Вычисление корней нелинейных уравнений. Отделение корней. Метод деления отрезка пополам. Метод хорд. Методы простой итерации, Ньютона. Модификации метода Ньютона. Сходимость.

11.1. Основные этапы решения нелинейных уравнений. Скорость сходимости

Рассмотрим методы решения уравнений вида

$$f(x) = 0, \tag{11.1}$$

где $f(x)$ – произвольная непрерывная функция. Процесс нахождения приближенных корней уравнения (11.1) разбивается на два этапа:

– отделение (локализация) корней;
– итерационное уточнение корней до заданной точности.

Отделить корни – значит разбить всю область допустимых значений на отрезки, в каждом из которых содержится один корень.

Отрезок, содержащий только один корень $x = \alpha$, называется *отрезком локализации корня* $x = \alpha$.

Способы локализации корней многообразны, и указать универсальный метод не представляется возможным. Для локализации применяют различные теоремы алгебры и математического анализа. В простых ситуациях используют графики функции $y = f(x)$, таблицы значений $y_i = f(x_i)$.

После отделения корней для их вычисления с заданной точностью на каждом из отрезков можно воспользоваться одним из приведенных ниже методов.

Пусть $x = \alpha$ – корень уравнения (11.1), подлежащий определению. Скорость сходимости – одна из важнейших характеристик метода.

Определение 1. Метод сходится со скоростью геометрической прогрессии, знаменатель которой $q < 1$, если для всех $n \in N$ справедлива оценка $|x_n - \alpha| \le C_0 q^n$ ($|x_n - \alpha| \le q|x_{n-1} - \alpha|$).

Определение 2. Пусть в некоторой окрестности корня $|x_{n+1} - \alpha| \le C|x_n - \alpha|^p$, где $C > 0$, $p \ge 1$. В этом случае число p называют **порядком сходимости метода**.

Если $p=1$, $C<1$, то метод обладает линейной скоростью сходимости. Если $p=2$, – квадратичной скоростью сходимости.

Очевидно, чем больше p, тем быстрее сходимость.

Входными данными для вычисления корня α являются значения $f(x)$ в малой окрестности корня. Эти значения будут приближенными. Обозначим их через $\tilde{f}(x)$.

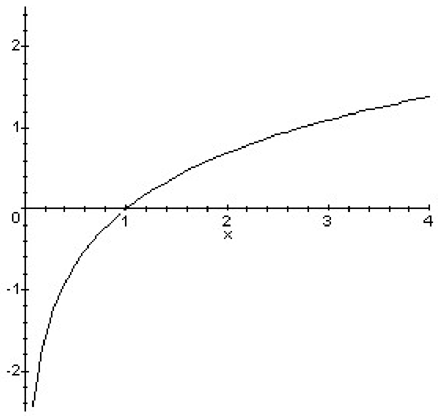

Рис.1

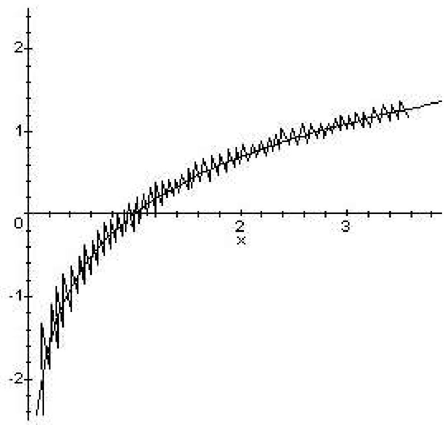

Рис. 2

На рис. 1 – идеальная ситуация, отвечающая исходной математической постановке задачи, а на рис. 2 – реальная ситуация, соответствующая вычислениям значений функции $f(x)$ на ЭВМ.

Пусть в достаточно малой окрестности корня $\left|f(x)-\tilde{f}(x)\right|<\Delta$, где $\Delta=\Delta(\tilde{f})$ – абсолютная погрешность.

Если функция $f(x)$ непрерывна, то найдется такая малая окрестность $(\alpha-\bar{\varepsilon},\alpha+\bar{\varepsilon})$ корня α, в которой выполняется неравенство

$$\left|f(x)\right|<\Delta. \qquad (11.2)$$

Для $x\in(\alpha-\bar{\varepsilon},\alpha+\bar{\varepsilon})$ знак вычисленного значения $\tilde{f}(x)$, вообще говоря, не обязан совпадать со знаком $f(x)$. Следовательно, становится невозможным определить, какое именно значение x из интервала $(\alpha-\bar{\varepsilon},\alpha+\bar{\varepsilon})$ обращает функцию $f(x)$ в нуль.

