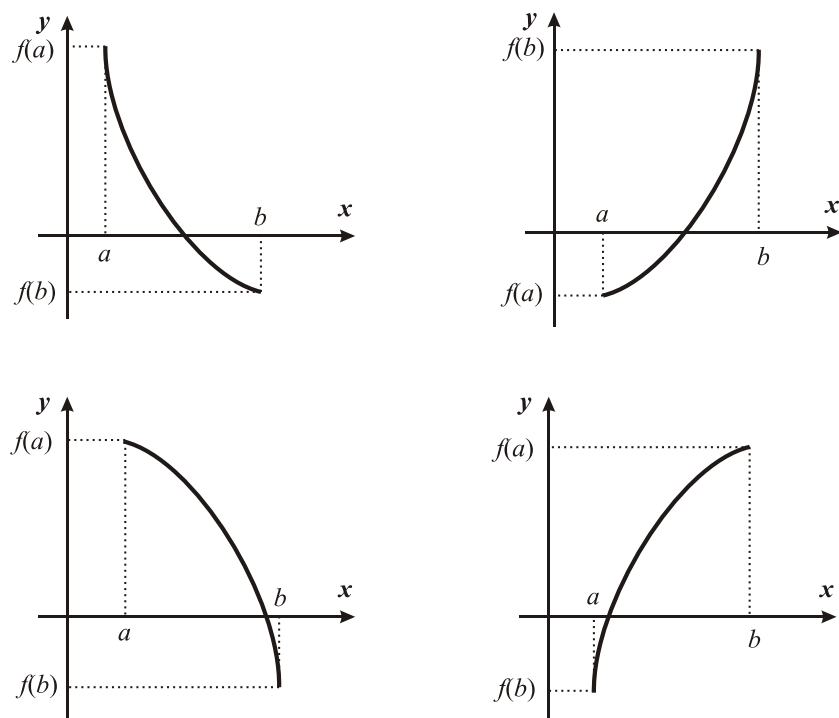
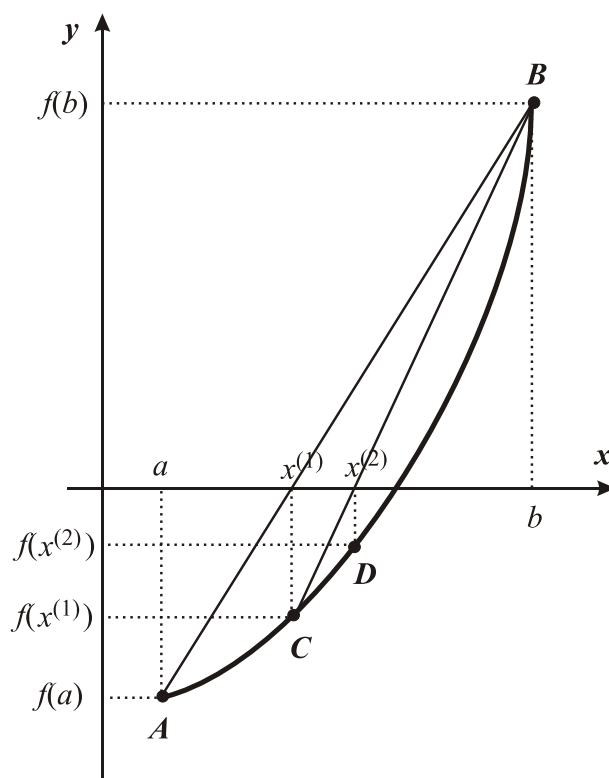


Rys. 5.1. Możliwe postacie funkcji w metodzie *regula falsi*Rys. 5.2. Przypadek $f'(x), f''(x) > 0$ w metodzie *regula falsi*

Uwaga: W rozpatrywanym przypadku wszystkie cięciwy przechodzą przez punkt B .

Przedstawiony sposób postępowania prowadzi do konstrukcji ciągu $\{x^{(i)}\}$, który jest określony rekurencyjnie wzorem

$$\begin{aligned} x^{(0)} &= a, \\ x^{(i+1)} &= x^{(i)} - \frac{f(x^{(i)})}{f(b) - f(x^{(i)})} (b - x^{(i)}), \quad i = 0, 1, \dots \end{aligned} \quad (5.3)$$

Przy przyjętych założeniach ciąg (5.3) jest rosnący i ograniczony, a więc zbieżny (jego granicą jest szukany pierwiastek ξ). W rozpatrywanym przypadku kolejne wyrazy ciągu są mniejsze od dokładnego pierwiastka ξ oraz $f(x^{(i)}) < 0$ dla każdego i . Pozostawiamy Czytelnikowi konstrukcje odpowiednich wzorów rekurencyjnych w pozostałych trzech przypadkach możliwego przebiegu funkcji f .

