Numerička matematika
13. predavanje

Saša Singer

PMF – Matematički odsjek, Zagreb

Sadržaj predavanja

- Rješavanje nelinearnih jednadžbi (nastavak):
  - Metoda jednostavne iteracije.
  - Metode višeg reda konvergencije.
  - Newtonova metoda za višestruke nultočke.
  - Primjeri za jednostruke i višestruke nultočke.
  - Primjeri metoda višeg reda konvergencije.

Metoda jednostavne iteracije

Uvodno o metodi jednostavne iteracije

Problem. Pretpostavimo da tražimo rješenje jednadžbe

$$x = \varphi(x).$$

Točke α za koje je $\alpha = \varphi(\alpha)$ zovu se fiksne točke funkcije φ.

Ideja. Definiramo jednostavnu iteracijsku funkciju (iteracijsku funkciju koja "pamti" samo jednu prethodnu točku), s

$$x_{n+1} = \varphi(x_n), \quad n \geq 0,$$

uz x_0 kao neku početnu aproksimaciju za α.

Primjer. Newtonovu metodu možemo interpretirati i kao jednostavnu iteraciju, uz

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

Reformulacija problema $f(x) = 0$

Uobičajeno, rješavamo jednadžbu $f(x) = 0$, pa taj problem treba reformulirati u problem jednostavne iteracije, odnosno, traženja fiksne točke. Za to postoji mnogo načina.

Primjer. Reformulirajmo problem "kvadratnog korijena" iz a

$$f(x) = x^2 - a = 0, \quad \text{za} \quad a > 0,$$

u oblik jednostavne iteracije.

To možemo napraviti na razne načine. Nekoliko mogućnosti:

1. $x = x^2 + x - a$ (dodamo x na obje strane) ili, općenitije, $x = x + c(x^2 - a)$, za neki $c \neq 0$,
2. $x = a/x$,
3. $x = \frac{1}{2}(x + a/x)$, što izlazi iz $x = x + \frac{1}{2}(a/x - x)$.

Jednostavne neprekidne iteracijske funkcije

Prirodno je pitanje kako se različite jednostavne iteracije ponašaju. Odgovor dobivamo sljedećim nizom tvrdnji.

Lema (Egzistencija). Neka je funkcija φ neprekidna na $[a,b]$ i neka je

$$a \leq \varphi(x) \leq b, \quad \forall x \in [a,b],$$

u oznaci $\varphi([a,b]) \subseteq [a,b]$. Tada jednostavna iteracija $x = \varphi(x)$ ima bar jedno rješenje, tj. bar jednu fiksnu točku α, na $[a,b]$.

Dokaz. Za neprekidnu funkciju $g(x) = \varphi(x) - x$ na $[a,b]$ vrijedi

$$g(a) = \varphi(a) - a \geq 0, \qquad g(b) = \varphi(b) - b \leq 0.$$

Dakle, funkcija $g(x) = \varphi(x) - x$ mijenja predznak na $[a,b]$, a to može samo prolaskom kroz nultočku α (neprekidna je!). ■

Jednostavne neprekidne iteracijske funkcije

Teorem (Kontrakcija). Neka je funkcija φ neprekidna na $[a, b]$ i neka je

$$\varphi([a, b]) \subseteq [a, b].$$

Pretpostavimo da postoji konstanta q, takva da je $0 < q < 1$, i vrijedi

$$|\varphi(x) - \varphi(y)| \leq q\,|x - y|, \quad \forall x, y \in [a, b].$$

To svojstvo kaže da je φ kontrakcija na $[a, b]$ (približava točke).

Onda funkcija φ ima jedinstvenu fiksnu točku α unutar $[a, b]$.

Nadalje, za proizvoljnu startnu točku $x_0 \in [a, b]$, niz iteracija

$$x_n = \varphi(x_{n-1}), \quad n \geq 1,$$

konvergira prema α.

Jednostavne neprekidne iteracijske funkcije

Dokaz. Prema prethodnoj lemi, postoji bar jedna fiksna točka $\alpha \in [a, b]$. Pokažimo da ne može postojati više od jedne.

Pretpostavimo suprotno, tj. da postoje barem dvije fiksne točke. Uzmimo bilo koje dvije od njih, nazovimo ih α i β. Budući da su to fiksne točke za φ, onda vrijedi

$$\varphi(\alpha) = \alpha \quad \text{i} \quad \varphi(\beta) = \beta.$$

Po pretpostavci, funkcija φ je kontrakcija na $[a, b]$, pa je

$$|\alpha - \beta| = |\varphi(\alpha) - \varphi(\beta)| \leq q|\alpha - \beta|,$$

odakle slijedi

$$(1 - q)\,|\alpha - \beta| \leq 0.$$

Zbog $1 - q > 0$, mora biti $\alpha = \beta$, što dokazuje i jedinstvenost.

Jednostavne neprekidne iteracijske funkcije

Dokažimo još konvergenciju niza jednostavnih iteracija $(x_n = \varphi(x_{n-1}), n \geq 1)$, za proizvoljnu startnu točku $x_0 \in [a, b]$.

Uočimo da $x_{n-1} \in [a, b]$ povlači da je $x_n = \varphi(x_{n-1}) \in [a, b]$. Nadalje, jer je φ kontrakcija, vrijedi

$$|\alpha - x_n| = |\varphi(\alpha) - \varphi(x_{n-1})| \leq q|\alpha - x_{n-1}|.$$

Odavde, indukcijom po n, dobivamo

$$|\alpha - x_n| \leq q^n|\alpha - x_0|, \quad n \geq 1.$$

Ako pustimo $n \to \infty$, onda $q^n \to 0$, pa vrijedi $x_n \to \alpha$. ■

Primijetimo da posljednja formula znači da metoda jednostavne iteracije konvergira linearno, s faktorom q.

Ocjena greške za metodu jednostavne iteracije

Uz pretpostavke prethodnog teorema — da je

- φ neprekidna kontrakcija s faktorom $q < 1$ na $[a, b]$,

lako se izvodi ocjena greške za metodu jednostavne iteracije.

Za dvije susjedne iteracije $x_n = \varphi(x_{n-1})$ i $x_{n-1} = \varphi(x_{n-2})$ vrijedi

$$|x_n - x_{n-1}| = |\varphi(x_{n-1}) - \varphi(x_{n-2})| \leq q|x_{n-1} - x_{n-2}|.$$

Prethodnu relaciju, induktivno po n, možemo raspisati kao

$$|x_n - x_{n-1}| \leq q|x_{n-1} - x_{n-2}| \leq \cdots \leq q^{n-1}|x_1 - x_0|.$$

Za ocjenu prave greške trebamo ocjenu vrijednosti $|\alpha - x_n|$, za bilo koji $n \geq 0$.

Ocjena greške za metodu jednostavne iteracije

Zato, za fiksni n, gledamo ponašanje niza $|x_{n+p} - x_n|$, uz $p > 0$, s idejom da napravimo limes $p \to \infty$. Izlazi

$$
\begin{aligned}
|x_{n+p} - x_n| &= |x_{n+p} - x_{n+p-1} + x_{n+p-1} - \cdots + x_{n+1} - x_n| \\
&\le |x_{n+p} - x_{n+p-1}| + \cdots + |x_{n+1} - x_n| \\
&\le q^p |x_n - x_{n-1}| + \cdots + q|x_n - x_{n-1}| \\
&= q(q^{p-1} + \cdots + 1)\,|x_n - x_{n-1}| \\
&= q\,\frac{1 - q^p}{1 - q}\,|x_n - x_{n-1}| \le \text{(vrijedi } 1 - q^p \le 1) \\
&\le \frac{q}{1 - q}\,|x_n - x_{n-1}|.
\end{aligned}
$$

Na limesu kad $p \to \infty$, vrijedi $x_{n+p} \to \alpha$.

