

Obliczenia naukowe

Wykład nr 3

Paweł Zieliński

Katedra Podstaw Informatyki,
Wydział Informatyki i Telekomunikacji,
Politechnika Wrocławska



Literatura

Literatura podstawowa

- [1] D. Kincaid, W. Cheney, *Analiza numeryczna*, WNT, 2005.
- [2] M. T. Heath, *Scientific Computing, An Introductory Survey*, The McGraw-Hill Companies, 1997.
- [3] A. Bjorck, G. Dahlquist, *Metody numeryczne*, PWN, 1987.
- [4] M. Dryja, J. i M. Jankowscy, *Przegląd metod i algorytmów numerycznych*, cz. 2, WNT, 1988.
- [5] Z. Fortuna, B. Macukow, J. Wąsowski, *Metody numeryczne*, WNT 1998.
- [6] J. i M. Jankowscy, *Przegląd metod i algorytmów numerycznych*, cz. 1, WNT, 1988.
- [7] J. Stoer, R. Bulirsch, *Wstęp do analizy numerycznej*, PWN, 1987.

Literatura uzupełniająca

- [8] Kiełbasiński, H. Schwetlick, *Numeryczna algebra liniowa*, WNT, 1993.

Znaczna część wykładu została przygotowana na podstawie książki [1].



Rozwiązywanie równań nieliniowych

Dana jest funkcja $f : \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}$. Na przykład $f(x) = x - \operatorname{tg} x$. Szukamy takiego $r \in \mathbb{R}$, dla którego

$$f(r) = 0.$$

Będziemy rozważać *metody iteracyjne*. Metody te konstruują ciąg przybliżeń $x_0, x_1, x_2, \dots$ według reguły

$$x_{n+1} := \Phi(x_n),$$

taki, że

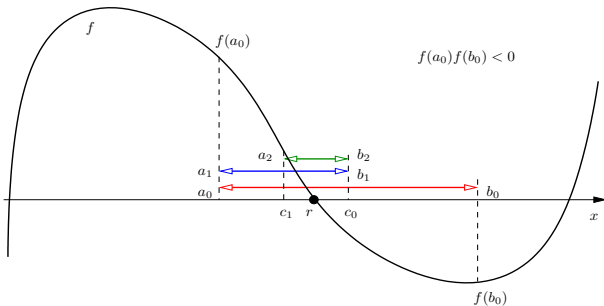
$$\lim_{n \rightarrow \infty} x_n = r.$$

Mówimy o metodzie, że jest *zbieżna globalnie* jeśli konstruowany ciąg przybliżeń $\{x_n\}$ jest zbieżny do r przy dowolnych przybliżeniach początkowych.



Metoda bisekcji (połowienia)

Założenia: f jest funkcją ciągłą w $[a, b]$ i $f(a)f(b) < 0$ (f zmienia znak).



$$c_n = \frac{1}{2}(a_n + b_n) \quad (n \geq 0).$$

Warunek końca: $|b_n - a_n| \leq \delta$, $|f(c_n)| \leq \epsilon$.



Metoda bisekcji (połowienia)

Dane: $a, b, M, \delta, \epsilon$

Wyniki: $k, \tilde{r}, f(\tilde{r})$

$u \leftarrow f(a); v \leftarrow f(b);$

$e \leftarrow b - a;$

if $\text{sgn}(u) = \text{sgn}(v)$ **then**

return error;

end if

for $k \leftarrow 1$ to M **do**

$e \leftarrow e/2;$

$c \leftarrow a + e;$

$w \leftarrow f(c);$

if $|e| < \delta$ **or** $|w| < \epsilon$ **then**

return k, c, w

end if

if $\text{sgn}(w) \neq \text{sgn}(u)$ **then**

$b \leftarrow c; v \leftarrow w;$

else

$a \leftarrow c; u \leftarrow w;$

end if

end for



Metoda bisekcji (połowienia)

Twierdzenie 1 (O zbieżności metody bisekcji)

Niech $[a_0, b_0], [a_1, b_2], \dots, [a_n, b_n], \dots$ będzie ciągiem przedziałów konstruowanych przez metodę bisekcji. Wówczas istnieją granice $\lim_{n \rightarrow \infty} a_n$, $\lim_{n \rightarrow \infty} b_n$ i są sobie równe, reprezentujące zero r funkcji f . Jeśli $r = \lim_{n \rightarrow \infty} c_n$ i $c_n = \frac{1}{2}(a_n + b_n)$, to

$$|r - c_n| \leq 2^{-(n+1)}(b_0 - a_0).$$

Przykład

Niech $[50, 63]$ będzie przedziałem, w którym f ma pierwiastek. Jaka jest liczba iteracji metody bisekcji, aby wyznaczyć pierwiastek z błędem względnym 10^{-12} ?