Этот интервал называют **интервалом неопределенности корня α.**

Найдем оценку величины $\bar{\varepsilon}$. Пусть α – простой корень. Для x, близких к α, $f(x) \approx f(\alpha) + (x-\alpha)f'(\alpha) = (x-\alpha)f'(\alpha)$. Поэтому неравенство (11.2) примет вид

$$|(x-\alpha)f'(\alpha)| \le \Delta,$$

откуда

$$\alpha - \frac{\Delta}{|f'(\alpha)|} \le x \le \alpha + \frac{\Delta}{|f'(\alpha)|}.$$

Следовательно, $\bar{\varepsilon} \approx cond \cdot \Delta(\tilde{f})$, здесь $cond = \dfrac{1}{|f'(\alpha)|}$ – число, которое в рассматриваемой задаче играет роль *числа обусловленности*. Действительно, если $\tilde{\alpha}$ – корень уравнения $\tilde{f}(x) = 0$, то $|f(\tilde{\alpha})| < \Delta$ и справедливо неравенство $|\alpha - \tilde{\alpha}| \le \Delta(\tilde{\alpha}) \le \bar{\varepsilon} \approx cond \cdot \Delta(\tilde{f})$.

Итак, $\bar{\varepsilon}$ – радиус интервала неопределенности, он возрастает с возрастанием погрешности вычисления значения $\tilde{f}(x)$. Кроме того, $\bar{\varepsilon}$ растет (обусловленность ухудшается) с уменьшением $|f'(\alpha)|$.

Если α – корень кратности m, то доказано, что $\bar{\varepsilon} \approx \left|\dfrac{m!}{f^{(m)}(\alpha)}\right|^{1/m} \cdot \Delta^{-\frac{1}{m}}$.

В этом случае радиус интервала неопределенности пропорционален $\Delta^{-\frac{1}{m}}$, что говорит о плохой обусловленности задачи вычисления кратных корней.

В реальной ситуации оценить $\bar{\varepsilon}$ довольно сложно, но знать об интервале неопределенности полезно и важно. Во-первых, нет смысла ставить задачу о вычислении корня с точностью $\varepsilon < \bar{\varepsilon}$. Каждое значение x из интервала неопределенности можно взять за приближенное значение корня.

Во-вторых, нельзя требовать от алгоритмов вычисления корня получения достоверных результатов после того, как попали в интервал неопределенности. Вычисления следует прекратить и считать, что получен максимум действительно возможного.

Для большинства итерационных методов этот момент определить можно, поскольку, начиная с него, поведение x_n становится крайне нерегулярным.

Вдали от интервала неопределенности величина

$$q_n = \frac{|x_n - x_{n-1}|}{|x_{n-1} - x_{n-2}|} \qquad (11.3)$$

обычно бывает меньше единицы. Появление значения $q_n > 1$ свидетельствует, скорее всего, о начале «разболтки» – хаотического поведения итерационной последовательности. В этой ситуации вычисления имеет смысл прекратить, попытаться выяснить причину этого явления и принять правильное решение. Лучшим из полученных приближений к решению следует считать x_{n-1}.

Использование для контроля вычислений величины (11.3) называют *правилом Гарвика.*

11.2. Метод деления отрезка пополам (метод бисекций)

Предположим, что найден отрезок $[a,b]$, такой, что $f(a)f(b) < 0$. Тогда согласно теореме Больцано-Коши внутри отрезка $[a,b]$ существует точка c, в которой значение функции равно нулю, т.е. $f(c) = 0$, $c \in (a,b)$. Итерационный метод бисекций состоит в построении последовательности вложенных отрезков $\{[a_n, b_n] \mid [a_n, b_n] \subset [a_{n-1}, b_{n-1}] \subset [a,b]\}$, на концах которых функция $f(x)$ принимает значения разных знаков. Каждый последующий отрезок получают делением пополам предыдущего. Процесс построения последовательности отрезков позволяет найти нуль функции $f(x)$ (корень уравнения $f(x) = 0$) с любой заданной точностью.

Если требуется найти корень с точностью ε, то деление пополам продолжаем до тех пор, пока длина отрезка не станет меньше 2ε. Тогда координата середины последнего отрезка и есть значение корня с требуемой точностью ε.

Середина n-го отрезка – точка $x_n = (a_n + b_n)/2$ дает приближение к корню $x = \alpha$, имеющее следующую оценку погрешности $|x_n - \alpha| \le (b_n - a_n)/2 = (b-a)/2^{n+1}$. Из этой оценки видно, что метод бисекции сходится со скоростью геометрической прогрессии, знаменатель которой $q = 1/2$.

Метод бисекций – простой и надежный метод поиска простого корня уравнения $f(x) = 0$. Корень $x = c$ называют простым корнем дифференцируемой функции $f(x)$, если $f(c) = 0$ и $f'(c) \ne 0$. Метод сходится для любых непрерывных функций $f(x)$, в том числе и недифференцируемых. Для достижения точности ε необходимо совершить N итераций, где $N \approx \log_2 \dfrac{b-a}{\varepsilon}$. Это означает, что для получения каждых трех верных десятичных знаков необходимо совершить около 10 итераций.

