Inżynieria Środowiska, II/1, Metody numeryczne i statystyka

Zajęcia ćwiczeniowe nr 2/8: **Metoda Newtona**

Podstawowe pojęcia dotyczące numerycznego znajdowania zera równania $f(x) = 0$

Oznaczamy:

x – zmienna, która przyjmuje wartości w pewnym przedziale (i może być tym przedziałem cała oś rzeczywista $\boldsymbol{R}$),

f – funkcja rzeczywista zmiennej x,

ξ – **zero** (inaczej: **miejsce zerowe**) funkcji f, **pierwiastek równania** $f(x) = 0$, a więc

- taka liczba, dla której funkcja f przyjmuje wartość 0,
- taki punkt osi rzeczywistej, w którym wykres $y = f(x)$ sporządzony w układzie kartezjańskim Oxy przecina oś poziomą Ox,
- liczba, dla której zapis $f(\xi) = 0$ jest tożsamością.

Wyznaczyć numerycznie zero ξ równania $f(x) = 0$ znaczy znaleźć, wykonując obliczenia (na liczbach) zadowalające przybliżenie liczby ξ.

Obliczenia wykonujemy stosując jakiś algorytm; algorytm ten nazywamy **metodą numeryczną**, **schematem obliczeniowym**. Centralne miejsce w tym algorytmie zajmuje wzór (lub zestaw wzorów) – stosując ten wzór wyznaczamy, dla przyjętej liczby x_0 (nazywamy ją **przybliżeniem początkowym**, **punktem startowym**), ciąg liczb $x_1, x_2, x_3, \ldots$, który nazywamy **ciągiem przybliżeń** poszukiwanego pierwiastka ξ.

Na przykład **metoda Newtona** wyznacza przybliżenie x_i nr i wzorem

$$x_i := x_{i-1} - \frac{f(x_{i-1})}{f'(x_{i-1})},\ i = 1, 2, 3, \ldots;$$

z tego wzoru (zwanego wzorem na i–te **przybliżenie newtonowskie**) od razu widać, że funkcja f musi mieć pochodną f'.

Podstawową cechą ciągu $x_1, x_2, x_3, \ldots$ musi być to, że jest on zbieżny do poszukiwanego zera ξ równania $f(x)$. Praktyka wymaga, by wystarczało wyznaczenie jedynie iluś początkowych wyrazów tego ciągu (wszak nie możemy liczyć do nieskończoności): $x_1, x_2, x_3, \ldots, x_I$ – tylu mianowicie, że ostatni z nich, x_I, jest dostatecznie dobrym przybliżeniem poszukiwanego zera ξ, że jest liczbą dostatecznie małą (np. mniejszą niż przyjęta z góry dokładność $\varepsilon = 10^{-6}$) tzw. **odchylenie** (inaczej: **błąd bezwględny**)

$$|\, x_I - \xi\,|.$$

W najprostszym znaczeniu termin ‘metoda numeryczna’ oznacza obliczanie kolejnych przybliżeń. Jak widać z powyższego, termin ten obejmuje coś więcej, a mianowicie

- zasadność stosowania danego wzoru (jest sens go stosować, gdy daje ciąg zbieżny),
- kwestia, kiedy zaprzestać obliczanie kolejnych przybliżeń.

Na oba te zadania odpowiadamy dokonując analizy postawionego zadania i szacując ww. odchylenie (przybliżenia x_i od poszukiwanego rozwiązania ξ). Analiza ma postać zbliżoną do badania przebiegu wartości funkcji (i w praktyce jest takim badaniem, często ograniczonym do przyjętego przedziału $\langle a, b\rangle$, w którym szukamy liczby ξ) – i dlatego przypominamy standardowy schemat takiego badania. Oszacowanie odchylenia $| x_I - \xi |$ opiera się na nierówności specyficznej dla każdej konkretnej metody i, na przykład dla metody Newtona wymaga znajomości oszacowań m_1 i M_2 wartości przyjmowanych przez pochodne funkcji f – oszacowania te znajdziemy w ostatniej części ćwiczenia.