Dla rozpatrywanego przypadku z twierdzenia Lagrange'a o wartości średniej (zob. dowolny podręcznik z analizy matematycznej) mamy

$$f(x^{(i)}) - f(\xi) = f'(c)(x^{(i)} - \xi),$$

gdzie $c \in (x^{(i)}, \xi)$. Ponieważ $f(\xi) = 0$, więc z powyższej zależności otrzymujemy (oszacowanie i -ego przybliżenia)

$$|x^{(i)} - \xi| \leq \frac{|f(x^{(i)})|}{\inf_{x \in [a, b]} |f'(x)|}.$$

Uwaga: Wadą metody *regula falsi* jest stosunkowo powolna zbieżność.

Metodę *regula falsi* można znacznie polepszyć, jeżeli zrezygnujemy z żądania, by funkcja f miała w punktach wytyczających następną cięciwę różne znaki i skorzystamy z wzoru

$$x^{(i+1)} = x^{(i)} - \frac{f(x^{(i)})}{f(x^{(i)}) - f(x^{(i-1)})} (x^{(i)} - x^{(i-1)}), \quad i = 1, 2, \dots \quad (5.4)$$

Wzór (5.4) określa *metodę siecznych*, w której wymagane są dwa punkty początkowe $x^{(0)} = a$ i $x^{(1)} = b$. Zbieżność tej metody jest znacznie szybsza niż metody *regula falsi*, ale może ona nie być zbieżna (np. gdy początkowe przybliżenia nie leżą dostatecznie blisko rozwiązania).

5.4. Metody Newtona-Raphsona

Założmy, że ξ oznacza pierwiastek (zero) funkcji $f: \mathbf{R} \rightarrow \mathbf{R}$ i funkcja ta w pewnym otoczeniu $U(\xi)$ jest dostatecznie wiele razy różniczkowalna. Ze wzoru Taylora otrzymujemy (rozwiniecie funkcji f wokół punktu $x^{(0)} \in U(\xi)$):

$$\begin{aligned} f(\xi) = 0 &= f(x^{(0)}) + (\xi - x^{(0)})f'(x^{(0)}) + \frac{(\xi - x^{(0)})^2}{2!} \\ &= + \dots + \frac{(\xi - x^{(0)})^k}{k!} f^{(k)}(x^{(0)}) + \mathcal{O}(\xi - x^{(0)}), \end{aligned} \quad (5.5)$$

gdzie $0 < \vartheta < 1$. Pomijając wyrazy rzędu $(\xi - x^{(0)})^p$, dla $p \geq 2$ otrzymamy równanie, które dla danej wartości $x^{(0)}$ musi w przybliżeniu spełniać pierwiastek ξ (przybliżenie tego pierwiastka oznaczmy przez $\bar{\xi}$):

$$0 = f(x^{(0)}) + (\bar{\xi} - x^{(0)}) f'(x^{(0)}).$$

Stąd

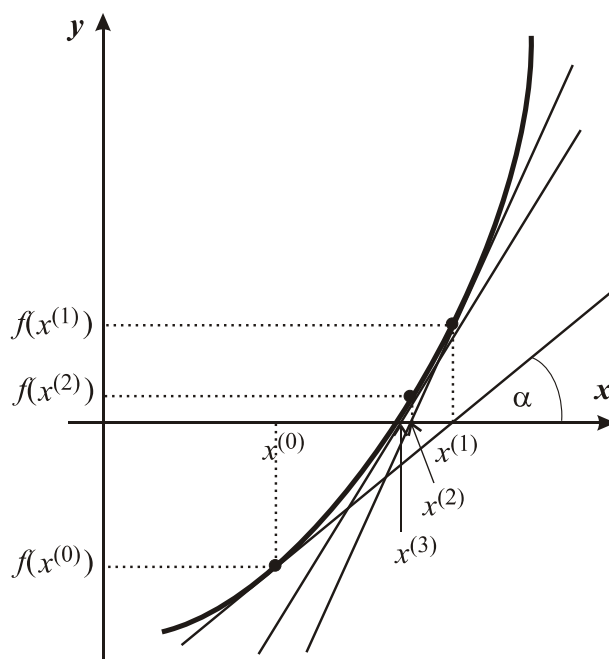
$$\bar{\xi} = x^{(0)} - \frac{f(x^{(0)})}{f'(x^{(0)})},$$

co prowadzi do metody iteracyjnej

$$x^{(i+1)} = x^{(i)} - \frac{f(x^{(i)})}{f'(x^{(i)})}, \quad i = 0, 1, \dots \quad (5.6)$$

Jest to *klasyczna metoda Newtona*.