Ocjena greške za metodu jednostavne iteracije

Lijeva strana postaje $|\alpha - x_n|$ i izlazi sljedeća ocjena pogreške

$$\begin{aligned} |\alpha - x_n| &\leq \frac{q}{1-q}\,|x_n - x_{n-1}| \\ &\leq \text{(iskoristimo ocjenu } |x_n - x_{n-1}| \leq q^{n-1}|x_1 - x_0|) \\ &\leq \frac{q^n}{1-q}\,|x_1 - x_0|. \end{aligned}$$

Ako želimo da je $|\alpha - x_n| \leq \varepsilon$, dovoljno je tražiti da je desna strana neke od prethodnih nejednakosti manja ili jednaka ε.

Za desnu stranu možemo uzeti i prvi red, koji ovisi o x_n i x_{n-1},

$$\frac{q}{1-q}\,|x_n - x_{n-1}| \leq \varepsilon,$$

pa ćemo dobiti ...

Kriteriji zaustavljanja

... dinamički kriterij za zaustavljanje procesa iteracija

$$|x_n - x_{n-1}| \leq \frac{\varepsilon(1-q)}{q}.$$

Ako želimo "rano" znati potreban broj iteracija n, onda treba zahtijevati (donji red ovisi samo o prve dvije iteracije x_0 i x_1)

$$\frac{q^n}{1-q}\,|x_1 - x_0| \leq \varepsilon,$$

pa dobivamo

$$n \geq \frac{\log \dfrac{\varepsilon(1-q)}{|x_1 - x_0|}}{\log q} = \frac{\log \varepsilon + \log(1-q) - \log|x_1 - x_0|}{\log q}.$$

Kriteriji zaustavljanja

Kriterij zaustavljanja možemo napisati i tako da ovisi samo o rubovima intervala a i b, neovisno o iteracijama.

U drugoj lemi, kod dokaza konvergencije, pokazali smo da vrijedi

$$|\alpha - x_n| \leq q^n |\alpha - x_0|.$$

Za start x_0 vrijedi $|\alpha - x_0| \leq b - a$, pa je $|\alpha - x_n| \leq q^n (b - a)$. Iz zahtjeva

$$q^n (b - a) \leq \varepsilon,$$

dobivamo ocjenu “unaprijed” za broj iteracija n

$$n \geq \frac{\log \dfrac{\varepsilon}{b - a}}{\log q} = \frac{\log \varepsilon - \log(b - a)}{\log q}.$$

Opći slučaj — kontrakcija i Banachov teorem

Napomena. U općem slučaju metode jednostavnih iteracija (ili sukcesivnih aproksimacija), iteracijska funkcija φ ne mora biti neprekidna — što smo koristili u prvoj lemi (egzistencija α).

Dovoljno je pretpostaviti da je

- φ kontrakcija, ali na potpunom metričkom prostoru X.

To je tzv. Banachov teorem o fiksnoj točki.

Skica dokaza. Prvo se dokaže da je niz iteracija Cauchyjev niz (kao u ocjeni greške, uz zamjenu $|x - y|$ s $d(x, y)$ = udaljenost)

$$|x_{n+p} - x_n| \leq \frac{q}{1-q} |x_n - x_{n-1}| \leq \frac{q^n}{1-q} |x_1 - x_0|.$$

Zatim, potpunost prostora $X \implies$ konvergencija niza $x_n \to \alpha$. Na kraju se pokaže da je α fiksna točka za φ i jedinstvenost. ■

Derivabilne iteracijske funkcije i metode višeg reda

Jednostavne derivabilne iteracijske funkcije

Pretpostavimo sad da je φ neprekidno derivabilna na $[a, b]$.

Po teoremu srednje vrijednosti, za bilo koje $x, y \in [a, b]$, vrijedi

$$\varphi(x) - \varphi(y) = \varphi'(\xi)(x - y),$$

gdje je ξ između x i y, tj. vrijedi $\xi \in [a, b]$. Definiramo

$$q := M_1 = \max_{x \in [a,b]} |\varphi'(x)|.$$

Onda možemo pisati

$$|\varphi(x) - \varphi(y)| \leq q|x - y|, \quad \forall x, y \in [a, b].$$

Primijetite da q, općenito, može biti i veći od 1. No, ako je $q < 1$ i još vrijedi $\varphi([a, b]) \subseteq [a, b]$, onda je φ kontrakcija.

Jednostavne derivabilne iteracijske funkcije

Teorem. Neka je $\varphi \in C^1[a,b]$, takva da je $\varphi([a,b]) \subseteq [a,b]$. Ako je

$$q := M_1 = \max_{x\in[a,b]} |\varphi'(x)| < 1,$$

onda jednadžba $x = \varphi(x)$ ima točno jedno rješenje $\alpha \in [a,b]$.

- Za proizvoljnu startnu točku $x_0 \in [a,b]$ i niz jednostavnih iteracija definiran s $x_{n+1} = \varphi(x_n)$, za $n \geq 0$, vrijedi

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

$$|\alpha - x_n| \leq q^n |\alpha - x_0|, \quad n \geq 0,$$

$$\lim_{n\to\infty} \frac{\alpha - x_{n+1}}{\alpha - x_n} = \varphi'(\alpha).$$

Jednostavne derivabilne iteracijske funkcije

Dokaz. Sve tvrdnje ovog teorema su dokazane u prethodnom teoremu, osim zadnje tvrdnje o linearnoj brzini konvergencije.

Po teoremu srednje vrijednosti, imamo

$$\alpha - x_{n+1} = \varphi(\alpha) - \varphi(x_n) = \varphi'(\xi_n)(\alpha - x_n), \quad n \geq 0,$$

gdje je ξ_n neki broj između α i x_n.

Budući da $x_n \to \alpha$, onda i $\xi_n \to \alpha$. Zbog neprekidnosti derivacije φ' u fiksnoj točki α, onda vrijedi i

$$\lim_{n\to\infty} \frac{\alpha - x_{n+1}}{\alpha - x_n} = \lim_{n\to\infty} \varphi'(\xi_n) = \varphi'(\alpha). \qquad \blacksquare$$

Bitna pretpostavka $q < 1$

Pretpostavka $q < 1$ u prethodnom teoremu je ključna.

Kontraprimjer. Pretpostavimo "samo" da je $|\varphi'(\alpha)| > 1$, u fiksnoj točki α funkcije φ.

Za neku startnu točku $x_0 \in [a, b]$, generiramo niz jednostavnih iteracija $x_{n+1} = \varphi(x_n)$. Zbog $\alpha = \varphi(\alpha)$, onda vrijedi

$$\alpha - x_{n+1} = \varphi(\alpha) - \varphi(x_n) = \varphi'(\xi_n)(\alpha - x_n).$$

Za bilo koji x_n dovoljno blizu α, mora biti $|\varphi'(\xi_n)| > 1$. Ako je $x_n \neq \alpha$, onda je

$$|\alpha - x_{n+1}| > |\alpha - x_n|.$$

Dakle, konvergencija metode nije moguća! Upravo suprotno, imamo divergenciju (iteracije se udaljuju od α, ako su blizu α).

