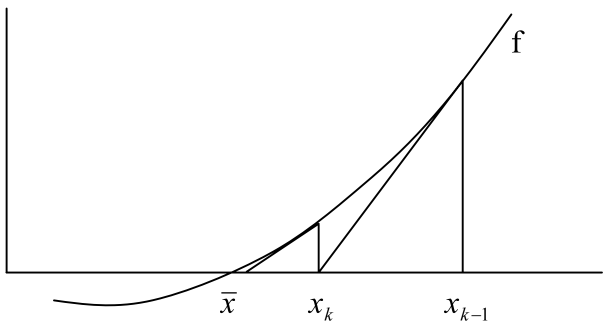
3. ΜΕΘΟΔΟΙ ΤΥΠΟΥ NEWTON-RAPHSON

Α. ΜΕΘΟΔΟΣ NEWTON-RAPHSON

Έστω f μια πραγματική παραγωγίσιμη συνάρτηση. Θεωρούμε την εξίσωση

$$f(x)=0.$$



Σχήμα 1

Στη μέθοδο **Newton-Raphson**, κατασκευάζουμε επαναληπτικά μια ακολουθία (x_k), ξεκινώντας από ένα αρχικό x_0, επιλεγμένο συνήθως κοντά σε μια λύση της εξίσωσης $f(x)=0$. Έχοντας υπολογίσει το x_{k-1}, το επόμενο x_k ορίζεται ως το σημείο τομής της εφαπτομένης στο σημείο $(x_{k-1}, f(x_{k-1}))$ του γραφήματος της f με τον άξονα των x (βλ. Σχήμα 1). Έχουμε

$$f'(x_{k-1})=\frac{f(x_{k-1})}{x_{k-1}-x_k},$$

που δίνει τον επαναληπτικό τύπο της μεθόδου

$$x_k=x_{k-1}-\frac{f(x_{k-1})}{f'(x_{k-1})},\quad k=1,2,\ldots,\quad x_0 \text{ δεδομένο.}$$

Η συνάρτηση g της επαναληπτικής μεθόδου Newton-Raphson είναι άρα

$$g(x)=x-\frac{f(x)}{f'(x)}.$$

Θεώρημα 1 (Απλή ρίζα). Έστω $\bar{x}$ μια λύση της εξίσωσης $f(x)=0$.

α) Αν η συνάρτηση f είναι ορισμένη και παραγωγίσιμη κοντά στο $\bar{x}$, η f' είναι συνεχής στο $\bar{x}$ και ισχύει $f'(\bar{x})\neq 0$, τότε, για κάθε αρχικό x_0 επιλεγμένο αρκετά κοντά στο $\bar{x}$, η μέθοδος Newton-Raphson συγκλίνει στο $\bar{x}$, και η σύγκλιση είναι υπεργραμμική.

β) Αν, επιπλέον, ισχύει

$$|f'(x)-f'(\bar{x})|\leq M|x-\bar{x}|,\quad \text{για } x \text{ κοντά στο } \bar{x},$$

(π.χ. αυτό ισχύει αν η $f''(\bar{x})$ υπάρχει), τότε η σύγκλιση είναι τετραγωνική.

Απόδειξη. α) Από τον ορισμό της παραγώγου και αφού $f(\bar{x})=0$, έχουμε

$$g'(\bar{x})=1-\lim_{x\to\bar{x}}\frac{1}{x-\bar{x}}\left[\frac{f(x)}{f'(x)}-0\right]=1-\lim_{x\to\bar{x}}\frac{1}{f'(x)}\left[\frac{f(x)-f(\bar{x})}{x-\bar{x}}\right]=1-\frac{f'(\bar{x})}{f'(\bar{x})}=0.$$

Συνεπώς, από το Θεώρημα 2 (και τα Σχόλιά του) η μέθοδος συγκλίνει υπεργραμμικά για κάθε x_0 επιλεγμένο αρκετά κοντά στο $\bar{x}$.

