Εισαγωγή στην Αριθμητική Ανάλυση

Σταμάτης Σταματιάδης
stamatis@materials.uoc.gr

Τμήμα Επιστήμης και Τεχνολογίας Υλικών,
Πανεπιστήμιο Κρήτης

ΤΡΙΤΗ ΔΙΑΛΕΞΗ

Μέθοδος Müller για την επίλυση της $f(x) = 0$

- Η μέθοδος προσεγγίζει τη συνάρτηση με *παραβολή* (εξίσωση της μορφής $y = ax^2 + bx + c$).
- Χρειάζεται *τρία* σημεία $(x_i, f(x_i))$ για τον προσδιορισμό της καμπύλης, δηλαδή για τον προσδιορισμό των τριών συντελεστών της. Οι τιμές x_0, x_1, x_2 που επιλέγουμε θεωρούνται οι τρεις πρώτες προσεγγίσεις στη ρίζα.
- Ως αποτέλεσμα της μεθόδου θεωρείται η ρίζα της παραβολής που είναι πιο κοντά στην προηγούμενη προσέγγιση. Είναι η προσέγγιση x_3.
- Επαναλαμβάνουμε τη διαδικασία για τα σημεία x_1, x_2, x_3 ώστε να υπολογίσουμε μια ακόμα καλύτερη προσέγγιση (τη x_4) κοκ.
- Η μέθοδος Müller έχει τάξη σύγκλισης σε απλή ρίζα, $\alpha \approx 1.84$.

Αλγόριθμος επίλυσης της $f(x) = 0$ με τη μέθοδο Müller

1. Επιλέγουμε τρεις διαφορετικές τιμές x_0, x_1, x_2 στην περιοχή της αναζητούμενης ρίζας. Τα σημεία $(x_i, f(x_i))$ δεν πρέπει να ανήκουν στην ίδια ευθεία.
2. Ορίζουμε τις ποσότητες

$$w_0 = \frac{f(x_2) - f(x_0)}{x_2 - x_0} \qquad w_1 = \frac{f(x_2) - f(x_1)}{x_2 - x_1}$$
$$a = \frac{w_1 - w_0}{x_1 - x_0}\ , \quad b = w_0 + a(x_2 - x_0)\ , \quad c = f(x_2)\ .$$

3. Η επόμενη προσέγγιση της ρίζας δίνεται από τη σχέση

$$x_3 = x_2 - \frac{2c}{d}\ ,$$

όπου d ο, εν γένει *μιγαδικός*, αριθμός που έχει το μεγαλύτερο μέτρο μεταξύ των $b + \sqrt{b^2 - 4ac}$, $b - \sqrt{b^2 - 4ac}$.

4. Αν η νέα προσέγγιση είναι ικανοποιητική, πηγαίνουμε στο βήμα 6.
5. Θέτουμε $x_0 \leftarrow x_1$, $x_1 \leftarrow x_2$, $x_2 \leftarrow x_3$. Επαναλαμβάνουμε τη διαδικασία από το βήμα 2.
6. Τέλος.

Προσέξτε ότι όλες οι μεταβλητές είναι μιγαδικές.

Σταθερό σημείο συνάρτησης (1/3)

Ορισμός

Μια συνάρτηση $g(x)$ λέμε ότι έχει σταθερό σημείο στο διάστημα $[a, b]$ αν υπάρχει $\varrho \in [a, b]$ ώστε $g(\varrho) = \varrho$. Το ϱ είναι το σταθερό σημείο.

Σταθερό σημείο συνάρτησης (1/3)

Ορισμός

Μια συνάρτηση $g(x)$ λέμε ότι έχει σταθερό σημείο στο διάστημα $[a,b]$ αν υπάρχει $\varrho \in [a,b]$ ώστε $g(\varrho) = \varrho$. Το ϱ είναι το σταθερό σημείο.

Κριτήριο ύπαρξης σταθερού σημείου

Έστω $g(x)$ συνεχής συνάρτηση στο $[a,b]$, με $a \leq g(x) \leq b$, $\forall x \in [a,b]$. Τότε η $g(x)$ έχει τουλάχιστον ένα σταθερό σημείο στο $[a,b]$.

Απόδειξη

- Ισχύει $g(a) \geq a$, $g(b) \leq b$.
- Ορίζουμε τη συνεχή συνάρτηση $h(x) = g(x) - x$. Τότε $h(a) \geq 0$, $h(b) \leq 0$.
- Το θεώρημα Bolzano εξασφαλίζει ότι υπάρχει τουλάχιστον ένα $\varrho \in [a,b]$ ώστε $h(\varrho) = g(\varrho) - \varrho = 0$.