Pojednostavljeni — "lokalni" teorem

Prethodni teorem možemo izreći i u "lokalnoj" formi — oko α.

Teorem. Neka je α rješenje jednostavne iteracije $x = \varphi(x)$ i neka je φ neprekidno diferencijabilna na nekoj okolini od α. Ako je $|\varphi'(\alpha)| < 1$, onda vrijede svi rezultati prethodnog teorema — uz pretpostavku da je start x_0 dovoljno blizu α.

Dokaz. Postoji $\varepsilon > 0$ takav da za interval $I = [\alpha - \varepsilon, \alpha + \varepsilon]$ vrijedi

$$\max_{x \in I} |\varphi'(x)| \leq q < 1.$$

Tada je $\varphi(I) \subseteq I$ (dovoljno je $q \leq 1$), jer $|\alpha - x| \leq \varepsilon$ povlači

$$|\alpha - \varphi(x)| = |\varphi(\alpha) - \varphi(x)| = |\varphi'(\xi)||\alpha - x| \leq q|\alpha - x| \leq \varepsilon.$$

Sada možemo primijeniti prethodni teorem za $[a, b] = I$. ■

Primjer iteracijskih funkcija za $\sqrt{a}$

Primjer. Za problem $x^2 - a = 0$, gdje je $a > 0$, definirali smo tri jednostavne iteracijske funkcije:

1. $x = x^2 + x - a$, ili općenitije, $x = x + c(x^2 - a)$, za $c \neq 0$,
2. $x = a/x$,
3. $x = \frac{1}{2}(x + a/x)$.

Ispitajte konvergenciju ovih iteracijskih funkcija oko $\alpha = \sqrt{a}$.

1. Za $\varphi(x) = x^2 + x - a$, izlazi $\varphi'(x) = 2x + 1$. U $x = \sqrt{a}$ je

$$\varphi'(\sqrt{a}) = 2\sqrt{a} + 1 > 1,$$

pa ta iteracijska funkcija neće konvergirati. Baš suprotno, za bilo koji start x_0, ove iteracije divergiraju!

Primjer iteracijskih funkcija za $\sqrt{a}$

1. Općenito, $\varphi(x) = x + c(x^2 - a)$, pa je $\varphi'(x) = 1 + 2cx$ i
$$\varphi'(\sqrt{a}) = 1 + 2c\sqrt{a}.$$
Da bismo osigurali lokalnu konvergenciju, mora biti
$$-1 < 1 + 2c\sqrt{a} < 1,$$
odnosno,
$$-\frac{1}{\sqrt{a}} < c < 0.$$

2. Za $\varphi(x) = a/x$, dobivamo $\varphi'(x) = -a/x^2$, pa je
$$\varphi'(\sqrt{a}) = -1,$$
što znači da iteracijska funkcija neće konvergirati. Niz iteracija je $x_0,\ a/x_0,\ x_0,\ a/x_0,\ \ldots$ (periodički niz).

Primjer iteracijskih funkcija za $\sqrt{a}$

3. Za $\varphi(x) = \frac{1}{2}\,(x + a/x)$, izlazi $\varphi'(x) = \frac{1}{2}\,(1 - a/x^2)$, pa je

$$\varphi'(\sqrt{a}) = 0.$$

   Zato ova iteracijska funkcija konvergira u okolini $\alpha = \sqrt{a}$.

Posljednja iteracijska funkcija je baš Newtonova metoda za jednadžbu $x^2 - a = 0$, a poznavali su ju još Babilonci. ■

Vidimo da metoda jednostavne iteracije može imati

- lokalnu konvergenciju koja je brža od linearne.

Stvarni “krivac” za kvadratnu konvergenciju je $\varphi'(\alpha) = 0$.

Slično tome, jednostavne iteracijske funkcije mogu poslužiti za konstrukciju iterativnih metoda proizvoljno visokog reda p.

Iterativne metode višeg reda konvergencije

Teorem. Neka je α rješenje jednadžbe $x = \varphi(x)$ i neka je φ

- p puta neprekidno diferencijabilna za sve x u okolini α, za neki $p \geq 2$.

Nadalje, pretpostavimo da je

$$\varphi'(\alpha) = \cdots = \varphi^{(p-1)}(\alpha) = 0.$$

Ako je startna točka x_0 dovoljno blizu α, onda niz iteracija

$$x_{n+1} = \varphi(x_n), \quad n \geq 0,$$

konvergira prema α s redom konvergencije (barem) p i vrijedi

$$\lim_{n\to\infty} \frac{\alpha - x_{n+1}}{(\alpha - x_n)^p} = (-1)^{p-1} \frac{\varphi^{(p)}(\alpha)}{p!}.$$

Iterativne metode višeg reda konvergencije

Dokaz. Funkciju φ razvijemo, u okolini od α, u Taylorov polinom stupnja p, s tim da najviši član predstavlja ostatak. Zatim uvrstimo $x = x_n$, pa dobijemo

$$\varphi(x_n) = \varphi(\alpha) + \varphi'(\alpha)(x_n - \alpha) + \cdots + \frac{\varphi^{(p-1)}(\alpha)}{(p-1)!}(x_n - \alpha)^{p-1} + \frac{\varphi^{(p)}(\xi_n)}{p!}(x_n - \alpha)^p,$$

za neki ξ_n između x_n i α.

Sad iskoristimo da je $\varphi(\alpha) = \alpha$, $\varphi(x_n) = x_{n+1}$ i pretpostavku da za derivacije vrijedi $\varphi^{(k)}(\alpha) = 0$, za $k = 1, \ldots, p-1$. Izlazi

$$x_{n+1} = \alpha + \frac{\varphi^{(p)}(\xi_n)}{p!}(x_n - \alpha)^p,$$

Iterativne metode višeg reda konvergencije

odnosno,

$$\alpha - x_{n+1} = -\frac{\varphi^{(p)}(\xi_n)}{p!}\,(x_n - \alpha)^p.$$

Zbog $\varphi'(\alpha) = 0 < 1$, iz “lokalnog” teorema slijedi da

- niz iteracija x_n konvergira prema α, za svaku startnu točku x_0 koja je dovoljno blizu α (lokalna konvergencija).

Iz $x_n \to \alpha$ slijedi i $\xi_n \to \alpha$. Na kraju, u gornjoj relaciji, na limesu $n \to \infty$, iskoristimo neprekidnost $\varphi^{(p)}$ u α. Izlazi

$$\lim_{n\to\infty} \frac{\alpha - x_{n+1}}{(\alpha - x_n)^p} = (-1)^{p-1} \lim_{n\to\infty} \frac{\varphi^{(p)}(\xi_n)}{p!} = (-1)^{p-1}\,\frac{\varphi^{(p)}(\alpha)}{p!}.$$

■

Za $p = 1$, ovaj rezultat odgovara ranijem “lokalnom” teoremu!