β) Αν η $f''(\bar{x})$ υπάρχει, τότε προφανώς, για x αρκετά κοντά στο $\bar{x}$, ισχύει

$$|f'(x) - f'(\bar{x})| \le M|x - \bar{x}|, \quad M \text{ σταθερά.}$$

Από το Θεώρημα Μέσης Τιμής και τις υποθέσεις, έχουμε, για k αρκετά μεγάλο

$$|f(x_{k-1}) - f(\bar{x}) - f'(\bar{x})(x_{k-1} - \bar{x})| = |f'(\xi_k) - f'(\bar{x})||x_{k-1} - \bar{x}| \le M|x_{k-1} - \bar{x}|^2 .$$

Από αυτή την ανισότητα και τις υποθέσεις, έχουμε, για k αρκετά μεγάλο

$$\begin{aligned} |x_k - \bar{x}| &= \left| x_{k-1} - \frac{f(x_{k-1})}{f'(x_{k-1})} - \bar{x} \right| \\ &\le \left| \frac{-[f(x_{k-1}) - f(\bar{x}) - f'(\bar{x})(x_{k-1} - \bar{x})]}{f'(x_{k-1})} \right| + \left| \frac{[f'(x_{k-1}) - f'(\bar{x})](x_{k-1} - \bar{x})}{f'(x_{k-1})} \right| \\ &\le c|x_{k-1} - \bar{x}|^2 . \end{aligned}$$

Συνεπώς η σύγκλιση είναι τετραγωνική.

Δεύτερη απόδειξη της τετραγωνικής σύγκλισης. Αν υποθέσουμε ότι $f \in C^2$ κοντά στη ρίζα $\bar{x}$, από τον τύπο Taylor δεύτερης τάξης με υπόλοιπο γύρω από το σημείο x_{k-1}, έχουμε, για k αρκετά μεγάλο (αφού $x_{k-1} \to \bar{x}$)

$$f(\bar{x}) = f(x_{k-1}) + f'(x_{k-1})(\bar{x} - x_{k-1}) + \frac{f''(\xi_{k-1})}{2}(\bar{x} - x_{k-1})^2 = 0,$$

με ξ_{k-1} μεταξύ x_{k-1} και $\bar{x}$, άρα

$$x_k - \bar{x} = x_{k-1} - \bar{x} - \frac{f(x_{k-1})}{f'(x_{k-1})} = \frac{f''(\xi_{k-1})}{2f'(x_{k-1})}(x_{k-1} - \bar{x})^2 ,$$

και αφού $f \in C^2$

$$|x_k - \bar{x}| \le c|x_{k-1} - \bar{x}|^2 .$$

Επιπλέον, παρατηρούμε ότι

$$\lim_{k\to\infty} \frac{(x_k - \bar{x})}{(x_{k-1} - \bar{x})^2} = \frac{f''(\bar{x})}{2f'(\bar{x})} .$$

Σημειωτέον ότι η υπόθεση $f'(\bar{x}) \ne 0$ του Θεωρήματος 1 σημαίνει ότι η ρίζα $\bar{x}$ της f είναι απλή, δηλαδή ότι η f γράφεται

$$f(x) = (x - \bar{x})h(x), \quad \text{με } h(\bar{x}) \ne 0 .$$

Όταν η ρίζα $\bar{x}$ είναι πολλαπλότητας $m > 1$, η f γράφεται

$$f(x) = (x - \bar{x})^m h(x), \quad \text{με } h(\bar{x}) \ne 0 ,$$

και ισχύει το ακόλουθο θεώρημα.

Θεώρημα 2 (Πολλαπλή ρίζα). Έστω $\bar{x}$ μια ρίζα της f πολλαπλότητας $m > 1$. Υποθέτουμε ότι η h είναι ορισμένη και παραγωγίσιμη και ότι η h είναι συνεχής στο $\bar{x}$. Τότε

$$g'(\bar{x}) = 1 - \frac{1}{m} < 1 ,$$

και η μέθοδος Newton-Raphson συγκλίνει γραμμικά στο $\bar{x}$ για κάθε x_0 αρκετά κοντά στο $\bar{x}$.

Απόδειξη. Θέτοντας $r := \frac{f}{f'}$, η r γράφεται κοντά στο $\bar{x}$

$$r(x) = \frac{(x-\bar{x})h(x)}{mh(x)+(x-\bar{x})h'(x)}.$$

Έχουμε $r(\bar{x}) = 0$ και

$$g'(\bar{x}) = 1 - \lim_{x\to\bar{x}} \frac{r(x)-r(\bar{x})}{x-\bar{x}} = 1 - \frac{h(\bar{x})}{mh(\bar{x})} = 1 - \frac{1}{m} < 1,$$

επομένως η μέθοδος συγκλίνει γραμμικά.