Если на отрезке $[a,b]$ находится несколько корней уравнения $f(x)=0$, то процесс сходится к одному из них, заранее не известно, к какому. Метод не применим для отыскания кратных корней четного порядка. В случае кратных корней нечетного порядка он менее точен, по сравнению со случаем простого корня.

11.3. Метод простых итераций

Метод простых итераций (метод последовательных приближений) решения уравнения $f(x)=0$ состоит в замене исходного уравнения эквивалентным ему уравнением $x=\varphi(x)$ и построении последовательности $x_{n+1}=\varphi(x_n)$, сходящейся при $n \to \infty$ к точному решению. Сформулируем достаточное условие сходимости метода простых итераций.

Теорема. *Пусть функция* $\varphi(x)$ *определена и дифференцируема на* $[a,b]$, *причем все ее значения* $\varphi(x) \in [a,b]$. *Тогда, если существует число* q *такое, что* $|\varphi'(x)| \le q < 1$ *на отрезке* $[a,b]$, *то последовательность* $x_{n+1}=\varphi(x_n)$, $n=0,1,2,\ldots$ *сходится к единственному на* $[a,b]$ *решению уравнения* $x=\varphi(x)$ *при любом начальном значении* $x_0 \in [a,b]$, *т.е* $\lim\limits_{n\to\infty} x_{n+1} = \lim\limits_{n\to\infty} \varphi(x_n) = \xi$, $f(\xi)=0$, $\xi \in [a,b]$.

При этом если на отрезке $[a,b]$ производная $\varphi'(x)$ положительна, то $|\xi - x_n| < \dfrac{q}{1-q}|x_n - x_{n-1}|$, если $\varphi'(x)$ отрицательна, то $|\xi - x_n| < |x_n - x_{n-1}|$.

Как следует из теоремы, для сходящегося метода простой итерации справедлива оценка $|\xi - x_n| \le q|\xi - x_{n-1}|$. Это означает, что метод простой итерации обладает линейной скоростью сходимости.

Опишем один шаг итераций. Исходя из найденного на предыдущем шаге значения x_{n-1}, вычисляем $y=\varphi(x_{n-1})$. Если $|y - x_{n-1}| > \varepsilon$, полагаем $x_n = y$ и выполняем очередную итерацию. Если же $|y - x_{n-1}| < \varepsilon$, то вычисления заканчиваем и за приближенное значение корня принимаем величину $x_n = y$. Погрешность полученного результата зависит от знака производной $\varphi'(x)$.

При $\varphi'(x) > 0$ корень найден с погрешностью $\frac{q\varepsilon}{1-q}$, если $\varphi'(x) < 0$, то погрешность не превышает ε.

Как исходное уравнение $f(x) = 0$ заменить в окрестности корня эквивалентным ему уравнением $x = \varphi(x)$? Очевидно, что эквивалентным исходному уравнению будет уравнение $x = x + \tau(x) f(x)$, где $\tau(x)$ не меняет знак на том отрезке, где разыскивается решение. Выбор функции $\tau(x)$ должен обеспечивать сходимость соответствующего метода простой итерации.

В частности, положим $\tau(x) = \tau = const$. Получаем итерационный метод

$$\frac{x_{k+1} - x_k}{\tau} = f(x_k),\ k = 0,1,...,$$

который называют **методом релаксации**. В методе релаксации $\varphi(x) = x + \tau \cdot f(x)$, поэтому $\varphi'(x) = 1 + \tau \cdot f'(x)$, и достаточное условие сходимости $|\varphi'(x)| < 1$ выполняется, если справедливы неравенства $-2 < \tau \cdot f'(x) < 0$. Если в некоторой окрестности корня выполнены условия $f'(x) < 0$, $0 < m < |f'(x)| < M$, то метод релаксации сходится при $\tau \in \left(0, \frac{2}{M}\right)$. Доказано, что в этом случае оптимальным является $\tau_0 = \frac{2}{m+M}$ и справедлива оценка $|\alpha - x_n| \le q^n(\tau_0)|\alpha - x_0|$, где $q(\tau_0) = \frac{M-m}{M+m}$.

Ничего не изменится, если $f'(x) > 0$, просто в этом случае нужно поменять знак «плюс» на «минус» в уравнении $x = x + \tau(x) f(x)$.