Primjer — analiza Newtonove metode

Primjer. Primjenom prethodnog teorema, analizirajmo red konvergencije Newtonove metode u okolini jednostruke nultočke α funkcije f. Pripadna iteracijska funkcija φ je

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

Deriviranjem dobivamo da je

$$\varphi'(x) = 1 - \frac{[f'(x)]^2 - f(x)f''(x)}{[f'(x)]^2} = \frac{f(x)f''(x)}{[f'(x)]^2}.$$

Nultočka α je jednostruka, pa je $f(\alpha) = 0$ i $f'(\alpha) \neq 0$. Onda je

$$\varphi'(\alpha) = 0,$$

tj. Newtonova metoda konvergira (barem) kvadratno oko α.

Primjer — analiza Newtonove metode

Za detaljniju analizu, pogledajmo drugu derivaciju $\varphi''(\alpha)$. Deriviranjem $\varphi'(x)$ u produktnom obliku, dobivamo

$$\varphi''(x) = \left(f(x) \, \frac{f''(x)}{[f'(x)]^2} \right)' = f'(x) \, \frac{f''(x)}{[f'(x)]^2} + f(x) \left(\frac{f''(x)}{[f'(x)]^2} \right)'$$

$$= \frac{f''(x)}{f'(x)} + f(x) \left(\frac{f''(x)}{[f'(x)]^2} \right)'.$$

Zbog $f(\alpha) = 0$ i $f'(\alpha) \neq 0$, odmah izlazi

$$\varphi''(\alpha) = \frac{f''(\alpha)}{f'(\alpha)}.$$

Ako je $f''(\alpha) \neq 0$, red konvergencije Newtonove metode je 2.
Ako je $f''(\alpha) = 0$, red konvergencije je barem 3.

Newtonova metoda za višestruke nultočke

Multiplicitet nultočke funkcije

Definicija (Multiplicitet nultočke). Neka je $f(\alpha) = 0$. Ako postoji prirodni broj m, takav da je

$$f(x) = (x - \alpha)^m g(x), \quad g(\alpha) \neq 0,$$

gdje je g neprekidna funkcija u okolini od α, onda nultočka α ima multiplicitet (višestrukost, kratnost ili red) m. ■

Teorem. Pretpostavimo da funkcija f ima neprekidnu m-tu derivaciju u okolini od α, tj. f je klase C^m oko α. Onda je

- α nultočka od f multipliciteta m, ako i samo ako vrijedi

$$f(\alpha) = f'(\alpha) = \cdots = f^{(m-1)}(\alpha) = 0, \quad f^{(m)}(\alpha) \neq 0.$$

Dokaz "$\Leftarrow$" ide direktno iz Taylorovog razvoja do stupnja m, za funkciju f oko α (slično kao malo prije — u teoremu za φ).

Nultočka funkcije i njezinih derivacija

Obrat "$\Rightarrow$" je nešto složeniji, jer g ne mora biti derivabilna. Zato ne "ide" Leibnizovo pravilo za derivaciju produkta!

Početak: Za $k = 0, \ldots, m$, definiramo funkciju g_k oko α, kao

$$g_k(x) = \frac{f^{(k)}(x)}{(x-\alpha)^{m-k}}, \qquad x \neq \alpha.$$

Uočimo da je $g_0(x) = g(x)$. Po pretpostavci, g_0 je neprekidna u α i vrijedi $f(\alpha) = 0$, $g_0(\alpha) \neq 0$ (baza indukcije, zbog $m \geq 1$).

Korak: Neka je $k \geq 0$ i $k < m$, i uzmimo da za k vrijedi

$$f^{(k)}(\alpha) = 0, \quad \text{i postoji} \quad \lim_{x \to \alpha} g_k(x) = g_k(\alpha) \neq 0,$$

gdje je $g_k(\alpha)$ definiran proširenjem po neprekidnosti, tako da je g_k neprekidna u α, pa onda i oko α (iz definicije za $x \neq \alpha$).

Nultočka funkcije i njezinih derivacija

Onda je

$$\frac{f^{(k)}(x) - f^{(k)}(\alpha)}{x - \alpha} = \frac{f^{(k)}(x)}{x - \alpha} = (x - \alpha)^{m-k-1} g_k(x).$$

Desna strana je neprekidna u α, pa prijelazom na limes $x \to \alpha$ slijedi

$$f^{(k+1)}(\alpha) = \begin{cases} 0, & \text{za } k + 1 < m, \\ g_k(\alpha), & \text{za } k + 1 = m. \end{cases}$$

Treba još pokazati da postoji $\lim\limits_{x \to \alpha} g_{k+1}(x)$ i da je $g_{k+1}(\alpha) \neq 0$.

Ako je $k + 1 = m$, onda je (po definiciji) $g_m(x) = f^{(m)}(x)$, pa neprekidnost $f^{(m)}$ u α daje

$$g_m(\alpha) = g_{m-1}(\alpha) \neq 0.$$

Nultočka funkcije i njezinih derivacija

Za $k+1 < m$, iz definicije dobivamo neodređeni oblik $0/0$, kojeg računamo "obratnim" L'Hospitalovim pravilom, tj.

- integriramo brojnik i nazivnik, a ne deriviramo.

Izlazi

$$\begin{aligned}
\lim_{x\to\alpha} g_{k+1}(x) &= \lim_{x\to\alpha} \frac{f^{(k+1)}(x)}{(x-\alpha)^{m-k-1}} = \{\ \text{L'Hospital}\ \} \\
&= \lim_{x\to\alpha} \frac{f^{(k)}(x)}{\frac{1}{m-k}\,(x-\alpha)^{m-k}} \\
&= (m-k) \lim_{x\to\alpha} g_k(x) = (m-k) g_k(\alpha) \neq 0.
\end{aligned}$$

Na kraju, vidimo da je $g_k(\alpha) = m(m-1)\cdots(m-k+1)g(\alpha)$, za $k = 1, \ldots, m$. Posebno, vrijedi $g_1(\alpha) = mg(\alpha)$. ∎

Veza nultočke funkcije i derivacije

U nastavku, radi jednostavnosti, pretpostavljamo da je i funkcija g dovoljno glatka oko α, tako da ju možemo derivirati koliko puta treba. Onda prethodni obrat ide puno lakše.

Na primjer, uzmimo da je g' neprekidna oko α. Pokažimo da

- ako funkcija f ima nultočku multipliciteta m u α,
- onda derivacija f' ima nultočku multipliciteta $m-1$ u α.

Dokaz. Napišimo f u obliku

$$f(x) = (x-\alpha)^m \, g(x), \quad g(\alpha) \neq 0.$$

Onda je

$$\begin{aligned} f'(x) &= m(x-\alpha)^{m-1} \, g(x) + (x-\alpha)^m \, g'(x) \\ &= (x-\alpha)^{m-1} \Big(m g(x) + (x-\alpha) \, g'(x) \Big). \end{aligned}$$

Veza nultočke funkcije i derivacije

Zatim, definiramo funkciju g_1 na okolini od α, kao drugi faktor iz prethodnog produkta

$$g_1(x) := m g(x) + (x - \alpha)\, g'(x),$$

tako da je

$$f'(x) = (x - \alpha)^{m-1}\, g_1(x).$$

Iz pretpostavke da je g' neprekidna u okolini od α, slijedi da su f' i g_1, također, neprekidne oko α. U točki α je

$$g_1(\alpha) = m g(\alpha) + (\alpha - \alpha)\, g'(\alpha) = m g(\alpha) \neq 0,$$

što pokazuje da f' ima $(m-1)$-struku nultočku u α. ■

Ovu formulu za $g_1(\alpha)$ koristimo više puta u nastavku.