Στην περίπτωση μιας ρίζας $\bar{x}$ με (άγνωστη βέβαια εκ των πρότερων) πολλαπλότητα m, η ακόλουθη **τροποποιημένη μέθοδος Newton-Raphson**

$$x_k = x_{k-1} - m\frac{f(x_{k-1})}{f'(x_{k-1})}, \quad k = 1,2,..., \quad x_0 \text{ δεδομένο},$$

συγκλίνει υπεργραμμικά, αφού έχουμε εδώ

$$g'(\bar{x}) = 1 - \frac{m}{m} = 0,$$

και με κατάλληλες υποθέσεις ομαλότητας (π.χ. $f \in C^2$ κοντά σε μια ρίζα), τετραγωνικά. Δοκιμάζουμε τότε τη μέθοδο αυτή για διάφορες τιμές του $m = 1, 2,...$ και επιλέγουμε την τιμή με τη ταχύτερη (υπεργραμμική ή τετραγωνική) σύγκλιση, δηλ. την πολλαπλότητα της ρίζας.

Εκτίμηση Σφάλματος.
Αν η μέθοδος Newton-Raphson (ή η τροποποιημένη μέθοδος) συγκλίνει υπεργραμμικά ή τετραγωνικά, ισχύει εδώ η εκτίμηση σφάλματος (βλ. γενική μέθοδο Σταθερού Σημείου, ανισότητα (2)), για x_0 αρκετά κοντά σε μια ρίζα $\bar{x}$

$$|x_k - \bar{x}| \le |x_{k-1} - x_k|.$$

Λόγω της ανισότητας αυτής, χρησιμοποιούμε στον αλγόριθμο της μεθόδου το *κριτήριο σταματήματος*

$$|x_{k-1} - x_k| \le \varepsilon,$$

για $\varepsilon > 0$ μικρό, δεδομένο. Σημειωτέον ότι εδώ τα x_{k-1} και x_k είναι γνωστά.

Παράδειγμα. Έστω η εξίσωση $f(x) = x^3 - x - 1 = 0$. Εφαρμόζοντας τη μέθοδο Newton-Raphson

$$x_k = x_{k-1} - \frac{x_{k-1}{}^3 - x_{k-1} - 1}{3x_{k-1}{}^2 - 1},$$

με αρχικό $x_0 = 1.5$, βρίσκουμε τα αποτελέσματα του Πίνακα 1.

k	x_k
1	1.34782608695652
2	1.32520039895091
3	1.32471817399905
4	1.32471795724479
5	1.32471795724475

Πίνακας 1

Παρατηρούμε ότι τα ακριβή σημαντικά ψηφία διπλασιάζονται περίπου σε κάθε επανάληψη. Έχουμε την εκτίμηση σφάλματος

$$|x_5 - \bar{x}| \le |x_4 - x_5| \le 10^{-13}.$$

Αλγόριθμος.

Ορίζουμε τις συναρτήσεις f και f'

Διαβάζουμε τα m, n, ε, x

$f_x = f(x)$

Για $k = 1,...,n$ εκτελούμε μέχρι το 1

$y = x$

$f'_x = f'(x)$

Αν $f'_x = 0$, σταματάμε

$x = x - m\dfrac{f_x}{f'_x}$

$f_x = f(x)$

$e = |y - x|$

Εκτυπώνουμε τα k, x, f_x, e

1 Αν $e \le \varepsilon$, σταματάμε

Εκτυπώνουμε "Όριο επαναλήψεων" και σταματάμε

Β. ΠΑΡΑΛΛΑΓΕΣ ΤΗΣ ΜΕΘΟΔΟΥ NEWTON-RAPHSON

Η **μέθοδος Quasi-Newton** είναι μια παραλλαγή της μεθόδου Newton-Raphson, στην οποία εξοικονομούμε πράξεις αντικαθιστώντας στον τύπο την παράγωγο $f'(x_{k-1})$ με την παράγωγο $f'(z)$ σε ένα *σταθερό* σημείο z επιλεγμένο αρκετά κοντά σε μια ρίζα $\bar{x}$ της f

$$x_k = x_{k-1} - \frac{f(x_{k-1})}{f'(z)}, \quad k = 1,2,..., \quad x_0 \text{ δεδομένο.}$$

Θεώρημα 4. Έστω $\bar{x}$ μια λύση της εξίσωσης $f(x) = 0$. Υποθέτουμε ότι $f \in C^1$ κοντά στο $\bar{x}$, ότι $f'(\bar{x}) \ne 0$ και ότι το z βρίσκεται αρκετά κοντά στο $\bar{x}$. Τότε, για κάθε αρχικό x_0 επιλεγμένο αρκετά κοντά στο $\bar{x}$, η μέθοδος Quasi-Newton συγκλίνει στο $\bar{x}$ και η σύγκλιση είναι γραμμική

$$|x_k - \bar{x}| \le c|x_{k-1} - \bar{x}|.$$

Επιπλέον, ισχύει η εκτίμηση σφάλματος (βλ. §2)

$$|x_k - \bar{x}| \le |x_{k-1} - x_k|.$$

Απόδειξη. Έχουμε εδώ

$$g(x) = x - \frac{f(x)}{f'(z)},$$

και

$$|g'(\bar{x})| = \left|1 - \frac{f'(\bar{x})}{f'(z)}\right| << 1, \quad \text{για } z \text{ αρκετά κοντά στο } \bar{x},$$