Σταθερό σημείο συνάρτησης (1/3)

Ορισμός

Μια συνάρτηση $g(x)$ λέμε ότι έχει σταθερό σημείο στο διάστημα $[a, b]$ αν υπάρχει $\varrho \in [a, b]$ ώστε $g(\varrho) = \varrho$. Το ϱ είναι το σταθερό σημείο.

Κριτήριο ύπαρξης σταθερού σημείου

Έστω $g(x)$ συνεχής συνάρτηση στο $[a, b]$, με $a \leq g(x) \leq b$, $\forall x \in [a, b]$. Τότε η $g(x)$ έχει τουλάχιστον ένα σταθερό σημείο στο $[a, b]$.

Απόδειξη

- Ισχύει $g(a) \geq a$, $g(b) \leq b$.
- Ορίζουμε τη συνεχή συνάρτηση $h(x) = g(x) - x$. Τότε $h(a) \geq 0$, $h(b) \leq 0$.
- Το θεώρημα Bolzano εξασφαλίζει ότι υπάρχει τουλάχιστον ένα $\varrho \in [a, b]$ ώστε $h(\varrho) = g(\varrho) - \varrho = 0$.

Μοναδικότητα σταθερού σημείου

Μπορεί να αποδειχθεί ότι το σταθερό σημείο μιας συνάρτησης $g(x)$ (η οποία ικανοποιεί το κριτήριο ύπαρξης) είναι μοναδικό αν $|g'(x)| < 1$, $\forall x \in [a, b]$. Τότε, οποιαδήποτε αρχική τιμή στο $[a, b]$ δίνει ακολουθία που συγκλίνει σε αυτό.

Σταθερό σημείο συνάρτησης: (2/3)

- Έστω μια συνάρτηση $g(x)$ που είναι συνεχής σε σημείο $\bar{x}$, δηλαδή ικανοποιεί τη σχέση

$$\lim_{x\to\bar{x}} g(x) = g(\lim_{x\to\bar{x}} x) = g(\bar{x}) \ .$$

- Επιλέγουμε μια αρχική τιμή x_0 στο πεδίο ορισμού της. Κατασκευάζουμε την ακολουθία x_0, x_1, x_2, ..., x_n ως εξής:

$$x_1 = g(x_0), \quad x_2 = g(x_1), \quad x_3 = g(x_2), \quad ,\ldots, \quad x_n = g(x_{n-1}) \ .$$

- Αν η ακολουθία συγκλίνει σε ένα σημείο ϱ, δηλαδή,

$$\lim_{n\to\infty} x_n = \varrho \ ,$$

τότε

$$\varrho \equiv \lim_{n\to\infty} x_n = \lim_{n\to\infty} g(x_{n-1}) = g(\lim_{n\to\infty} x_{n-1}) \equiv g(\varrho) \ .$$

Άρα, η $g(x)$ έχει σταθερό σημείο το $\lim_{n\to\infty} x_n = \varrho$.

Αλγόριθμος υπολογισμού σταθερού σημείου της $g(x)$

1. Θέτουμε στο x την αρχική προσέγγιση του σταθερού σημείου.
2. Ελέγχουμε αν η προσέγγιση είναι ικανοποιητική με τουλάχιστον ένα από τα κριτήρια (με ε κατάλληλα μικρή τιμή)

$$\begin{aligned} |x - g(x)| &< \varepsilon \,, \\ \left| \frac{x_i - x_{i-1}}{x_i} \right| &< \varepsilon \,, \\ |x_i - x_{i-1}| &< \varepsilon \,. \end{aligned}$$

   Αν ναι, πηγαίνουμε στο βήμα 4.
3. Θέτουμε $x \leftarrow g(x)$ και επαναλαμβάνουμε από το βήμα 2.
4. Τέλος.

Κατάλληλη μετατροπή της εξίσωσης $f(x) = 0$ σε $x = g(x)$ ανάγει το πρόβλημα εντοπισμού ρίζας της $f(x)$ σε πρόβλημα εύρεσης σταθερού σημείου της $g(x)$.