Dodatno, uzimamo da je g klase C^2 oko α, iako ide i bez toga.

Konvergencija Newtona za višestruku nultočku

Analizirajmo što će se dogoditi s konvergencijom Newtonove metode, ako funkcija f ima višestruku nultočku u α.

Newtonovu metodu promatramo kao jednostavnu iteraciju,

$$x_{n+1} = \varphi(x_n), \quad \varphi(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)}.$$

Pretpostavimo da

- f ima m-struku nultočku u α, za neki $m \geq 2$, i da je
- f dovoljno glatka na okolini od α — barem klase C^{m+1}, tako da je iteracijska funkcija φ barem klase C^m.

Onda je

$$\begin{aligned} f(x) &= (x-\alpha)^m \, g(x), & g(\alpha) &\neq 0, \\ f'(x) &= (x-\alpha)^{m-1} \, g_1(x), & g_1(\alpha) &\neq 0. \end{aligned}$$

Konvergencija Newtona za višestruku nultočku

Kad uvrstimo ove relacije za f i f', dobivamo

$$\varphi(x) = x - \frac{(x-\alpha)^m \, g(x)}{(x-\alpha)^{m-1} \, g_1(x)} = x - (x-\alpha)\, \frac{g(x)}{g_1(x)}.$$

Deriviranjem izlazi

$$\varphi'(x) = 1 - \frac{g(x)}{g_1(x)} - (x-\alpha) \left(\frac{g(x)}{g_1(x)} \right)'.$$

U nultočki α je

$$\varphi'(\alpha) = 1 - \frac{g(\alpha)}{g_1(\alpha)} = 1 - \frac{g(\alpha)}{m g(\alpha)} = 1 - \frac{1}{m}.$$

Za $m \geq 2$, vrijedi $\varphi'(\alpha) \neq 0$. Prema ranijem teoremu, to znači

- da Newtonova metoda onda konvergira samo linearno!

Konvergencija Newtona za višestruku nultočku

Dodatno, faktor linearne konvergencije je $\varphi'(\alpha) = 1 - 1/m$, što je vrlo sporo. U prosjeku, to je

- podjednako brzo kao bisekcija, za $m = 2$,
- ili čak lošije od bisekcije, za $m \geq 3$.

Newtonovu metodu možemo popraviti na dva načina:

- ako unaprijed točno znamo red m nultočke,
- ako ne znamo red (višestruke) nultočke.

Ako znamo m, onda u okolini m-struke nultočke definiramo iteracijsku funkciju

$$\varphi(x) = x - m\,\frac{f(x)}{f'(x)}.$$

Newtonova metoda kad znamo red nultočke

Na isti način kao malo prije, redom, dobivamo

$$\varphi(x) = x - m(x - \alpha)\,\frac{g(x)}{g_1(x)},$$

$$\varphi'(x) = 1 - m\,\frac{g(x)}{g_1(x)} - m(x - \alpha)\left(\frac{g(x)}{g_1(x)}\right)',$$

pa je

$$\varphi'(\alpha) = 1 - m\,\frac{g(\alpha)}{g_1(\alpha)} = 1 - m\,\frac{g(\alpha)}{m\,g(\alpha)} = 1 - m\,\frac{1}{m} = 0.$$

To pokazuje da ova modifikacija Newtonove metode,

- s m-strukom korekcijom,
- osigurava barem kvadratnu konvergenciju, za bilo koji m.

Newtonova metoda kad ne znamo red nultočke

Što ćemo napraviti ako unaprijed ne znamo m? Primijetimo da funkcija u — to je korekcija u običnoj Newtonovoj metodi,

$$u(x) := \frac{f(x)}{f'(x)} = \frac{(x-\alpha)^m\, g(x)}{(x-\alpha)^{m-1}\, g_1(x)} = (x-\alpha)\,\frac{g(x)}{g_1(x)},$$

uvijek ima jednostruku nultočku u α, jer je $g(\alpha)/g_1(\alpha) \neq 0$.

Dakle, obična Newtonova metoda, primijenjena na u (ne na f)

$$x_{n+1} = x_n - \frac{u(x_n)}{u'(x_n)},$$

gdje je

$$u'(x) = \frac{[f'(x)]^2 - f(x)f''(x)}{[f'(x)]^2} = 1 - \frac{f''(x)}{f'(x)}\,u(x),$$

konvergira barem kvadratno, iako ne znamo red nultočke!

Ostale metode kad ne znamo red nultočke

Sasvim isto vrijedi i za sve ostale metode, koje imaju

- red konvergencije $p > 1$, u okolini jednostruke nultočke α.

Ako se metoda "uspori" u okolini višestruke nultočke,

- treba metodu primijeniti na $u = f/f'$, umjesto na f.

Na primjer, za višestruke nultočke, metodu sekante treba primijeniti na funkciju u,

$$x_{n+1} = x_n - u(x_n)\,\frac{x_n - x_{n-1}}{u(x_n) - u(x_{n-1})}.$$

Dodatna "cijena" = računanje još jedne derivacije više.

Na primjer, u Newtonovoj metodi, za u' treba računati i f'', a u metodi sekante, za u treba računati i f'.

Primjeri za jednostruke nultočke

Numerički red konvergencije

U praksi se može sasvim dobro

- numerički procijeniti red konvergencije iterativne metode.

Kako se to radi?

Red konvergencije niza iteracija $(x_n, n \in \mathbb{N}_0)$, koji konvergira prema nultočki α, je najveći eksponent p, uz $p \geq 1$, za koji vrijedi

$$\lim_{n\to\infty} \frac{|\alpha - x_{n-1}|}{|\alpha - x_{n-2}|^p} = c > 0.$$

Ovdje je x_n niz iteracija generiran nekom metodom, uz neki start dovoljno blizu nultočke (ranije su indeksi bili n i $n-1$).

Ovako dobiveni p i c su “teorijske” vrijednosti koje vrijede asimptotski — na limesu $n \to \infty$.

Numerički red konvergencije

Definicijsku relaciju ne možemo direktno iskoristiti za računanje p i c, jer ne znamo nultočku α.

Praktični pogled. Ako su iteracije x_k dovoljno blizu α, onda limes možemo "zaboraviti", pa je

$$|\alpha - x_k| \approx c|\alpha - x_{k-1}|^p,$$

za dovoljno velike k. Umjesto α, uzmemo aproksimaciju za α!

Dakle, ako smo dovoljno blizu nultočke, onda možemo uzeti da je $\alpha \approx x_n$, a za k uzmemo $k = n-1, n-2$. Onda vrijedi

$$|x_n - x_{n-1}| = c_n|x_n - x_{n-2}|^{p_n},$$

$$|x_n - x_{n-2}| = c_n|x_n - x_{n-3}|^{p_n},$$

s tim da očekujemo da je $p_n \approx p$ i $c_n \approx c$, za dovoljno velike n.