Graficzna interpretacja tej metody jest następująca: w danym punkcie $x(0)$ wykreślamy styczną do krzywej $f(x)$ (tangens kąta nachylenia α tej stycznej jest równy $f'(x^{(0)})$). Punkt przecięcia tej stycznej z osią Ox wyznacza przybliżenie $x^{(1)}$. W punkcie tym wykreślamy kolejną styczną do krzywej, której punkt przecięcia z osią Ox wyznacza przybliżenie $x^{(2)}$ itd. (zob. rys. 5.3).



Rys. 5.3. Graficzna interpretacja klasycznej metody Newtona

Jeśli w równaniu (5.5) pominiemy wyrazy rzędu $(\xi - x^{(0)})^p$ dla $p \geq 3$, to otrzymamy

$$0 = f(x^{(0)}) + (\bar{\xi} - x^{(0)}) f'(x^{(0)}) + \frac{(\bar{\xi} - x^{(0)})^2}{2!} f''(x^{(0)}),$$

skąd

$$\xi = x^{(0)} - \frac{f'(x^{(0)}) \pm \sqrt{[f'(x^{(0)})]^2 - 2f(x^{(0)})f''(x^{(0)})}}{f''(x^{(0)})}.$$

Powyższy wzór prowadzi do metody iteracyjnej

$$x^{(i+1)} = x^{(i)} - \frac{f'(x^{(i)}) \pm \sqrt{[f'(x^{(i)})]^2 - 2f(x^{(i)})f''(x^{(i)})}}{f''(x^{(i)})}, \quad i = 0, 1, \dots, \quad (5.7)$$

zwanej *metodą Newtona-Raphsona drugiego stopnia*. Zauważmy, że z uwagi na znaki wzór (5.7) przedstawia dwie metody iteracyjne. Nie istnieje żadne stwierdzenie określające, który ze znaków „+” lub „-” należy wziąć. W zależności od rozwiązywanego równania może okazać się, że wybór jednego z tych znaków powoduje otrzymanie rozwiązania zadaną dokładnością przy mniejszej liczbie iteracji.

Metodę Newtona można uogólnić na przypadek układu równań liniowych

$$f(x) = \begin{bmatrix} f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) \\ f_2(x_1, x_2, \dots, x_n) \\ \dots \\ f_n(x_1, x_2, \dots, x_n) \end{bmatrix} = 0.$$

Zakładając, że punkt ξ jest pierwiastkiem powyższego równania, a wektor $x^{(0)}$ – przybliżoną wartością ξ , funkcja f jest różniczkowalna w punkcie $x = x^{(0)}$, w pierwszym przybliżeniu mamy

$$0 = f(\xi) \approx f(x^{(0)}) + Df(x^{(0)})(\xi - x^{(0)}),$$

gdzie

$$Df(x^{(0)}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_n}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial f_n}{\partial x_n} \end{bmatrix}, \quad \xi - x^{(0)} = \begin{bmatrix} \xi_1 - x_1^{(0)} \\ \vdots \\ \xi_n - x_n^{(0)} \end{bmatrix}.$$

Jeżeli macierz $Df(x^{(0)})$ jest nieosobliwa, to równanie

$$f(x^{(0)}) + Df(x^{(0)})(x^{(1)} - x^{(0)}) = 0, \quad \text{tj.} \quad Df(x^{(0)})(x^{(1)} - x^{(0)}) = -f(x^{(0)}),$$

można rozwiązać względem $x^{(1)}$ i prowadzi to do metody iteracyjnej

$$x^{(i+1)} = x^{(i)} - [Df(x^{(i)})]^{-1} f(x^{(i)}), \quad i = 0, 1, \dots \quad (5.8)$$

Wzór (5.8) przedstawia tzw. *ogólną metodę Newtona*. Metoda ta w każdym kroku wymaga obliczenia n^2 pochodnych i niewygodnego odwracania macierzy. Dlatego w praktyce wzór (5.8) przekształca się do postaci

$$Df(x^{(i)})x^{(i+1)} = Df(x^{(i)})x^{(i)} - f(x^{(i)}).$$

Jest to układ równań liniowych z niewiadomym wektorem $x^{(i+1)}$ i do jego rozwiązania można stosować na przykład metodę eliminacji Gaussa.

Przed podaniem twierdzenia o zbieżności ogólnej metody Newtona zdefiniujemy dwa pojęcia.

Definicja 5.1. Funkcję $f: \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}^n$ nazywamy *różniczkowalną* w punkcie $x^0 \in \mathbf{R}^n$, jeżeli istnieje macierz kwadratowa A stopnia n , taka że

$$\lim_{x \rightarrow x^0} \frac{\|f(x) - f(x^0) - A(x - x^0)\|}{\|x - x^0\|} = 0$$

(macierz A pokrywa się z macierzą $Df(x^0)$).