Παράδειγμα

Έστω $f(x) = x^2 - 6x + 5$. Γνωρίζουμε ότι έχει ρίζες τα 1, 5. Ας δούμε κάποιες μετατροπές της εξίσωσης $f(x) = 0$:

- $$x^2 - 6x + 5 = 0 \Leftrightarrow x = \frac{x^2 + 5}{6} \ .$$

  Παρατηρούμε ότι $|g'(x)| < 1$ όταν $-3 < x < 3$. Για αυτά τα x, $5/6 < g(x) < 14/6$, άρα $g(x) \in (-3, 3)$. Επομένως, υπάρχει μοναδικό σταθερό σημείο στο $(-3, 3)$. Οποιαδήποτε αρχική τιμή $|x| < 3$ (αλλά όχι μόνο) δίνει ακολουθία που συγκλίνει σε αυτό (στο 1). Μόνο τα ± 5 οδηγούν στη ρίζα 5. Με $|x| > 5$ αποκλίνει.

Παράδειγμα (συνέχεια)

- $$x^2 - 6x + 5 = 0 \Leftrightarrow x = \sqrt{6x-5}\,.$$

  Όταν $x > 7/3$ έχουμε $|g'(x)| < 1$ και $g(x) > 3 > 7/3$. Για οποιοδήποτε άνω όριο $b \geq 5$ του x, $g(x) \leq x \leq b$. Άρα, στο $(7/3, b]$ με $b \geq 5$, υπάρχει ένα μόνο σταθερό σημείο. Οποιαδήποτε αρχική τιμή μεγαλύτερη του $7/3$ οδηγεί στη ρίζα 5. Μόνο το 1 καταλήγει στη ρίζα 1.

Άλλες επιλογές της $g(x)$

$$\begin{aligned} g(x) &= \frac{5}{6-x}\,, \\ g(x) &= 6 - \frac{5}{x}\,, \\ g(x) &= x(x^2+6x-6)\,, \\ &\vdots \quad \vdots \end{aligned}$$

Η Μέθοδος Newton–Raphson για την επίλυση της $f(x) = 0$ βασίζεται στο *Θεώρημα Taylor*.

Θεώρημα Taylor

Έστω ότι η συνάρτηση $f(x)$, με $x \in [a, b]$, έχει παραγώγους μέχρι τάξης $n+1$ και η $f^{(n+1)}(x)$ είναι συνεχής στο $[a, b]$. Αν $x_0 \in [a, b]$, τότε υπάρχει ξ μεταξύ των x_0, x ώστε

$$\begin{aligned} f(x) &= f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \frac{f''(x_0)}{2!}(x - x_0)^2 + \cdots \\ &\quad + \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!}(x - x_0)^n + \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}(x - x_0)^{n+1} . \end{aligned}$$

Έστω ότι η $f(x)$ είναι συνεχής και διαφορίσιμη σε διάστημα $[a, b]$. Έστω ότι η ρίζα σε αυτό είναι η $\bar{x}$ και γνωρίζουμε την τιμή αυτής και των παραγώγων της σε κάποιο σημείο $x_0 \in [a, b]$. Το ανάπτυγμα Taylor της $f(\bar{x})$ είναι

$$f(\bar{x}) = f(x_0) + f'(x_0)(\bar{x} - x_0) + \frac{f''(\xi)}{2!}(\bar{x} - x_0)^2 ,$$

όπου ξ μεταξύ $\bar{x}, x_0$.
Αγνοώντας τον όρο του υπολοίπου, θεωρώντας ότι η απόσταση $|\bar{x} - x_0|$ είναι μικρή, και καθώς ισχύει ότι $f(\bar{x}) = 0$, έχουμε

$$0 \approx f(x_0) + f'(x_0)(\bar{x} - x_0) \Rightarrow \bar{x} \approx x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)} .$$

Μέθοδος Newton–Raphson (3/3)

Καταλήξαμε ότι η συνάρτηση $g(x) = x - f(x)/f'(x)$ μπορεί να παραγάγει επαναληπτικά την εξής ακολουθία διαδοχικών προσεγγίσεων στη ρίζα (αρκεί να έχουμε $f'(x_n) \neq 0$):

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}\,, \qquad n = 0, 1, 2, \ldots\ .$$

Μπορεί να αποδειχθεί ότι η ακολουθία αυτή συγκλίνει αν η $f(x)$ είναι συνεχής και τουλάχιστον δύο φορές παραγωγίσιμη στο $[a, b]$, με συνεχή τη δεύτερη παράγωγό της.

Καταλήξαμε ότι η συνάρτηση $g(x) = x - f(x)/f'(x)$ μπορεί να παραγάγει επαναληπτικά την εξής ακολουθία διαδοχικών προσεγγίσεων στη ρίζα (αρκεί να έχουμε $f'(x_n) \neq 0$):

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}\,, \qquad n = 0, 1, 2, \ldots\,.$$

Μπορεί να αποδειχθεί ότι η ακολουθία αυτή συγκλίνει αν η $f(x)$ είναι συνεχής και τουλάχιστον δύο φορές παραγωγίσιμη στο $[a, b]$, με συνεχή τη δεύτερη παράγωγό της.