οπότε το Θεώρημα προκύπτει άμεσα από το Θεώρημα 1, §2 (και τα σχόλιά του), και το Θεώρημα 2, §2.

Στη **διακριτή μέθοδο Newton-Raphson** αντικαθιστούμε στον τύπο της μεθόδου Newton-Raphson την παράγωγο $f'(x_{k-1})$ με την προσέγγισή της (συμμετρικές διηρημένες διαφορές)

$$\frac{f(x_{k-1}+h)-f(x_{k-1}-h)}{(x_{k-1}+h)-(x_{k-1}-h)}=\frac{f(x_{k-1}+h)-f(x_{k-1}-h)}{2h},$$

για δεδομένο μικρό $h>0$ (π.χ. $h=0.001$), οπότε ο τύπος γράφεται

$$x_k = x_{k-1} - f(x_{k-1})\frac{2h}{f(x_{k-1}+h)-f(x_{k-1}-h)}.$$

Αποφεύγουμε έτσι τελείως τον υπολογισμό της παραγώγου της f.

Θεώρημα 5. Έστω $\bar{x}$ μια λύση της εξίσωσης $f(x)=0$. Υποθέτουμε ότι $f\in C^2$ κοντά στο $\bar{x}$ και ότι $f'(\bar{x})\neq 0$. Τότε, για κάθε αρχικό x_0 επιλεγμένο αρκετά κοντά στο $\bar{x}$, η διακριτή μέθοδος Newton-Raphson συγκλίνει στο $\bar{x}$, η σύγκλιση είναι γραμμική

$$|x_k-\bar{x}|\le c|x_{k-1}-\bar{x}|,$$

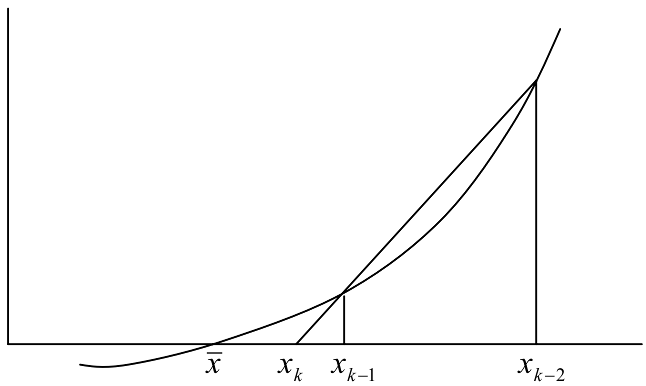
και έχουμε

$$|g'(\bar{x})|\le \varepsilon(h)h,$$

όπου $\varepsilon(h)\to 0$ όταν $h\to 0$ (και με $\varepsilon(h)\le c'h$ αν $f\in C^3$). Επιπλέον, ισχύει η εκτίμηση σφάλματος

$$|x_k-\bar{x}|\le |x_{k-1}-x_k|.$$

Μια άλλη χρήσιμη παραλλαγή της μεθόδου Newton-Raphson είναι η **μέθοδος της Τέμνουσας** (βλ. Σχήμα 2). Στη μέθοδο αυτή, αντικαθιστούμε στον τύπο της μεθόδου Newton-Raphson την παράγωγο $f'(x_{k-1})$ με την προσέγγιση (διηρημένες διαφορές)



Σχήμα 2

$$\frac{f(x_{k-2})-f(x_{k-1})}{x_{k-2}-x_{k-1}},$$

οπότε ο τύπος γράφεται

$$x_k = x_{k-1} - f(x_{k-1})\frac{x_{k-2}-x_{k-1}}{f(x_{k-2})-f(x_{k-1})},\quad k=2,3,\ldots,\quad x_0 \text{ και } x_1 \text{ δεδομένα.}$$

Αποφεύγουμε και εδώ τον υπολογισμό της παραγώγου της f. Σημειωτέον ότι απαιτούνται εδώ *δύο αρχικά* x_0 και x_1 για να ξεκινήσει η μέθοδος.

