	0.108
3	1.933072	0.001152
4	1.933754	0.00000

Metoda siecznych

$$x_0 = 1, \quad x_1 = 3$$

k	x_k	$f(x_k)$
0	1	-2.36
1	3	8.43
2	1.43	-1.896
.	.	.
7	1.933757	0.000019
8	1.933754	0.00000

Schemat metody Newtona

- Dane: $x0$ (przybliżenie początkowe), max (maksymalna liczba iteracji), δ (mała liczba dodatnio - dokładność)
- for $k = 1$ to max do

$$x1 := x0 - \frac{f(x0)}{f'(x0)}$$

  if $|x1 - x0| < \delta|x1|$ then STOP
  $x0 := x1$
  end for
- Wynik: $x1$ (wyznaczone przybliżenie zera funkcji $f(x)$)

Uwaga. Powinno się jeszcze badać, czy $f'(x0) \neq 0$

Szybkość zbieżności ciągu kolejnych przybliżeń

- Mówimy, że szybkość zbieżności ciągu $x_0, x_1, x_2, \ldots$ do r jest liniowa jeśli

$$\lim_{k\to\infty} \frac{|r - x_{k+1}|}{|r - x_k|} = C = const < 1$$

- Mówimy, że szybkość zbieżności ciągu $x_0, x_1, x_2, \ldots$ do r jest nadliniowa jeśli dla pewnego dla $1 < p < 2$ mamy

$$\lim_{k\to\infty} \frac{|r - x_{k+1}|}{|r - x_k|^p} = C = const$$

- Mówimy, że szybkość zbieżności ciągu $x_0, x_1, x_2, \ldots$ do r jest kwadratowa jeśli

$$\lim_{k\to\infty} \frac{|r - x_{k+1}|}{|r - x_k|^2} = C = const$$

Wykładnik zbieżności metody iteracyjnej

Niech ciąg x_k będzie zbieżny do r. Mówimy, że ciąg jest zbieżny z wykładnikiem zbieżności co najmniej p jeśli

$$\lim_{k\to\infty} \frac{|x_{k+1} - r|}{|x_k - r|^p} = C = const \neq 0$$

Dla k dostatecznie dużego (asymptotycznie) mamy

- zbieżność liniowa

$$|x_{k+1} - r| \approx \check{c}|x_k - r|, \qquad \check{c} < 1$$

- zbieżność kwadratowa

$$|x_{k+1} - r| \approx \widetilde{c}|x_k - r|^2$$

Przykład

- (zbieżność liniowa) Jeśli $|x_k - r| = 10^{-2}, \quad \check{c} = 0.5$, to

$$|x_{k+1} - r| \approx \frac{1}{2} \times 10^{-2}$$

- (zbieżność kwadratowa) Jeśli $|x_k - r| = 10^{-2}, \quad \widetilde{c} = 2$, to

$$|x_{k+1} - r| \approx 2 \times 10^{-4}$$

Uwagi

- Szybkość zbieżności danej metody iteracyjnej zależy od krotności wyznaczanego zera.
- Na przykład, dla zera pojedynczego metoda Newtona jest zbieżna kwadratowo ($p = 2$). Dla zera podwójnego jest zbieżna tylko liniowo ($p = 1$).

Metoda Newtona - przykład

zero pojedyncze i zero podwójne

	$f(x) = x^2 - 1,$	$f(x) = x^2 - 2x + 1$
k	x_k	x_k
0	2.0	2.0
1	1.25	1.5
2	1.025	1.25
3	1.0003	1.125
4	1.00000005	1.0625
5	1.0	1.03125

Metoda Newtona (stycznych)

x_0 jest dane
(początkowe przybliżenie zera r funkcji f)

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}, \qquad k = 0, 1, 2, \ldots$$

Geometryczna interpretacja

Przybliżenie x_{k+1} zera r funkcji $f(x)$ jest punktem przecięcia osi $0x$ przez prostą styczną do wykresu funkcji $f(x)$ w punkcie x_k.

Styczna $y = ax + b$ do wykresu funkcji $y = f(x)$ w punkcie x_k spełnia dwa warunki

- $ax_k + b = f(x_k)$ (zgodność wartości funkcji w punkcie x_k)
- $(ax + b)' = a = f'(x_k)$ (zgodność wartości pochodnych w punkcie x_k)