Metoda Newtona nazywa się także **metodą Newtona-Raphsona** i **metodą stycznych** – w interpretacji geometrycznej kolejne przybliżenia są punktami, w których oś poziomą Ox przecinają styczne wyznaczane do wykresu $y = f(x)$. Wyprowadzenie wzoru na i-te przybliżenie newtonowskie, określenie warunków gwarantujących zbieżność ciągu przybliżeń newtonowskich oraz uzasadnienie wzoru na oszacowanie odchylenia $| x_i - \xi |$ stanowi treść wykładu i znaleźć ją można np. w [Bjo, 6.3], [Bur, 2.3], [Mar, rozdz.6].

Poniżej omówione ćwiczenie odnosi się do równania wielomianowego, tj. do równania $f(x) = 0$, w którym f jest wielomianem. Dla równań wielomianowych istnieją specjalne techniki znajdowania przedziałów lokalizacji pierwiastków oraz sposoby znajdowania numerycznego zer. Sięgnąć można np. do ciągu Sturma, korzystać można np. z metody Bairstowa (pozwala ona wyznaczyć numerycznie czynniki kwadratowe równania wielomianowego, a więc może służyć do znajdowania zer zespolonych) – oba te zagadnienia omawia np. [Sto, 5.6-5.7].

Ćwiczenie do wykonania na zajęciach

Postawienie (inaczej: sformułowanie) **zadania.**

Stosując metodę Newtona wyznaczymy (jakikolwiek) pierwiastek równania

$$\frac{x^6}{100} - x^2 + 1 = 0,$$

czyli znajdziemy zero (inaczej: miejsce zerowe) funkcji f zdefiniowanej wzorem

$$f(x) := \frac{x^6}{100} - x^2 + 1 = 0.$$

Podstawowe kwestie: dziedzina i istnienie rozwiązania.

Podane równanie jest równaniem algebraicznym stopnia 6. Nie istnieją wzory na rozwiązanie ogólnego równania stopnia ≥ 5 (i fakt ten dowodzi się sięgając do wyników, jakie uzyskali Evariste Galios i Henrik Niels Abel).

Nas interesują rzeczywiste rozwiązania podanego równania. Właśnie od stwierdzenia, że ma ono jakiekolwiek rozwiązanie, rozpoczynamy realizację postawionego zadania.

Jak zawsze, gdy mamy do czynienia z funkcją, rozpoznajemy jej dziedzinę (inaczej: obszar określoności, obszar, w którym jest ona obliczalna, tzn. gdzie dają się obliczyć jej wartości) – gdyby bowiem dziedzina była pusta, to odpowiedź jest natychmiastowa: zadanie nie ma rozwiązania (jako że traktuje o obiekcie zdefiniowanym sprzecznie). Obszar ten oznaczamy przez Dom(f).

Nasza funkcja f jest wielomianem (stopnia 6 zmiennej x) i dlatego od razu widzimy, że

$$\mathrm{Dom}(f) = \boldsymbol{R},$$

gdzie, jak zawsze, ***R*** oznacza zbiór liczb rzeczywistych.

Wobec sformułowania zadania (wymaga ono, byśmy stosowali metodę Newtona), stwierdzamy także, że funkcja f ma przynajmniej pochodną pierwszego rzędu (we wzorze na przybliżenie newtonowskie występuje bowiem ta pochodna). Ponieważ nasza funkcja f jest wielomianem, więc ma te pochodną. Ma też każdą inną – i każda ona jest ciągła. Uwaga dotycząca ciągłości pochodnej f'' rzędu 2 jest istotna przy oszacowaniu błędu przybliżenia – oszacowaniem tym zajmujemy się dalej.

Badanie przebiegu zmienności funkcji a lokalizacja pierwiastka.