Numerički red konvergencije

Dijeljenjem dobivamo

$$\frac{|x_n - x_{n-1}|}{|x_n - x_{n-2}|} = \left(\frac{|x_n - x_{n-2}|}{|x_n - x_{n-3}|} \right)^{p_n},$$

pa logaritmiranjem izlazi tzv. numerički red konvergencije p_n

$$p_n = \frac{\log(\,|x_n - x_{n-1}|/|x_n - x_{n-2}|\,)}{\log(\,|x_n - x_{n-2}|/|x_n - x_{n-3}|\,)}.$$

Nakon toga, c_n možemo dobiti (recimo) iz prve relacije, kao

$$c_n = \frac{|x_n - x_{n-1}|}{|x_n - x_{n-2}|^{p_n}}.$$

Ovaj račun možemo provesti tek za $n \geq 3$, a vrijednosti p_n i c_n ovise o n — pa treba pratiti njihovo ponašanje kroz iteracije.

Jednostavni primjer

Primjer. Za uspoređivanje metoda za nalaženje nultočaka, izračunajmo $\sqrt[3]{1.5}$. Problem možemo interpretirati kao traženje realne, pozitivne nultočke funkcije (polinoma)

$$f(x) = x^3 - 1.5.$$

Jednostavna lokacija nultočke je $\alpha \in [1, 2]$. Iz neprekidnosti funkcije f i

$$f(1) = -0.5 < 0, \quad f(2) = 6.5 > 0,$$

znamo da sigurno postoji nultočka $\alpha \in [1, 2]$. To je i jedina realna nultočka funkcije f, jer f strogo raste na $\langle -\infty, 0 \rangle$ (tamo je $f < 0$) i na $\langle 0, \infty \rangle$.

Svo računanje provedeno je u `extended` tipu ($u \approx 5.4 \cdot 10^{-20}$).

Metoda bisekcije

Pokažimo kako se ponaša metoda bisekcije ako je $[a, b] = [1, 2]$, a tražena točnost je

- $\varepsilon = 10^{-8}$,
- $\varepsilon = 10^{-18}$.

Na sljedeće dvije stranice, sa z_n je označena veličina

$$z_n := f(a_n) \cdot f(x_n).$$

Primijetite da pogrešno očitan predznak od z_n (umjesto < 0, očitamo > 0, ili obratno)

- možemo detektirati samo gledanjem $f(x_n)$ — uglavnom, tada $f(x_n) \not\to 0$,
- ali i dalje ne znamo točno mjesto gdje smo pogriješili.

Metoda bisekcije, točnost $\varepsilon = 10^{-8}$ (početak)

n	a_n	b_n	x_n	$f(x_n)$	z_n
0	1.000000000	2.000000000	1.500000000	1.875000000	< 0
1	1.000000000	1.500000000	1.250000000	0.453125000	< 0
2	1.000000000	1.250000000	1.125000000	−0.076171875	> 0
3	1.125000000	1.250000000	1.187500000	0.174560547	< 0
4	1.125000000	1.187500000	1.156250000	0.045806885	< 0
5	1.125000000	1.156250000	1.140625000	−0.016017914	> 0
6	1.140625000	1.156250000	1.148437500	0.014684200	< 0
7	1.140625000	1.148437500	1.144531250	−0.000719249	> 0
8	1.144531250	1.148437500	1.146484375	0.006969355	< 0
9	1.144531250	1.146484375	1.145507813	0.003121776	< 0
10	1.144531250	1.145507813	1.145019531	0.001200444	< 0
11	1.144531250	1.145019531	1.144775391	0.000240393	< 0
12	1.144531250	1.144775391	1.144653320	−0.000239479	> 0
13	1.144653320	1.144775391	1.144714355	0.000000444	< 0

Metoda bisekcije, točnost $\varepsilon = 10^{-8}$ (nastavak)

n	a_n	b_n	x_n	$f(x_n)$	z_n
14	1.144653320	1.144714355	1.144683838	-0.000119521	> 0
15	1.144683838	1.144714355	1.144699097	-0.000059539	> 0
16	1.144699097	1.144714355	1.144706726	-0.000029548	> 0
17	1.144706726	1.144714355	1.144710541	-0.000014552	> 0
18	1.144710541	1.144714355	1.144712448	-0.000007054	> 0
19	1.144712448	1.144714355	1.144713402	-0.000003305	> 0
20	1.144713402	1.144714355	1.144713879	-0.000001431	> 0
21	1.144713879	1.144714355	1.144714117	-0.000000493	> 0
22	1.144714117	1.144714355	1.144714236	-0.000000025	> 0
23	1.144714236	1.144714355	1.144714296	0.000000210	< 0
24	1.144714236	1.144714296	1.144714266	0.000000092	< 0
25	1.144714236	1.144714266	1.144714251	0.000000034	< 0
26	1.144714236	1.144714251	1.144714244	0.000000005	< 0
27	1.144714236	1.144714244	1.144714240	-0.000000010	

Metoda bisekcije, točnost $\varepsilon = 10^{-8}, 10^{-18}$

Izračunata rješenja su (uz ispis na 18 znamenki):

- za točnost 10^{-8} , rješenje je $x_{27} = 1.14471423998475075$,
- za točnost 10^{-18}, rješenje je $x_{60} = 1.14471424255333187$.

Iz ovih rezultata vidi se

- spora konvergencija metode bisekcije — broj vodećih nula u $f(x_n)$ se, uglavnom, linearno povećava.

Ponegdje, kao u x_{13}, dolazi do čudnog povećanja broja vodećih nula u $f(x_n)$. Objašnjenje:

- Slučajno smo "pogodili" blizu nultočke, iako je duljina intervala još uvijek prevelika za zaustavljanje iteracija.

Uočite broj iteracija potreban za odgovarajuću točnost!

Newtonova metoda, točnost $\varepsilon = 10^{-18}$

Nije teško pokazati da će Newtonova metoda na $[1, 2]$ sigurno konvergirati, ako krenemo sa strmijeg ruba (to je $x_0 = 2$), jer su f' i f'' fiksnog znaka na $[1, 2]$.

n	x_n	$f(x_n)$	korekcija
0	2.000000000000000	6.500000000000000	0.541666666666667
1	1.458333333333333	1.601490162037037	0.251009070294785
2	1.207324263038549	0.259834330619978	0.059419284771986
3	1.147904978266562	0.012578134527712	0.003181874908824
4	1.144723103357739	0.000034833084971	0.000008860735819
5	1.144714242621919	0.000000000269625	0.000000000068587
6	1.144714242553332	0.000000000000000	0.000000000000000
7	1.144714242553332	0.000000000000000	

Izračunata nultočka je $x_7 = 1.1447142425533187$ (sve točno).

Newtonova metoda, kvadratna konvergencija

Gledamo li korekcije napisane u znanstvenoj notaciji, vidimo područje kvadratne konvergencije — gdje se broj točnih znamenki u x_n, u svakom koraku, udvostručava.

n	x_n	$f(x_n)$	korekcija
0	2.0000000000000000	6.50000000000E+00	5.416666667E−01
1	1.4583333333333333	1.60149016204E+00	2.510090703E−01
2	1.2073242630385487 5	2.59834330620E−01	5.941928477E−02
3	1.1479049782665624 5	1.25781345277E−02	3.181874909E−03
4	1.1447231033577387 0	3.48330849709E−05	8.860735819E−06
5	1.1447142426219193 3	2.69625000386E−10	6.858746179E−11
6	1.1447142425533318 7	1.08420217249E−19	2.758003708E−20
7	1.1447142425533318 7	1.08420217249E−19	

Isti smo zaključak mogli vidjeti i bez znanstvene notacije — pogledajte kako se povećava broj vodećih nula u korekciji.