Παρατηρήσεις

- σε κάθε επανάληψη πρέπει να υπολογίσουμε τις τιμές *δύο* συναρτήσεων $(f(x), f'(x))$.
- Η ακρίβεια της μεθόδου, $\varepsilon_n \equiv |x_n - \bar{x}|$, δείχνεται εύκολα ότι είναι

$$\varepsilon_{n+1} = \left|\frac{f''(\xi)}{2f'(x_n)}\right| \varepsilon_n^2\,,$$

  με ξ μεταξύ των x_n και $\bar{x}$. Επομένως, η μέθοδος είναι γενικά δευτέρης τάξης.

Ρίζα με πολλαπλότητα m

Το $\bar{x}$ είναι ρίζα της $f(x)$ με πολλαπλότητα m όταν

$$f(\bar{x}) = f'(\bar{x}) = \cdots = f^{(m-1)}(\bar{x}) = 0 \ ,$$

με $f^{(m)}(\bar{x}) \neq 0$.

Σε πολλαπλή ρίζα η μέθοδος Newton–Raphson έχει γραμμική σύγκλιση. Πώς μπορεί να επανέλθει η τετραγωνική σύγκλιση;

Α' τρόπος

Αναζητούμε ρίζα της $f^{(m-1)}(x) = 0$ καθώς σε αυτή το $\bar{x}$ είναι απλή ρίζα. Απαιτείται όμως υπολογισμός παραγώγου υψηλής τάξης.

Μέθοδοι Newton–Raphson για ρίζες με πολλαπλότητα (2/2)

Β' τρόπος

Η συνάρτηση $f(x)$ με ρίζα το $\bar{x}$, πολλαπλότητας m, πάντα μπορεί να γραφεί στη μορφή

$$f(x) = (x - \bar{x})^m g(x) \ ,$$

όπου $g(x)$ συνάρτηση για την οποία το $\bar{x}$ δεν είναι ρίζα.
Επομένως, η συνάρτηση $h_1(x) = \sqrt[m]{f(x)}$ έχει *απλή* ρίζα το $\bar{x}$.
Ο τύπος Newton–Raphson για την $h_1(x)$ έχει τετραγωνική σύγκλιση.
Καταλήγει στον επαναληπτικό τύπο

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

Γ' τρόπος

Εύκολα δείχνεται ότι η συνάρτηση $h_2(x) = f(x)/f'(x)$ έχει απλή ρίζα το $\bar{x}$.
Η εφαρμογή του τύπου Newton–Raphson καταλήγει στον

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

- Έστω ότι η συνάρτηση $f(x)$ έχει απλές ρίζες σε κάποιο διάστημα, δεν μηδενίζονται δηλαδή ταυτόχρονα οι $f(x)$, $f'(x)$. Τότε οι συναρτήσεις $f(x)$ και $g(x) = f(x)/\sqrt{|f'(x)|}$ έχουν τις ίδιες ρίζες.
- Η εφαρμογή της μεθόδου Newton–Raphson για την εύρεση ρίζας της $g(x)$ δίνει

$$x_{n+1} = x_n - \frac{g(x_n)}{g'(x_n)} = x_n - \frac{2f(x_n)f'(x_n)}{2[f'(x_n)]^2 - f(x_n)f''(x_n)} \, .$$

- Μπορεί να δειχθεί ότι η μέθοδος είναι *τρίτης τάξης*.

Οικογένεια μεθόδων Householder

- Οι μέθοδοι εφαρμόζονται για την εύρεση ρίζας μιας συνάρτησης με συνεχείς παραγώγους τουλάχιστον μέχρι την τάξη $d+1$.
- Είναι επαναληπτικές, με τάξη σύγκλισης $d+1$.
- Η γενική σχέση που παράγει την ακολουθία x_0, x_1, x_2, ... είναι

$$x_{n+1} = x_n + d\,\frac{(1/f)^{(d-1)}\,(x_n)}{(1/f)^{(d)}\,(x_n)}\ ,$$

  και για να ξεκινήσει χρειάζεται μία αρχική προσέγγιση x_0.
- Ο γενικός τύπος για $d=1$ καταλήγει στον τύπο Newton–Raphson. Για $d=2$ δίνει τον τύπο Halley.