Wobec tego

$$b = f(x_k) - f'(x_k)x_k.$$

Równanie stycznej

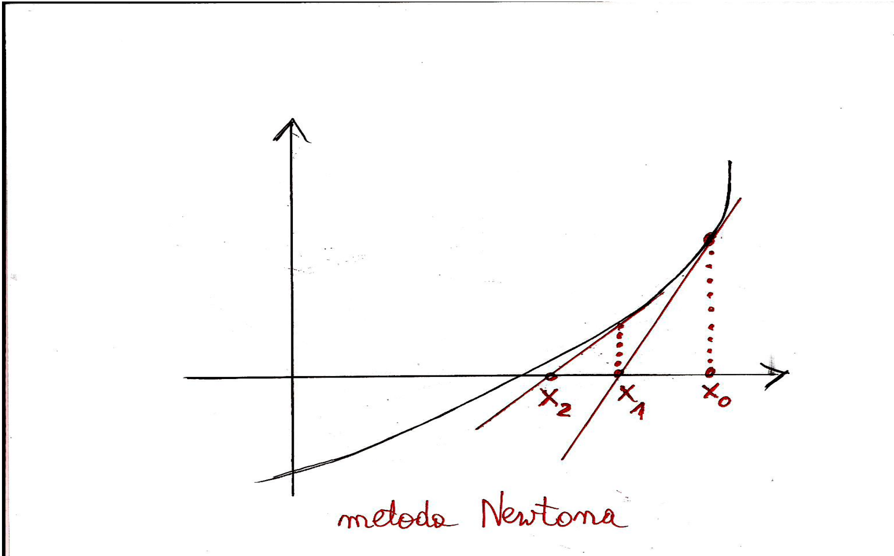
$$y = f'(x_k)(x - x_k) + f(x_k)$$

Punkt x_{k+1} przecięcia stycznej z osią $0x$ obliczamy z równania:

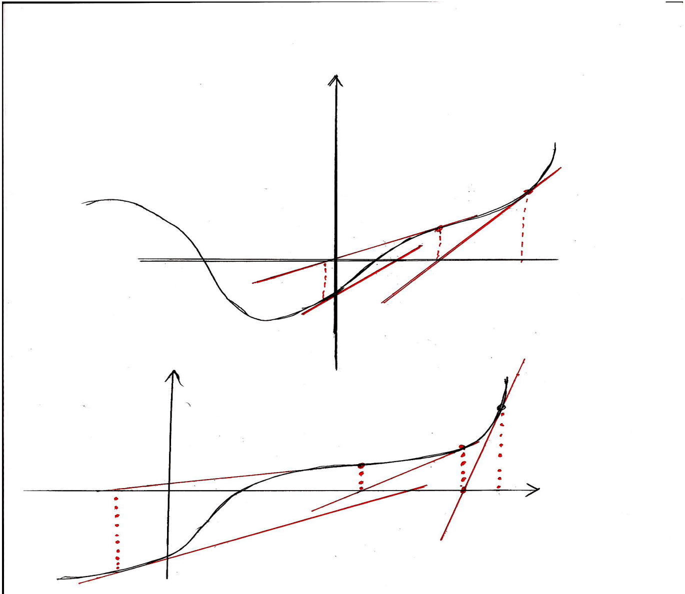
$$f'(x_k)(x - x_k) + f(x_k) = 0$$

Stąd otrzymujemy $x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}$

Metoda Newtona



Metoda Newtona



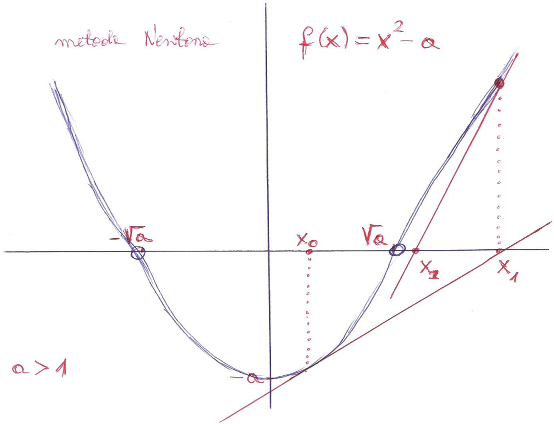
Przykład

Zastosowanie metody Newtona do obliczania $\sqrt{a}, \quad a > 0$

$$f(x) = x^2 - a, \quad f(r) = 0, \quad r = \pm\sqrt{a}$$

x_0 - dane

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)} = x_k - \frac{x_k^2 - a}{2x_k} = \frac{1}{2}\left(x_k + \frac{a}{x_k}\right)$$


metoda Newtona
f(x) = x² − a
−√a
x₀
√a
x₂
x₁
−a
a > 1

- W ogólnym przypadku metoda Newtona nie jest zbieżna globalnie (czyli dla dowolnego przybliżenia początkowego x_0).
- Zbieżność lokalna - dla x_0 dostatecznie bliskiego zera r funkcji $f(x)$.