Zaczęliśmy zatem tak, jak się postępuje przy badaniu przebiegu zmienności funkcji, jednym z wyników którego to badania jest sporządzenie realistycznego szkicu wykresu $y = f(x)$. Standardowe postępowanie (dalej nazwane także postępowaniem pełnym) prowadzące do wyznaczenia pierwiastka równania $f(x) = 0$ jest bardzo podobne do badania przebiegu zmienności funkcji f.

Przypomnijmy, że badanie takie obejmuje, standardowo, kolejno następujące podzadania

a) rozpoznanie dziedziny $\mathrm{Dom}(f)$,
b) obliczenie punktu, w którym wykresu funkcji przecina oś pionową Ox,
c) sprawdzenie okresowości, nie- i parzystości funkcji f; stwierdziwszy odpowiednią własność, możemy zawężyć dziedzinę, w której prowadzić będziemy dalsze badania,
d) wyznaczenie punktów, w których wykres $y = f(x)$ przecina oś poziomą Ox,
e) wyznaczenie punktów ekstremalnych wykresu $y = f(x)$,
f) wyznaczenie punktów przegięcia funkcji f,
g) limesowanie funkcji f na krańcach jej dziedziny; postępowanie to obejmuje wyznaczenie asymptot,
h) naniesienie wyznaczonych punktów charakterystycznych i asymptot na płaszczyźnie Oxy i naszkicowanie (być może z wykorzystaniem dodatkowo naniesionych punktów) wykresu $y = f(x)$;

realizacja każdego z wyżej wymienionych podzadań kończy się albo wyznaczeniem odpowiednich punktów i asymptot albo stwierdzeniem, że takowych nie ma.

Realizacja kolejnych podzadań.

a) Podzadanie a) już zrealizowaliśmy: $\mathrm{Dom}(f) = \boldsymbol{R}$.

b) Jest $f(0) = 1$, więc wykres $y = f(x)$ przecina oś pionową Oy w punkcie $(0, 1)$.

c) Od razu widać, że $f(-x) = f(x)$, tzn. że nasza funkcja f jest parzysta. Dlatego dalej wystarcza interesować się przedziałem $<0, +\infty)$.

d) Podzadanie d) stanowi (!) nasze zadanie. Gdyby można je było wykonać standardowo, to nie trzeba byłoby stosować metody Newtona ani jakiejkolwiek innej przybliżonej znajdowania zera równania $f(x) = 0$.

e) Wykonanie podzadania e) sprowadza się do rozwiązania równania

$$f'(x) = 0,$$

a więc, w naszym przypadku, do znalezienia zer równania

$$\frac{6x^5}{100} - 2x = 0\,.$$

Od razu widać, że jednym z nich jest

$$e_0 = 0$$

i w tym punkcie f może mieć ekstremum. Pozostałe zera są pierwiastkami równania

$$\frac{3x^4}{100} - 1 = 0\,.$$

Pierwiastek rzeczywisty i dodatni to $e_d := \sqrt[4]{\frac{100}{3}} \approx 2.40281$. Dla tej wartości argumentu x funkcja f może przyjmować wartość najmniejszą lub największą.

Odpowiedź na to, czy w ogóle jakąś z nich przyjmuje, a jeśli przyjmuje, to którą z nich, można uzyskać obliczając wartość $f''(x)$.

Ponieważ

$$f''(x) = \frac{3x^4}{10} - 2\,,$$

więc

$$f''(e_0) = -2,\ f''(e_d) = 8,$$

i dlatego punkty

$$E_0 := (0, 1),\ E_d := (e_d,\ 1 - 20/3\cdot\sqrt{3} \approx -2.849),$$

są punktami ekstremalnymi, odpowiednio maksymalnym i minimalnym. Oczywiście, wobec parzystości funkcji f, ma ona także minimum dla $x = x_d$.