Newtonova m., numerički red konvergencije

Prema formuli s početka ovog odjeljka, možemo izračunati i numerički red konvergencije p_n za Newtonovu metodu.

n	x_n	p_n	c_n
0	2.0000000000000000	—	—
1	1.4583333333333333	—	—
2	1.2073242630385487 5	—	—
3	1.1479049782665624 5	1.63738	4.03440E−01
4	1.1447231033577387 0	1.84894	5.34225E−01
5	1.1447142426219193 3	1.97750	7.64767E−01
6	1.1447142425533318 7	1.99937	8.67206E−01
7	1.1447142425533318 7	—	—

Završne vrijednosti p_5 i p_6 su vrlo blizu očekivanog teorijskog reda konvergencije $p = 2$!

Metoda sekante, točnost $\varepsilon = 10^{-18}$

Za metodu sekante potrebne su dvije startne točke — to su $x_0 = 2$ i $x_1 = 1.5$. Izračunata nultočka x_{10} ima sve znamenke jednake aproksimaciji x_7 iz Newtonove metode.

n	x_n	$f(x_n)$	korekcija
0	2.000000000000000	6.500000000000000	
1	1.500000000000000	1.875000000000000	0.202702702702703
2	1.297297297297297	0.683325765502537	0.116233090792778
3	1.181064206504520	0.147481413791545	0.031991044609771
4	1.149073161894749	0.017200732670849	0.004223722208545
5	1.144849439686204	0.000531537856385	0.000134683664909
6	1.144714756021295	0.000002018501023	0.000000513407324
7	1.144714242613971	0.000000000238377	0.000000000060639
8	1.144714242553332	0.000000000000000	0.000000000000000
9	1.144714242553332	0.000000000000000	0.000000000000000
10	1.144714242553332	0.000000000000000	

Metoda sekante, numerički red konvergencije

Red konvergencije metode sekante je $p = (1+\sqrt{5})/2 \approx 1.6180$, a numerički red konvergencije p_n ga dobro aproksimira.

n	x_n	p_n	c_n
0	2.0000000000000000	—	—
1	1.5000000000000000	—	—
2	1.2972972972972973	—	—
3	1.1810642065045196	1.07039	3.94966E−01
4	1.1490731618947491	1.77904	9.54986E−01
5	1.1448494396862039	1.49493	6.02649E−01
6	1.1447147560212947	1.63923	9.97717E−01
7	1.1447142426139705	1.60467	8.29830E−01
8	1.1447142425533319	1.62274	9.74858E−01
9	1.1447142425533318	1.61618	8.86501E−01
10	1.1447142425533318	—	—

Primjer (ne)konvergencije Newtonove metode

Primjer. Jedina nultočka funkcije

$$f(x) = \operatorname{arctg}(x)$$

je $x = 0$. Međutim, Newtonova metoda ne konvergira iz svake startne točke x_0.

- Sigurnu konvergenciju (po ranijem teoremu) ne možemo osigurati, jer f'' mijenja znak baš u nultočki (infleksija).

Naći ćemo točku β za koju vrijedi:

$$\begin{cases} |x_0| < |\beta| \ \Rightarrow \text{Newtonova metoda sa startom } x_0 \text{ konvergira}, \\ |x_0| > |\beta| \ \Rightarrow \text{Newtonova metoda sa startom } x_0 \text{ divergira}, \\ |x_0| = |\beta| \ \Rightarrow \text{Newtonova metoda sa startom } x_0 \text{ ``ciklira''}. \end{cases}$$

Primjer (ne)konvergencije Newtonove metode

Kako ćemo naći točku "cikliranja" (ili "kruženja") β?

Funkcija $f(x) = \operatorname{arctg} x$ je neparna, pa je dovoljno da

- tangenta na graf funkcije f u točki $(\beta, f(\beta))$ presiječe os x u točki $-\beta$ — dobijemo neparnu simetriju oko nule.

Jednadžba tangente na arctg u točki β je

$$y - \operatorname{arctg} \beta = \frac{1}{1 + \beta^2} (x - \beta),$$

pa će tangenta sjeći os x u $-\beta$ (tada je $y = 0$), ako je

$$\operatorname{arctg} \beta = \frac{2\beta}{1 + \beta^2}.$$

Dobili smo nelinearnu jednadžbu za β, koju treba riješiti.

Primjer (ne)konvergencije Newtonove metode

Zbog neparnosti, postoje dva rješenja, suprotnih predznaka. Možemo ih izračunati, recimo, metodom bisekcije i dobijemo

$$\beta = \pm 1.39174520027073489.$$

Pokažimo ponašanje Newtonove metode ako za startnu točku uzmemo, redom,

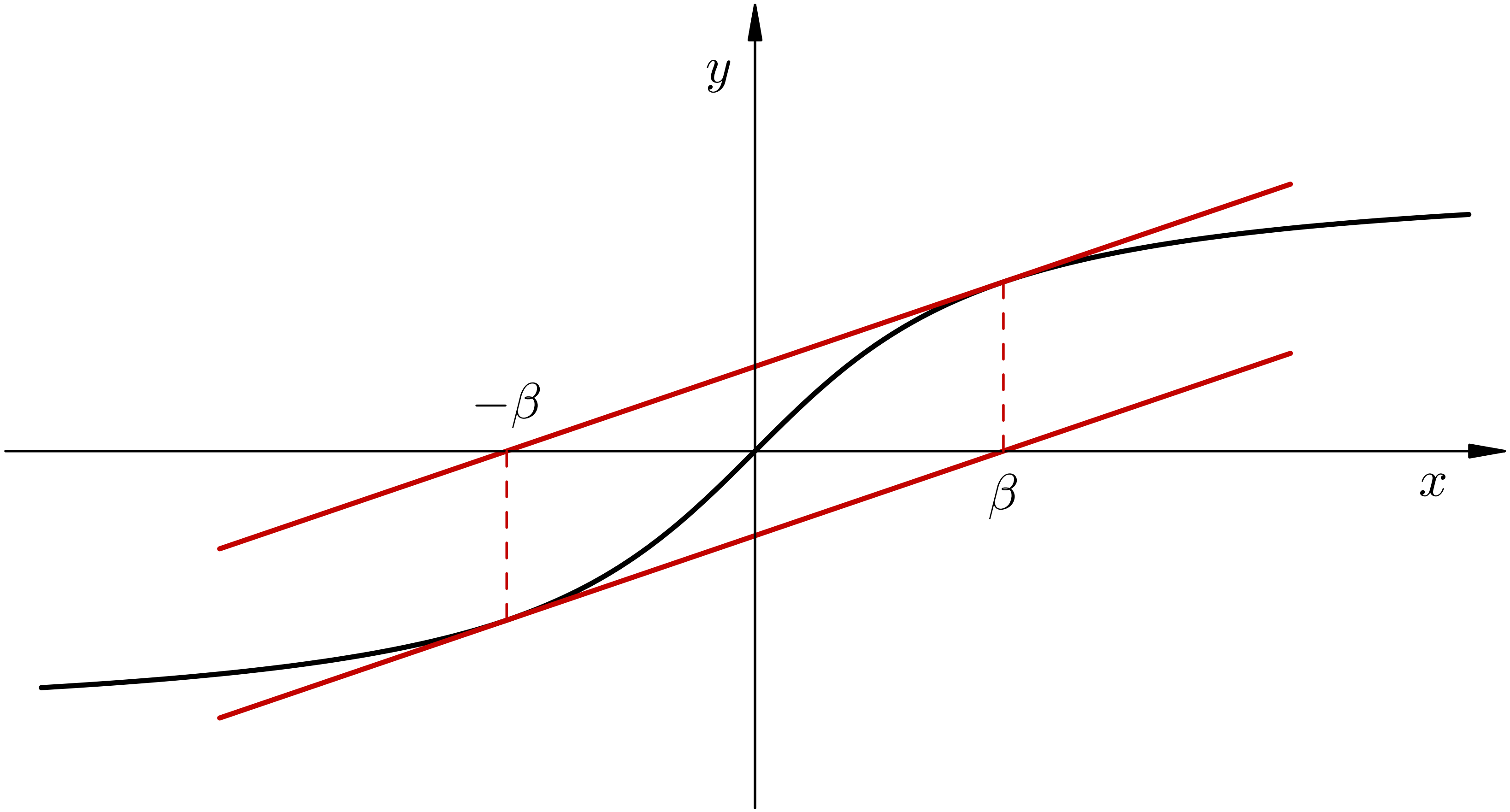
$$x_0 = \beta, \quad x_0 = 1, \quad x_0 = 1.5,$$