Замечание. Вблизи корня асимптотическая сходимость определяется величиной $|\varphi'(\alpha)|$ и будет особенно быстрой при $\varphi'(\alpha) = 0$. Значит, успех метода зависит от того, насколько удачно выбрано $\varphi(x)$. Например, для вычисления квадратного корня, т.е. решения уравнения $x^2 = a$, можно положить $\varphi(x) = \frac{a}{x}$ и $\varphi(x) = \frac{1}{2}\left(x + \frac{a}{x}\right)$. Получаем соответственно итерационные методы $x_{n+1} = \frac{a}{x_n}$ и $x_{n+1} = \frac{1}{2}\left(x_n + \frac{a}{x_n}\right)$. Первый метод не сходится, а второй сходится и очень быстро, т.к. $\varphi'(\alpha) = 0$.

11.4. Метод Ньютона

Метод состоит в построении итерационной последовательности

$$x_{n+1} = x_n - f(x_n)/f'(x_n),\ n = 0,1,2,...., \tag{11.4}$$

сходящейся к корню уравнения $f(x) = 0$.

Сформулируем достаточные условия сходимости метода.

Теорема. *Пусть* $f(x)$ *определена и дважды непрерывно дифференцируема на* $[a,b]$, *причем* $f(a)f(b) < 0$, *а производные* $f'(x)$, $f''(x)$ *отличны от нуля и сохраняют знак на отрезке* $[a,b]$. *Тогда, исходя из начального приближения* $x_0 \in [a,b]$, *удовлетворяющего неравенству* $f(x_0)f''(x_0) > 0$, *можно построить последовательность* $x_{n+1} = x_n - f(x_n)/f'(x_n)$, $n = 0,1,2,...$, *сходящуюся к единственному на* $[a,b]$ *решению* ξ *уравнения* $f(x) = 0$.

Метод Ньютона допускает простую геометрическую интерпретацию. Если через точку с координатами $(x_n, f(x_n))$ провести касательную, то абсцисса точки пересечения этой касательной с осью Ox и есть очередное приближение x_{n+1} корня уравнения $f(x) = 0$.

Для оценки погрешности n-го приближения корня можно воспользоваться неравенством $|\xi - x_n| \le \dfrac{M_2}{2m_1}|x_n - x_{n-1}|^2$, где M_2 – наибольшее значение модуля второй производной $|f''(x)|$ на отрезке $[a,b]$; m_1 – наименьшее значение модуля первой производной $|f'(x)|$ на отрезке $[a,b]$. Из приведенного неравенства следует, что метод Ньютона сходится с квадратичной скоростью сходимости. Таким образом, если $|x_n - x_{n-1}| < \varepsilon$, то $|\xi - x_n| \le M_2\varepsilon^2/(2m_1)$. Последнее соотношение означает, что при хорошем начальном приближении корня после каждой итерации число верных десятичных знаков в очередном приближении удваивается, т.е. процесс сходится очень быстро. Значит, если необходимо найти корень с точностью ε, то итерационный процесс можно прекращать, когда $|x_n - x_{n-1}| < \varepsilon_0 = \sqrt{2m_1\varepsilon/M_2}$.

Замечание. Метод Ньютона можно рассматривать, как метод простой итерации с $\varphi(x) = x - \dfrac{f(x)}{f'(x)}$. Тогда $\varphi'(x) = \dfrac{f(x)f''(x)}{\left(f'(x)\right)^2}$. В точке корня $x = \xi$ нашего уравнения $f(\xi) = 0$, тогда и $\varphi'(\xi) = 0$. Поэтому в достаточно малой окрестности корня $|\varphi'(x)| \le 1$ и, следовательно, в этой окрестности метод Ньютона сходится.

11.5. Модификации метода Ньютона

Цель всех видоизменений основной формулы (11.4) метода Ньютона – уменьшение вычислительных затрат, связанных с необходимостью нахождения производной на каждом итерационном шаге, а также возможность вычисления кратного корня.

Следующие итерационные методы вычисления корня нелинейного уравнения $f(x) = 0$ приведем для краткости в виде таб. 1.

Таблица 11.1.

№	Наименование	Формулы
1	Упрощенный метод Ньютона	$x_{n+1} = x_n - f(x_n)/f'(x_0)$, $n = 0,1,2,\dots$
2	Метод хорд	$x_{n+1} = x_n - \dfrac{c - x_n}{f(c) - f(x_n)} f(x_n)$, $n = 0,1,2,\dots$ c – фиксированная точка из окрестности корня
3	Метод секущих	$x_{n+1} = x_n - \dfrac{x_{n-1} - x_n}{f(x_{n-1}) - f(x_n)} f(x_n)$, $n = 0,1,2,\dots$
4	Метод Стеффенсена	$x_{n+1} = x_n - \dfrac{f(x_n)}{f(x_n + f(x_n)) - f(x_n)} f(x_n)$, $n = 0,1,2,\dots$
5	Модифицированный метод Ньютона для поиска кратных корней	$x_{n+1} = x_n - m\dfrac{f(x_n)}{f'(x_n)}$, $n = 0,1,2,\dots$, где m – кратность вычисляемого корня