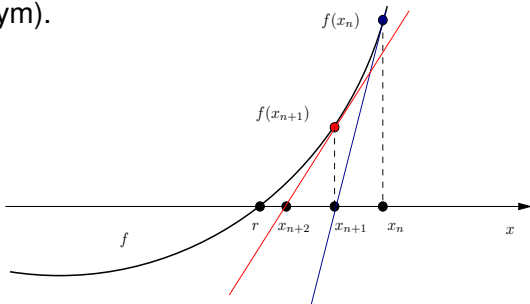
$$\frac{|r - c_n|}{|r|} \leq \frac{|r - c_n|}{50} \leq 2^{-(n+1)} \frac{13}{50} \leq 10^{-12}.$$

Rozwiązując powyższą nierówność otrzymujemy $n \geq 37$.



Metoda Newtona (metoda stycznych)

Założenia: $f \in C^2[a, b]$, $f'(r) \neq 0$ (r jest pierwiastkiem jednokrotnym).



$$f(x) = f(x_n) + f'(x_n)(x - x_n) + \mathcal{O}((x - x_n)^2) \quad \text{sz. Taylora}$$

$$f(x) \approx f(x_n) + f'(x_n)(x - x_n), \quad \text{linearyzacja}$$

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)} = x_n + h_n \quad (n \geq 0), \quad x_0 \text{ dane.}$$

Warunek końca: $|x_{n+1} - x_n| \leq \delta$, $|f(x_{n+1})| \leq \epsilon$.



Metoda Newtona (metoda stycznych)

Dane: x_0, M, δ, ϵ

Wyniki: $k, \tilde{r}, f(\tilde{r})$

$v \leftarrow f(x_0);$

if $|v| < \epsilon$ **then**

return 0, x_0, v ;

end if

for $k \leftarrow 1$ to M **do**

$x_1 \leftarrow x_0 - v/f'(x_0);$

$v \leftarrow f(x_1);$

if $|x_1 - x_0| < \delta$ **or** $|v| < \epsilon$ **then**

return k, x_1, v ;

end if

$x_0 \leftarrow x_1;$

end for

Powyższa algorytm korzysta z funkcji liczących $f(x)$ i $f'(x)$.



Metoda Newtona (metoda stycznych)

Definicja Niech $\{x_n\}$ będzie ciągiem zbieżnym do r . Jeśli istnieją stałe $0 \leq C < \infty$, $\alpha \geq 1$ i liczba naturalna N , takie, że

$$|x_{n+1} - r| \leq C|x_n - r|^\alpha \quad (n \geq N),$$

to mówimy, że wykładnik zbieżności jest rzędu α .

$\alpha = 1$ — zbieżność liniowa, $C < 1$.

$\alpha = 2$ — zbieżność kwadratowa.

$\alpha = 3$ — zbieżność sześcienna.

Twierdzenie 2 (O lokalnej zbieżności metody Newtona)

Niech $f \in C^2[a, b]$ i r będzie jednokrotnym pierwiastkiem f .

Wtedy istnieje otoczenie r i stała C i jeśli przybliżenie początkowe x_0 należy do otoczenia r , to ciąg konstruowanych przez metodę Newtona przybliżeń $\{x_n\}$ spełnia

$$|x_{n+1} - r| \leq |C(x_n - r)|^2.$$

Ponadto $\lim_{n \rightarrow \infty} x_n = r$.



Metoda Newtona (metoda stycznych)

Przykład

$f(x) = (x/2)^2 + \sin x$. Wyznaczyć metodą Newtona zero f w przedziale $[1, 5, 2]$ z dokładnością $\delta = 0.5_{10} - 5$. $x_0 = 1.5$.

n	x_n	h_n	$ x_n - r $
0	1.5	0.6439	-0.43374
1	2.14039	-0.18838	0.26644
2	1.95201	-0.018808	0.0111825
3	1.93393	-0.00018	0.00018
4	1.933375	$< 5_{10} - 6$	$< 5_{10} - 6$

Metoda bisekcji wykonała 17 iteracji dla $a = 1.5$ i $b = 2$.