f) W podzadaniu f) rozwiązujemy równanie

$$f''(x) = 0,$$

a więc równanie

$$\frac{3x^4}{10} - 2 = 0.$$

Jego zerami rzeczywistymi są liczby

$$p_d := \sqrt[4]{\frac{20}{3}} \approx 1.60685,\ p_u := -\,p_d.$$

Ponieważ dla $x = p_d$ oraz dla $x = p_u$ mamy

$$f'''(x) = 1 - \frac{28\cdot\sqrt{15}}{45} \approx -1.40985 \neq 0,$$

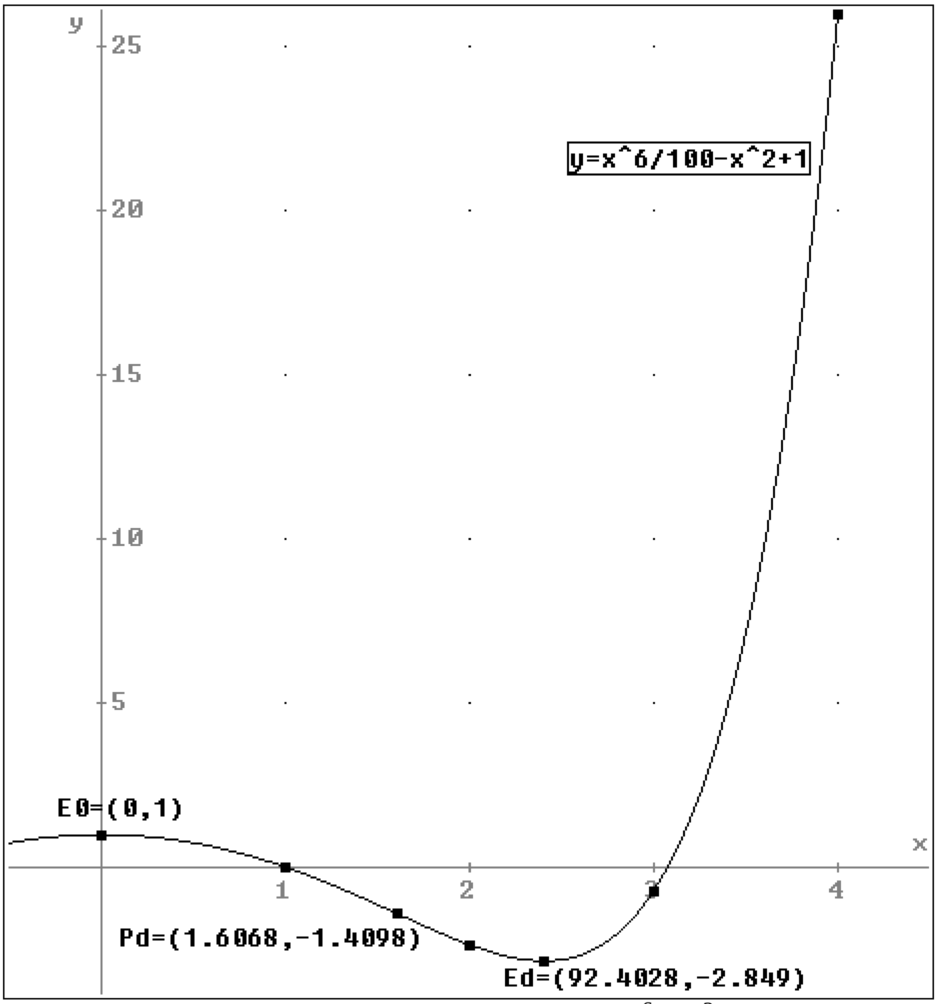
więc każda z liczb p_d i p_u jest odciętą punktu przegięcia funkcji f; punkty te dalej oznaczamy przez P_u i P_d. Sprawdziwszy znak pochodnej f''' w przedziałach otwartych, których krańcami są punkty p_u i p_d stwierdzamy, że f jest wklęsła w przedziale (p_u, p_d) i jest wypukła w przedziałach $(-\infty, p_u)$ i $(p_u, +\infty)$.