Θεώρημα 6. Έστω $\bar{x}$ μια ρίζα της f. Υποθέτουμε ότι $f \in C^2$ κοντά στο $\bar{x}$ και ότι $f'(\bar{x}) \neq 0$. Τότε, για κάθε αρχικά x_0, x_1 επιλεγμένα αρκετά κοντά στο $\bar{x}$, η μέθοδος της Τέμνουσας συγκλίνει στο $\bar{x}$, η σύγκλιση είναι *περίπου τάξης 1.6*

$$|x_k - \bar{x}| \approx\leq c|x_{k-1} - \bar{x}|^{1.6},$$

και ισχύει η εκτίμηση σφάλματος

$$|x_k - \bar{x}| \leq |x_{k-1} - x_k|.$$

Πρακτικά δηλαδή, για κάθε ζεύγος επαναλήψεων της μεθόδου Newton-Raphson απαιτούνται τρεις επαναλήψεις της μεθόδου της Τέμνουσας για να επιτύχουμε την ίδια ακρίβεια ($2\times 2 \approx 1.6\times 1.6\times 1.6$).

Παράδειγμα. Έστω η εξίσωση $f(x) = x^3 - x - 1 = 0$. Εφαρμόζοντας τη μέθοδο της Τέμνουσας με αρχικά $x_0 = 1$, $x_1 = 2$, βρίσκουμε τα αποτελέσματα του Πίνακα 2.

k	x_k
0	1.
1	2.
2	1.16666666666667
3	1.25311203319502
4	1.33720644584166
5	1.32385009638764
6	1.32470793653209
7	1.32471796535382
8	1.32471795724467
9	1.32471795724475

Πίνακας 2

Έχουμε την εκτίμηση σφάλματος

$$|x_9 - \bar{x}| \leq |x_8 - x_9| \leq 10^{-12}.$$

Αλγόριθμος.

Ορίζουμε τη συνάρτηση f
Διαβάζουμε τα n, ε, y, x
$f_y = f(y)$
$f_x = f(x)$
Για $k = 1,\dots,n$ εκτελούμε μέχρι το 1
$z = x$
$d = f_y - f_x$
$x = x - (y - x)f_x / d$
$y = z$

$f_y = f_x$

$f_x = f(x)$

$e = |y - x|$

Εκτυπώνουμε τα k, x, f_x, e

1 Αν $e \le \varepsilon$, σταματάμε

Εκτυπώνουμε "Όριο επαναλήψεων" και σταματάμε

Γ. ΜΕΘΟΔΟΣ NEWTON-RAPHSON ΓΙΑ ΜΙΓΑΔΙΚΕΣ ΕΞΙΣΩΣΕΙΣ

Η μέθοδος Newton-Raphson μπορεί να γενικευθεί για μιγαδικές εξισώσεις της μορφής

$$f(z) = 0,$$

όπου f μια μιγαδική συνάρτηση μιας μιγαδικής μεταβλητής z. Ο τύπος της μεθόδου γράφεται

$$z_k = z_{k-1} - \frac{f(z_{k-1})}{f'(z_{k-1})}, \quad k = 1,2,\ldots, \quad z_0 \in \mathbf{C} \text{ δεδομένο,}$$

όπου f' η **μιγαδική παράγωγος** της f που ορίζεται ως το όριο, αν υπάρχει

$$f'(z) := \lim_{|\Delta z| \to 0} \frac{f(z + \Delta z) - f(z)}{\Delta z},$$

όπου $|\Delta z|$ το μέτρο του Δz. Ενδιαφέρουσα εφαρμογή της μεθόδου είναι η περίπτωση μιας πολυωνυμικής εξίσωσης

$$f(z) := p(z) = a_n z^n + a_{n-1} z^{n-1} + \ldots + a_1 z + a_0 = 0.$$

Η παράγωγος του μιγαδικού πολυωνύμου p υπολογίζεται όπως για ένα πραγματικό

$$p'(z) = n a_n z^{n-1} + \ldots + a_1.$$

Ξεκινώντας από διάφορα σημεία του μιγαδικού επιπέδου $\mathbf{C}$, π.χ. από τα σημεία ενός αρκετά μεγάλου πλέγματος, και εφαρμόζοντας τη μιγαδική μέθοδο Newton-Raphson, μπορούμε να υπολογίσουμε έτσι όλες τις ρίζες μιας μιγαδικής πολυωνυμικής εξίσωσης.

Ισχύουν και για τη μιγαδική μέθοδο Newton-Raphson θεωρήματα σύγκλισης ανάλογα με την πραγματική μέθοδο.