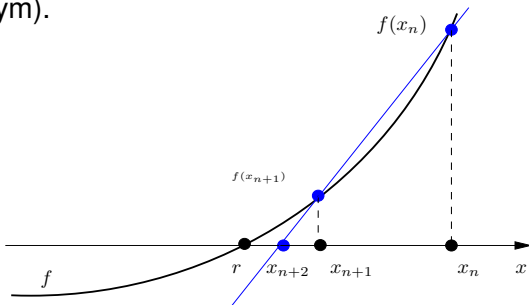
Twierdzenie 3

Niech $[a, b]$ będzie przedziałem takim, że $f(a)$ i $f(b)$ mają przeciwne znaki, $f''(x)$ jest ciągła i nie zmienia znaku na $[a, b]$, styczne do krzywej $f(x)$ poprowadzone w punktach o odciętych a i b przecinają OX wewnątrz przedziału $[a, b]$, wówczas f ma dokładnie jedno zero w $[a, b]$ i metoda Newtona jest zbieżna do r dla dowolnego punktu startowego $x_0 \in [a, b]$.



Metoda siecznych

Założenia: $f \in C^2[a, b]$, $f'(r) \neq 0$ (r jest pierwiastkiem jednokrotnym).



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

$$x_{n+1} = x_n - \frac{x_n - x_{n-1}}{f(x_n) - f(x_{n-1})} f(x_n) = x_n + h_n \quad (n \geq 1), \quad x_0, x_1 \text{ dane.}$$

Warunek końca: $|x_{n+1} - x_n| \leq \delta$, $|f(x_{n+1})| \leq \epsilon$.

Metoda siecznych

Dane: $a, b, M, \delta, \epsilon$

Wyniki: $k, \tilde{r}, f(\tilde{r})$

$fa \leftarrow f(a); fb \leftarrow f(b);$

for $k \leftarrow 1$ to M **do**

if $|fa| > |fb|$ **then**

$a \leftrightarrow b; fa \leftrightarrow fb;$

end if

$s \leftarrow (b - a)/(fb - fa);$

$b \leftarrow a; fb \leftarrow fa;$

$a \leftarrow a - fa * s;$

$fa \leftarrow f(a);$

if $|b - a| < \delta$ **or** $|fa| < \epsilon$ **then**

return $k, a, fa;$

end if

end for

Powyższa algorytm korzysta z funkcji liczącej $f(x)$.



Metoda siecznych

Twierdzenie 4 (O lokalnej zbieżności metody siecznych)

Niech $f \in C^2[a, b]$ i r będzie jednokrotnym pierwiastkiem f .

Wtedy istnieje otoczenie r i stała K i jeśli przybliżenia początkowe x_0, x_1 należą do otoczenia r , to ciąg konstruowanych przez metodę siecznych przybliżeń $\{x_n\}$ spełnia

$$|x_{n+1} - r| \leq |K(x_n - r)|^{(1+\sqrt{5})/2}.$$

Ponadto $\lim_{n \rightarrow \infty} x_n = r$.



Podsumowanie

metody	zbieżność	wykładnik α	uwagi
bisekcji	globalna	1	stosować hybrydowo
siecznych	lokalna	$(1 + \sqrt{5})/2 \approx 1.618\dots$	
Newtona	lokalna	2	konieczność liczenia $f'(x)$



Dowód Twierdzenia 1

Końce generowanych przedziałów spełniają zależność

$$\begin{aligned}a_0 &\leq a_1 \leq a_2 \leq \dots \leq b_0 \\ b_0 &\geq b_1 \geq b_2 \geq \dots \geq a_0 \\ b_n - a_n &= \frac{1}{2}(b_{n-1} - a_{n-1}) = 2^{-n}(b_0 - a_0)\end{aligned}$$

Ponieważ ciąg $\{a_n\}$ (odp. $\{b_n\}$) jest rosnący (odp. malejący) i ograniczony z góry (odp. dołu), więc zbieżny. Zatem

$$\lim_{n \rightarrow \infty} b_n - \lim_{n \rightarrow \infty} a_n = \lim_{n \rightarrow \infty} 2^{-n}(b_0 - a_0) = 0$$