g) Ponieważ $f(x) \to \infty$ oraz $f(x)/x \to \infty$, gdy $x \to \infty$, więc nasza funkcja f nie ma asymptot (prostoliniowych) i to stwierdzenie stanowi wykonanie podzadania g) .

h) Mamy już pięć punktów charakterystycznych: trzy ekstremalne (E_u, E_0, E_d) i dwa przegięcia (P_u, P_d). By naszkicować wykres w miarę dokładnie, obliczamy punkty dodatkowe, np.

$$F_k := (k, f(x_k)) \text{ dla } k = 1, 2, 3, 4.$$

Teraz mamy 12 punktów przez które przechodzi wykres (dwanaście, bowiem od razu $F_{-k} := (-k, f(x_k))$ i możemy w miarę dokładnie sporządzić wykres $y = f(x)$. Jest on pokazany na rycinie poniżej, gdy $x \in$ <-0.5, 4.5>.



Wykres $y = f(x)$, gdy $f(x) = 0.001 \cdot x^6 - x^2 + 1$,
z zaznaczonymi punktami ekstremalnymi (E_0, E_d) i przecięcia (P_d)
oraz z punktami $F_k := (k, f(x_k))$ dla $k = 0, 1, 2, 3, 4$ (i jest $P_0 = E_0$).

Postępowanie uproszczone i pełne

Oczywiście, praktycznie równie akceptowalny wykres można uzyskać łącząc kreśląc gładką krzywą przez punkty

$$F_k := (k, f(x_k)) \text{ dla } k = -4, -3, ..., 2, 3, 4,$$

a więc nie trudząc się wyznaczaniem punktów ekstremalnych i punktów przegięcia funkcji f. W przypadku naszej funkcji f jest ono całkowicie wystarczające, aby zlokalizować jej zera – widać, że pierwiastek dodatni znajduje się w przedziale <0, 2>. Dla funkcji bardziej skomplikowanych niż rozważana takie postępowanie, zwane uproszczonym (a niekiedy inżynierskim), może nawet nie odnotować istnienia zer tych funkcji.

Postępowanie pełne (tzn. z wyznaczaniem ekstremów i punktów przegięcia) nie pomija jakiegokolwiek zera. Niestety, nie zawsze jest praktycznie realizowalne – dzieje się tak, gdy równania $f'(x) = 0$ i/lub $f''(x) = 0$ są już tak skomplikowane, że nie dają się rozwiązać analitycznie lub nakład pracy na ich rozwiązanie numeryczne jest porównywalny z trudem rozwiązania równania wyjściowego $f(x) = 0$. Odpowiedni przykład podaje np. [Mar, przykład 6.2.b]).

Postępowanie pełne znacznie ułatwia lokalizację poszukiwanego zera równania $f(x) = 0$ gwarantującą, że proces Newtona

$$x_i := x_{i-1} - \frac{f(x_{i-1})}{f'(x_{i-1})},\ i = 1, 2, 3, ...,$$

jest zbieżny dla odpowiednio wybranego przybliżenia początkowego x_0. Lokalizacją tą jest przedział $<a, b>$, taki, że

a) f jest ciągła wraz z pochodną rzędu 2 na przedziale $<a, b>$,
b) na krańcach przedziału przyjmuje wartości o różnych znakach,
c) jej pochodna f' nie zmienia znaku w przedziale $<a, b>$,
d) jej pochodna drugiego rzędu, f'', nie zmienia znaku w przedziale $<a, b>$,
e) w punkcie x_0 znaki funkcji f i jej drugiej pochodnej f'' są różne.

Powyższe warunki w symbolice matematycznej zapisuje się następująco:

a) $f \in C^{(2)}_{<a, b>}$,
b) $f(a)\cdot f(b) < 0$,
c) sign $\{ f'(x) : a \le x \le b \}$ = const,
d) sign $\{ f''(x) : a \le x \le b \}$ = const,
e) $f(x_0) \cdot f''(x_0) < 0$.