Definicja 5.2. Zbiór $M \subseteq \mathbf{R}^n$ nazywamy *wypukłym*, jeżeli dla dowolnych wektorów $x, y \in M$ mamy

$$\{z: z = \lambda x + (1 - \lambda)y, \quad 0 \leq \lambda \leq 1\} \subseteq M$$

(innymi słowy: odcinek łączący punkty x i y należy do zbioru M).

Możemy teraz sformułować twierdzenie o zbieżności ogólnej metody Newtona.

Twierdzenie 5.1. Niech $D \subseteq \mathbf{R}^n$ oznacza zbiór otwarty, a D_0 – zbiór wypukły, taki że $\bar{D}_0 \subseteq D$.

Niech funkcja $f: D \rightarrow \mathbf{R}^n$ będzie różniczkowalna dla każdego wektora $x \in D_0$ i ciągła dla każdego $x \in D$. Załóżmy, że dla $x^{(0)} \in D_0$ istnieją stałe dodatnie r, α, β, γ i h , takie że

$$S_r(x^{(0)}) \stackrel{\text{def}}{=} \{x: \|x - x^{(0)}\| < r\} \subseteq D_0,$$

$$h = \frac{\alpha\beta\gamma}{2} < 1, \quad r = \frac{\alpha}{1-h}.$$

Jeżeli funkcja f spełnia następujące warunki:

- $\|Df(x) - Df(y)\| \leq \gamma \|x - y\|$ dla wszystkich $x, y \in D_0$,
- $[Df(x)]^{-1}$ istnieje i $\|[Df(x)]^{-1}\| \leq \beta$ dla wszystkich $x \in D_0$,
- $\|[Df(x^{(0)})]^{-1} f(x^{(0)})\| \leq \alpha$,

to

1° rozpoczynając od $x^{(0)}$ każdy punkt

$$x^{(k+1)} \stackrel{\text{def}}{=} x^{(k)} - [Df(x^{(k)})]^{-1} f(x^{(k)}), \quad k = 0, 1, \dots,$$

jest dobrze określony oraz $x^{(k)} \in S_r(x^{(0)})$ dla wszystkich $k \geq 0$,

2° istnieje $\lim_{k \rightarrow \infty} x^{(k)} = \xi$ oraz

$$\xi \in \overline{S_r(x^{(0)})} \quad \text{i} \quad f(\xi) = 0,$$

3° dla wszystkich $k \geq 0$ spełniona jest nierówność

Dowód tego twierdzenia można znaleźć m. in. [2]. Ponieważ $h \in (0, 1)$, więc z ostatniej nierówności wynika, że metoda Newtona jest zbieżna co najmniej kwadratowo.

W praktyce często korzysta się z różnych modyfikacji metody Newtona i uproszczeń wzoru (5.8). Jedną z takich modyfikacji jest tzw. *uproszczona metoda Newtona*. Przy założeniu, że parametr ω spełnia nierówności $0 < \omega < 2$, w metodzie tej $(i + 1)$ -sze przybliżenie wyznacza się z następujących wzorów:

W uproszczonej metodzie Newtona oblicza się tylko n pochodnych i nie występuje odwracanie macierzy. Chociaż najczęściej metody tej używa się z parametrem $\omega = 1$, to okazuje się, że w wielu przypadkach można uzyskać wymaganą dokładność rozwiązania przy mniejszej liczbie iteracji przyjmując $\omega < 1$, w innych zaś dla parametru $\omega > 1$. Okazuje się też, że jeśli metoda Newtona jest zbieżna, to jest zbieżna także metoda (5.9), ale nie na odwrót.

5.5. Wyznaczanie zer wielomianów

Przy wyznaczaniu (kilku) pierwiastków wielomianów metoda Newtona często zawodzi, na co wpływ mają błędy zaokrągleń. Ponadto, jeśli wielomian o współczynnikach rzeczywistych ma sprzężone pierwiastki zespolone, to nie mogą być one wyznaczone, gdy za początkowe przybliżenie składowych wektora $x^{(0)}$ przyjmujemy wartości rzeczywiste.

W metodzie Bairstowa, która opiszemy w tym punkcie, oblicza się pierwiastki zespolone, chociaż unika się rachunku zespolonego. Metoda ta polega na tym, że pierwiastki wielomianu (w tym ewentualnie zespolone)

$$x^2 - rx - q,$$

gdzie r i q oznaczają liczby rzeczywiste, są także wtedy i tylko wtedy pierwiastkami danego wielomianu rzeczywistego