Stąd $\lim_{n \rightarrow \infty} b_n = \lim_{n \rightarrow \infty} a_n = r$. Przechodząc do granicy w nierówności $0 \geq f(a_n)f(b_n)$, otrzymujemy $0 \geq [f(r)]^2$. Co implikuje $f(r) = 0$ (zbieżność). Niech $[a_n, b_n]$ będzie przedziałem wygenerowanym przez metodę bisekcji. Jeśli warunek końca jest już spełniony, oczywiście $r \in [a_n, b_n]$, wówczas najlepszym przybliżeniem pierwiastka r jest środek przedziału $c_n = (a_n + b_n)/2$. Błąd możemy oszacować następująco:

$$|r - c_n| \leq \frac{1}{2}(b_n - a_n) = 2^{-(n+1)}(b_0 - a_0) \quad \square$$



Dowód Twierdzenia 2

(wykładnik zbieżności) Przez błąd rozumiemy wielkość $e_n = x_n - r$.

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

Rozwijamy f w szereg Taylora w otoczeniu x_n

$$f(r) = f(x_n) + f'(x_n)(r - x_n) + \frac{1}{2} f''(\zeta_n)(r - x_n)^2 = f(x_n) - f'(x_n)e_n + \frac{1}{2} f''(\zeta_n)e_n^2$$

ζ_n jest liczbą leżącą między r i x_n .

$$0 = f(r) = f(x_n) - f'(x_n)e_n + \frac{1}{2} f''(\zeta_n)e_n^2$$

Przekształcając powyższe równanie otrzymujemy

$$f'(x_n)e_n - f(x_n) = \frac{1}{2} f''(\zeta_n)e_n^2$$

$$e_{n+1} = \frac{e_n f'(x_n) - f(x_n)}{f'(x_n)} = \frac{1}{2} \frac{f''(\zeta_n)}{f'(x_n)} e_n^2 \approx \frac{1}{2} \frac{f''(r)}{f'(r)} e_n^2 = C e_n^2 \text{ (zakładamy, że } x_n \rightarrow r)$$



Dowód Twierdzenia 2 ...

(zbieżność) Zdefiniujmy $c(\delta)$ zależne od δ

$$c(\delta) = \frac{1}{2} \max_{|x-r| \leq \delta} |f''(x)| / \min_{|x-r| \leq \delta} |f'(x)| \quad (\delta > 0).$$

Wyberzmy δ (zmniejszając wartość), takie, że $\delta c(\delta) < 1$. Można to zrobić, ponieważ jak $\delta \rightarrow 0$, $c(\delta) \rightarrow \frac{1}{2} \frac{|f''(r)|}{|f'(r)|}$, to $\delta c(\delta) \rightarrow 0$. Ustalmy δ i połóżmy $\rho = \delta c(\delta)$. Załóżmy, że x_0 jest punktem startowym metody Newtona spełniającym $|x_0 - r| \leq \delta$. Wtedy $|e_0| \leq \delta$ i $|\zeta_0 - r| \leq \delta$. Stąd

$$\frac{1}{2} \left| \frac{f''(\zeta_0)}{f'(\zeta_0)} \right| \leq c(\delta).$$

Pokażemy, że kolejne przybliżenie x_1 leży w otoczeniu r .

$$|x_1 - r| = |e_1| \leq e_0^2 c(\delta) = |e_0| |e_0| c(\delta) \leq |e_0| \delta c(\delta) = |e_0| \rho < |e_0| \leq \delta.$$

Stąd
$$|e_1| \leq \rho |e_0|.$$

Uogólniając
$$|e_n| \leq \rho |e_{n-1}| \leq \rho^2 |e_{n-2}| \leq \dots \leq \rho^n |e_0|.$$

Z faktu, że $\rho < 1$ wynika $\lim_{n \rightarrow \infty} \rho^n = 0$, w konsekwencji $\lim_{n \rightarrow \infty} e_n = 0$.