Obliczenia kolejnych przybliżeń

Biorąc $a = 0.5$, $b = 1.5$ mamy w naszym zadaniu

$$f(a) = 0.750156,\ f(b) = -1.13609,$$

$$f'(x) < 0 \text{ dla } x \in <a, b> = <0.5, 1.5>,$$

$$f''(x) < 0 \text{ dla } x \in <a, b> = <0.5, 1.5>.$$

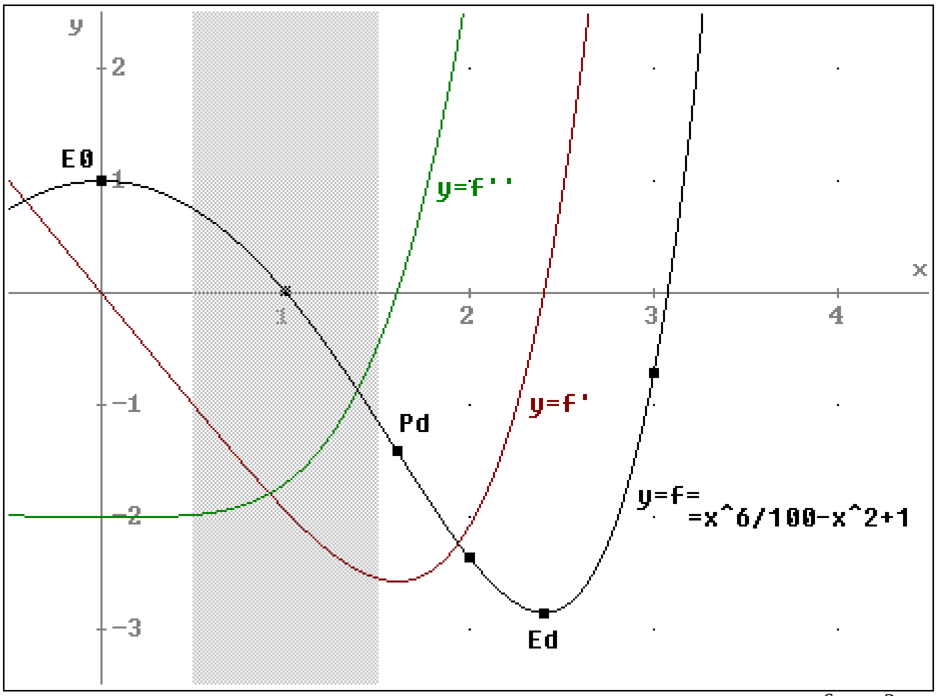
Pas $x \in <a, b> = <0.5, 1.5>$ oraz wykresy $y = f(x)$, $y = f'(x)$, $y = f''(x)$ pokazane są na rycinie poniżej.

Ponieważ $f(b)\cdot f''(b) > 0$, więc za punkt startowy obieramy

$$x_0 := b = 1.5$$

i obliczamy

$$f(x_0) \approx f(1.5) = \frac{1.5^6}{100} - 1.5^2 + 1 \approx -1.13609,$$



Wykresy funkcji f i jej pochodnych f' i f'', gdy $f(x) = 0.01 \cdot x^6 - x^2 + 1$; zaznaczono te same punkty, co na rycinie poprzedniej, oraz pas $0.5 \le x \le .5$, w którym stosujemy metodę Newtona w celu wyznaczenia zera $\xi \approx 1.00514$

$$x_1 := x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)} = 1.5 - \frac{f(1.5)}{f'(1.5)} = 1.5 - \frac{f(1.5)}{f'(1.5)} = 1.5 - \frac{\frac{1.5^6}{100} - 1.5^2 + 1}{\frac{1.5x^5}{100} - 2 \cdot 1.5} \approx$$

$$1.5 - \frac{-1.13609}{-2.54437} \approx 1.5 - 0.446511 \approx 1.05348,$$

$f(x_1) \approx f(1.05348) \approx -0.0961504$

itd.