Błąd - metoda Newtona

Niech r będzie zerem pojedynczym funkcji $f(x)$, która ma ciągłą pochodną drugiego rzędu. Niech metoda Newtona będzie zbieżna do r dla przybliżenia początkowego x_0. Wówczas

$$x_{k+1} - r = \frac{1}{2}\,\frac{f''(\xi_k)}{f'(x_k)}\,(x_k - r)^2$$

$$\approx \frac{1}{2}\,\frac{f''(r)}{f'(r)}\,(x_k - r)^2$$

Metoda siecznych

x_0, x_1 dwa początkowe przybliżenia zera r funkcji f

$$x_{k+1} = x_k - \frac{x_k - x_{k-1}}{f(x_k) - f(x_{k-1})} f(x_k),$$

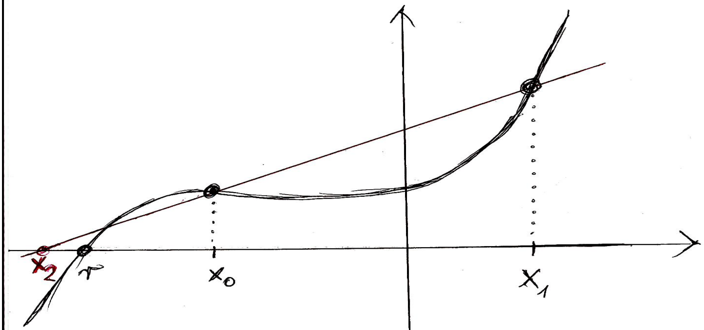
$$k = 1, 2, 3, \ldots$$

Geometryczna interpretacja metody siecznych

Niech x_0 i x_1 będą dwoma początkowymi przybliżeniami zera r funkcji $f(x)$. Wyznaczone metodą siecznych następne przybliżenie x_2 zera r jest punktem przecięcia osi $0x$ przez sieczną przechodzącą przez punkty

$$(x_0, f(x_0)) \qquad (x_1, f(x_1))$$

równanie siecznej - zob. wykład o interpolacji



metoda siecznych

Równanie siecznej przez punkty $(x_0, f(x_0))$ i $(x_1, f(x_1))$

$$y = f(x_0) + (x - x_0)\frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}$$

x_2 - punkt przecięcia siecznej z osią $0x$

$$f(x_0) + (x - x_0)\frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0} = 0 \Longrightarrow$$

$$x_2 = x_1 - \frac{x_1 - x_0}{f(x_1) - f(x_0)} f(x_1),$$

Porównanie

- Metoda bisekcji jest zbieżna liniowo. Wykładnik zbieżności $p = 1$.
- Dla zera pojedyńczego metoda Newtona jest zbieżna kwadratowo, wykładnik zbieżności
$$p = 2.$$
- Dla zera podwójnego zbieżność metody Newtona jest tylko liniowa, $p = 1$.
- Dla zera pojedyńczego metoda siecznych jest zbieżna ponadliniowo, wykładnik zbieżności
$$p = \frac{1+\sqrt{5}}{2} \approx 1.62.$$

Dodatkowy przykład dla metody Newtona

- Do którego z pierwiastków $0, \pm 1$ jest zbieżna metoda Newtona zastosowana do równania $x^3 - x = 0$ w zależności od wyboru przybliżenia początkowego?
- Wykonaj obliczenia metodą Newtona dla kilku początkowych przybliżeń x_0.
- Narysuj wykres wielomianu.

Rozwiązanie zadania

$$f(x) = w(x) = x^3 - x = x(x^2 - 1)$$

$$w(0) = 0, \quad w(1) = 0, \quad w(-1) = 0$$

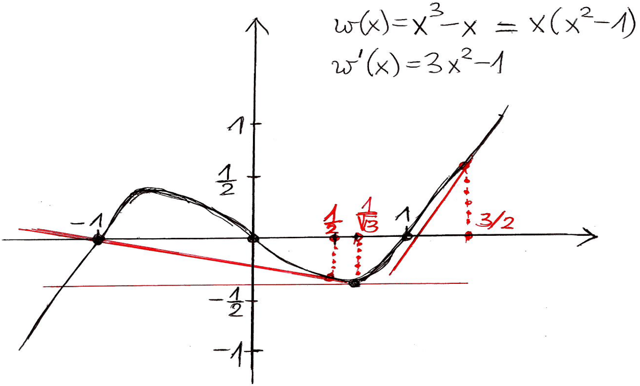
ekstrema

$$w'(x) = 3x^2 - 1 = 0 \quad \Longrightarrow x = \pm\frac{1}{\sqrt{3}} \approx \pm 0.57735$$

$$w\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right) = -\frac{2}{3\sqrt{3}} \approx -0.3849$$