Dowód Twierdzenia 4

(wykładnik zbieżności) Przez błąd rozumiemy wielkość $e_n = x_n - r$.

$$e_{n+1} = x_{n+1} - r = x_n - \frac{f(x_n)}{\frac{f(x_n) - f(x_{n-1})}{x_n - x_{n-1}}} - r = e_n - \frac{f(x_n)}{\frac{f(x_n) - f(x_{n-1})}{x_n - x_{n-1}}} = \frac{e_n \frac{f(x_n) - f(x_{n-1})}{x_n - x_{n-1}} - f(x_n)}{\frac{f(x_n) - f(x_{n-1})}{x_n - x_{n-1}}}.$$

Funkcję f można przedstawić za pomocą wzoru interpolacyjnego Newtona

$$\begin{aligned} f(r) &= f(x_n) + \frac{f(x_n) - f(x_{n-1})}{x_n - x_{n-1}}(r - x_n) + \frac{1}{2}f''(\zeta_n)(r - x_{n-1})(r - x_n) \\ &= f(x_n) - \frac{f(x_n) - f(x_{n-1})}{x_n - x_{n-1}}e_n + \frac{1}{2}f''(\zeta_n)e_{n-1}e_n \end{aligned}$$

ζ_n jest liczbą leżącą między x_{n-1} i x_n .

$$0 = f(r) = f(x_n) - \frac{f(x_n) - f(x_{n-1})}{x_n - x_{n-1}}e_n + \frac{1}{2}f''(\zeta_n)e_{n-1}e_n$$

Przekształcając powyższe równanie otrzymujemy

$$\frac{f(x_n) - f(x_{n-1})}{x_n - x_{n-1}}e_n - f(x_n) = \frac{1}{2}f''(\zeta_n)e_{n-1}e_n$$



Dowód Twierdzenia 4 ...

Z twierdzenia o wartości średniej otrzymujemy

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

η_n jest liczbą leżącą między x_{n-1} i x_n .

$$e_{n+1} = \frac{e_n \frac{f(x_n) - f(x_{n-1})}{x_n - x_{n-1}} - f(x_n)}{\frac{f(x_n) - f(x_{n-1})}{x_n - x_{n-1}}} = \frac{1}{2} \frac{f''(\zeta_n)}{f'(\eta_n)} e_{n-1} e_n.$$

Dla dostatecznie dużych n jest $\zeta_n \approx r$, $\eta_n \approx r$.

$$|e_{n+1}| \approx \frac{1}{2} \left| \frac{f''(r)}{f'(r)} \right| |e_{n-1}| |e_n| = C |e_{n-1}| |e_n|.$$

Twierdzimy, że

$$|e_{n+1}| \approx K |e_n|^p$$

$|e_n| \approx K |e_{n-1}|^p$. Stąd $|e_{n-1}| \approx |e_n|^{1/p} K^{-1/p}$.

$$|e_{n+1}| \approx C |e_{n-1}| |e_n| \approx C |e_n| |e_n|^{1/p} K^{-1/p} = C |e_n|^{1+1/p} K^{-1/p}.$$

Przyrównując stronami

$$K |e_n|^p \approx C |e_n|^{1+1/p} K^{-1/p}$$

Po pogrupowaniu otrzymujemy

$$K^{1+1/p} |e_n|^p \approx C |e_n|^{1+1/p}$$



Dowód Twierdzenia 4 ...

Z powyższej równości dostajemy $p = 1 + 1/p$. Dodatnim pierwiastkiem równania jest $p = (1 + \sqrt{5})/2$. Wyznamy K z równania $K^{1+1/p} = C$. Z faktu, że $1 + 1/p = p$. Otrzymujemy równanie $K^p = C$. Ostatecznie $K = C^{1/p}$ i

$$|e_{n+1}| \leq K|e_n|^{(1+\sqrt{5})/2}.$$

(zbieżność) Jak dla metody Newtona.



Metoda bisekcji jest zbieżna liniowo

Niech r będzie zerem funkcji, $f(r) = 0$.

Metoda bisekcji generuje ciąg przybliżeń (zob. Twierdzenie 1):

$$c_0, c_1, c_2, \dots \quad \lim_{n \rightarrow \infty} c_n = r,$$

gdzie $c_n = \frac{a_n + b_n}{2}$.

Ponadto

$$|b_{n+1} - a_{n+1}| = \frac{1}{2}|b_n - a_n|, \quad r \in [a_n, b_n].$$

Stąd w najgorszym przypadku:

$$|e_{n+1}| = |c_{n+1} - r| \approx \frac{1}{2}|c_n - r| = \frac{1}{2}|c_n - r|^\alpha = \frac{1}{2}|e_n|^\alpha,$$

gdzie $\alpha = 1$, $C = \frac{1}{2} < 1$.

Zatem metoda jest zbieżna liniowo.