Zestaw kolejnych przybliżeń x_i oraz wartości $f(x_i)$ zawiera tabelka poniżej (wartości $f(x_i)$ nazywa się residuami, są to bowiem różnice między lewą a prawą stroną równania $f(x) = 0$, gdy w miejsce x wstawić x_i). Obliczenia prowadzono z 6 cyframi dziesiętnymi i dlatego tabelka obejmuje jedynie pięć początkowych przybliżeń (w tym wartość startową $x_0 = 1.5$). Dwa ostatnie z nich, mianowicie x_3 i x_4, są już sobie równe. Realizacja metody Newtona z sześcioma cyframi dziesiętnymi mantysy wyznaczyła przybliżenie poszukiwanego zera ξ równe 1.00514.

lp.	przybliżenie	residuum
i	x_i	$f(x_i)$
0	1.5	–1.13609
1	1.05348	–0.0961504
2	1.00609	–0.00184607
3	1.00514	0.00000059706
4	1.00514	0.00000059706

Oszacowanie jakości wyniku

Ponieważ

$M_2 := \max \{ \, | f''(x) | : a \le x \le b \, \} = | f''(1.5) = -0.4812... | < 0.49,$

$m_1 := \min \{ \, | f'(x) | : a \le x \le b \, \} = | f'(0.5) = -0.99812... | < 0.998,$

więc

$$\frac{M_2}{2m_1} < \frac{0.49}{2 \cdot 0.998} = 0.2454909... < 0.25$$

i dlatego

$$| x_3 - \xi | < \frac{M_2}{2m_1} \cdot | x_3 - x_2 |^2 < 0.25 \cdot 0.00095^2 < 2.5 \cdot 10^{-7}.$$

Otrzymana właśnie liczba jest oszacowaniem (tzn. oszacowaniem z góry) błędu bezwzględnego, z jakim $x_3 = 1.00514$ przybliża poszukiwane zero ξ. Znaczy to, że wszystkie cyfry tego przybliżenia są pewne.
Prowadząc obliczenia z 12 cyframi dziesiętnymi mantysy otrzymujemy

1.00514304637...,

co potwierdza wyżej poczynioną konstatację, że przybliżenie 1.00514 ma wszystkie cyfry pewne.

Ćwiczenia do samodzielnego wykonania

Stosując metodę Newtona wyznacz zera ξ następujących równań:
a) $x^5 - 2x^3 - 1 = 0$ ($\xi \approx -1.178724175$, $\xi = -1$),
b) $x^4 + x^3 - x^2 + x + 1 = 0$ ($\xi \approx --1.722083805$,$\xi \approx -0.5806918319$),
c) $2 \cdot x^{3/5} - x = 1$ ($\xi \approx -7.925327777$, $\xi = 1$, $\xi \approx 2.275416374$),
d) $4 \cdot \cos(x) - x = 0$ ($\xi \approx -3.595304867$, $\xi \approx -2.133332251$, $\xi \approx 1.252353234$),
e) $\ln(x) + x = 0$ ($\xi \approx 0.5671432904$),
f) $\operatorname{ctg}(x) = x$ (najmn.dodatnie: $\xi \approx 0.8603335890$, $\xi \approx 3.425618459$, $\xi \approx 6.437298179$).

Obliczenia przeprowadzono i rysunki wykonano w programie Derive 5 for Windows, Texas International Inc.

Literatura

[Bjo] Ake Björck, Germund Dahlquist, *Metody numeryczne*, PWN Warszawa 1987
[Bur] Richard L.Burden, J.Douglas Faires, *Numerical analysis*, PWS Boston 1985
[Mar] Adam Marlewski, *Podstawowe metody numeryczne dla studentów kierunków inżynierskich*, Wyd. PWSZ Piła 2008
[Sto] Josef Stoer, *Wstęp do metod numerycznych, tom pierwszy*, PWN Warszawa 1979

A.Marlewski, 2010-03-16