granice

$$\lim_{x\to\infty} w(x) = \infty, \quad \lim_{x\to-\infty} w(x) = -\infty$$



$$w'(x) = 0 \Rightarrow x = \frac{1}{\sqrt{3}} \approx 0.57735$$

$$w\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right) = \frac{1}{\sqrt{3}}\left(\frac{1}{3} - 1\right) = -\frac{2}{3\sqrt{3}} \approx -0.3849$$

$$f(x) = x^3 - x$$

Metoda Newtona

$$x_{k+1} = x_k - \frac{x_k^3 - x_k}{3x_k^2 - 1} = \frac{2x_k^3}{3x_k^2 - 1}$$

$$x^3 - x = 0$$

Z rysunku wynika, że metoda Newtona

- jest zbieżna do zera $r = 1$ dla $x_0 > \frac{1}{\sqrt{3}}$
- jest zbieżna do zera $r = -1$ dla $x_0 < -\frac{1}{\sqrt{3}}$

Dla $x_0 = 1/\sqrt{5}$ metoda Newtona zapętla się, bo wtedy

$$x_1 = -x_0, \quad x_2 = x_0$$

więcej **zobacz** E. Stożek, *Metody Numeryczne w Zadaniach*, Wyd. Uniw. Łódzkiego, 1994.

$$\frac{1}{\sqrt{5}} \approx 0.44721, \quad \frac{1}{\sqrt{3}} \approx 0.57735$$

Obliczenia wykonane metodą Newtona dla czterech przybliżeń początkowych x_0

- $x_0 = 0 \Longrightarrow x_1 = 0$
- $x_0 = 1/\sqrt{3}$ - nie ma zbieżności (styczna równoległa do osi $0x$)
- $x_0 = 1/2$

$$w\left(\frac{1}{2}\right) = -\frac{3}{8}, \quad w'\left(\frac{1}{2}\right) = -\frac{1}{4}, \quad x_1 = x_0 - \frac{w(x_0)}{w'(x_0)} = -1$$

- $x_0 = 3/2$

$$w\left(\frac{3}{2}\right) = \frac{25}{8}, \quad w'\left(\frac{3}{2}\right) = \frac{23}{4}$$

$$x_1 = x_0 - \frac{w(x_0)}{w'(x_0)} = \frac{3}{2} - \frac{\frac{25}{8}}{\frac{23}{4}} = 0.95652$$

Twierdzenia o zbieżności metody Newtona

Przykład twierdzenia o lokalnej zbieżności metody Newtona

Twierdzenie. *Jeśli istnieje przedział* $[a, b]$ *taki, że*

(a) $f(a)f(b) < 0$
(b) druga pochodna $f"(x)$ *nie zmienia znaku w przedziale* $[a, b]$
(c) styczne do wykresu funkcji $f(x)$ *poprowadzone na końcach przedział* $[a, b]$ *przecinają oś* $0x$ *w punktach należących do przedziału* $[a, b]$,

to funkcja $f(x)$ *ma jednoznaczne zero* r *w przedziale* (a, b) *i metoda Newtona jest zbieżna do* r *dla dowolonego* $x_0 \in [a, b]$.

Inny wariant twierdzenia o lokalnej zbieżności metody Newtona

Twierdzenie. *Jeśli istnieje przedział* $[a, b]$ *taki, że*

(a) $f(a)f(b) < 0$
(b) *pierwsza pochodna* $f'(x) \neq 0$ *i druga pochodna* $f"(x)$ *nie zmienia znaku w przedziale* $[a, b]$
(c)

$$\frac{|f(a)|}{|f'(a)|} < b - a, \quad \frac{|f(b)|}{|f'(b)|} < b - a,$$

to funkcja $f(x)$ *ma jednoznaczne zero* r *w przedziale* (a, b) *i metoda Newtona jest zbieżna do* r *dla dowolnego* $x_0 \in [a, b]$.

Przykład twierdzenia o globalnej zbieżności metody Newtona

Twierdzenie. *Niech rosnąca i wypukła funkcja* f *ma drugą pochodną ciągłą wszędzie i niech ma zero. Wówczas metoda Newtona jest zbieżna globalnie, tzn. dla dowolnego przybliżenia początkowego* x_0.

Podsumowanie

- Graficzna lokalizacja zer funkcji.
- Metoda bisekcji.
- Poznane pojęcia: metoda iteracyjna, szybkość zbieżności, wykładnik zbieżności, kryteria stopu.
- Geometryczne interpretacje metody Newtona i metody siecznych.
- Twierdzenie o zbieżności metody Newtona (nieobowiąkowe).
- Schematy metod bisekcji, Newtona i siecznych.

Literatura:
1. D. Kincaid, W. Cheney, *Analiza Numeryczna*, WNT Warszawa 2006.
2. G. Dahlquist, A. Björk, *Metody Numeryczne*, PWN, Warszawa 1983.