a zaustavljamo se

- ako postignemo točnost 10^{-18} za nađenu nultočku,
- ili nakon najviše 10 iteracija.

Primjer cikliranja Newtonove metode

Za $x_0 = \beta$ graf je



Primjer cikliranja Newtonove metode

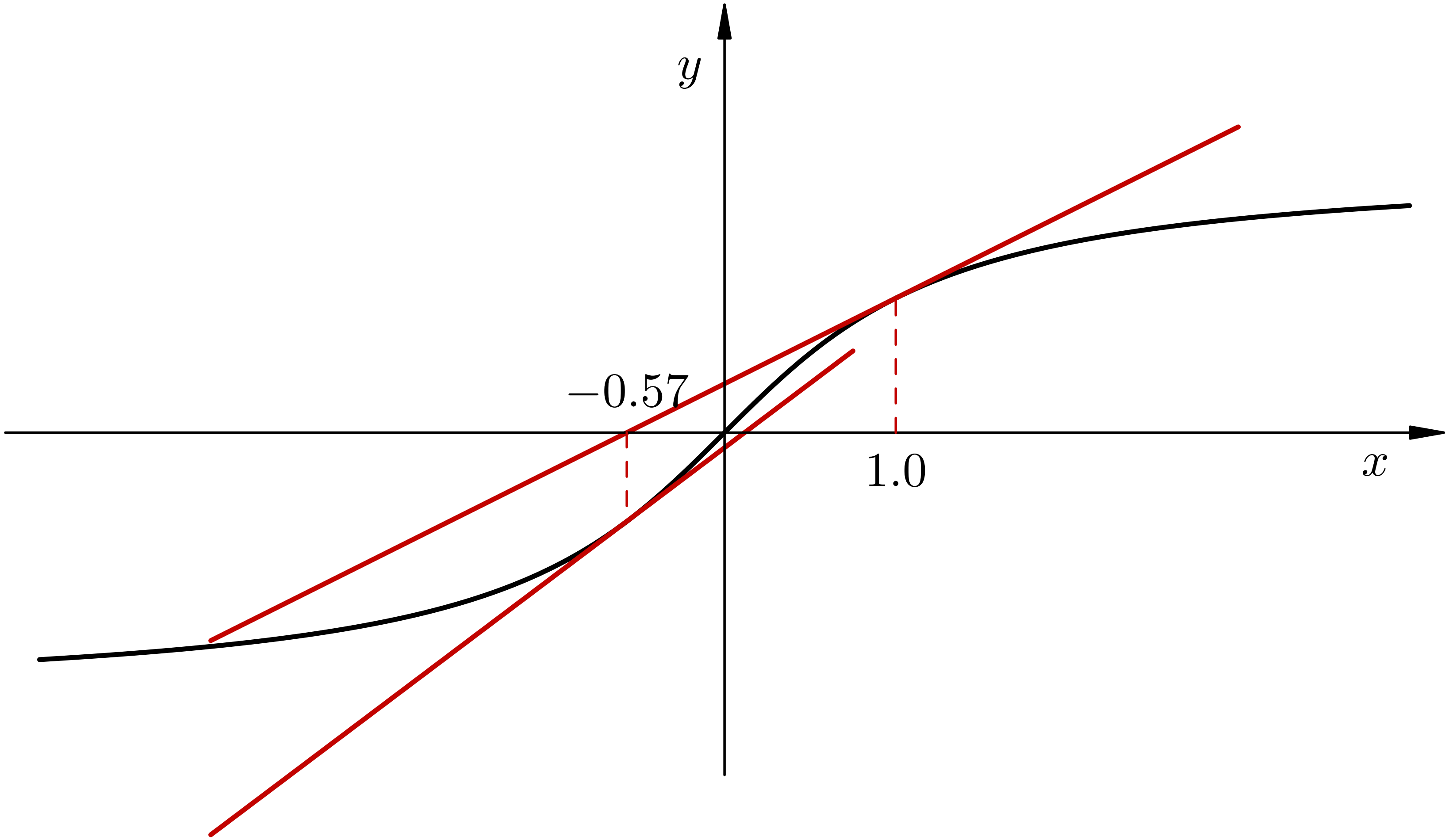
Točnost nije postignuta nakon 10 iteracija.

n	x_n	$f(x_n)$	korekcija
0	1.391745200270735	0.947747133516990	2.783490400541470
1	−1.391745200270735	−0.947747133516990	−2.783490400541470
2	1.391745200270735	0.947747133516990	2.783490400541469
3	−1.391745200270734	−0.947747133516990	−2.783490400541468
4	1.391745200270734	0.947747133516990	2.783490400541466
5	−1.391745200270732	−0.947747133516989	−2.783490400541459
6	1.391745200270727	0.947747133516988	2.783490400541440
7	−1.391745200270713	−0.947747133516983	−2.783490400541391
8	1.391745200270678	0.947747133516971	2.783490400541262
9	−1.391745200270584	−0.947747133516939	−2.783490400540922
10	1.391745200270337	0.947747133516939	

Zbog malih grešaka zaokruživanja, metoda bi konvergirala.

Primjer konvergencije Newtonove metode

Za $x_0 = 1$ graf je



Primjer konvergencije Newtonove metode

Zadana točnost 10^{-18} se postiže nakon 6 iteracija.

n	x_n	$f(x_n)$	korekcija
0	1.000000000000000	0.785398163397448	1.570796326794897
1	−0.570796326794897	−0.518669369255017	−0.687656230793810
2	0.116859903998913	0.116332265113896	0.117920926115958
3	−0.001061022117045	−0.001061021718890	−0.001061022913354
4	0.000000000796310	0.000000000796310	0.000000000796310
5	−0.000000000000000	−0.000000000000000	−0.000000000000000
6	0.000000000000000	−0.000000000000000	

Metoda kubno konvergira (zbog $f''(0) = 0$), ali ne konvergira monotono prema nultočki $\alpha = 0$.

Newton kvg., numerički red konvergencije

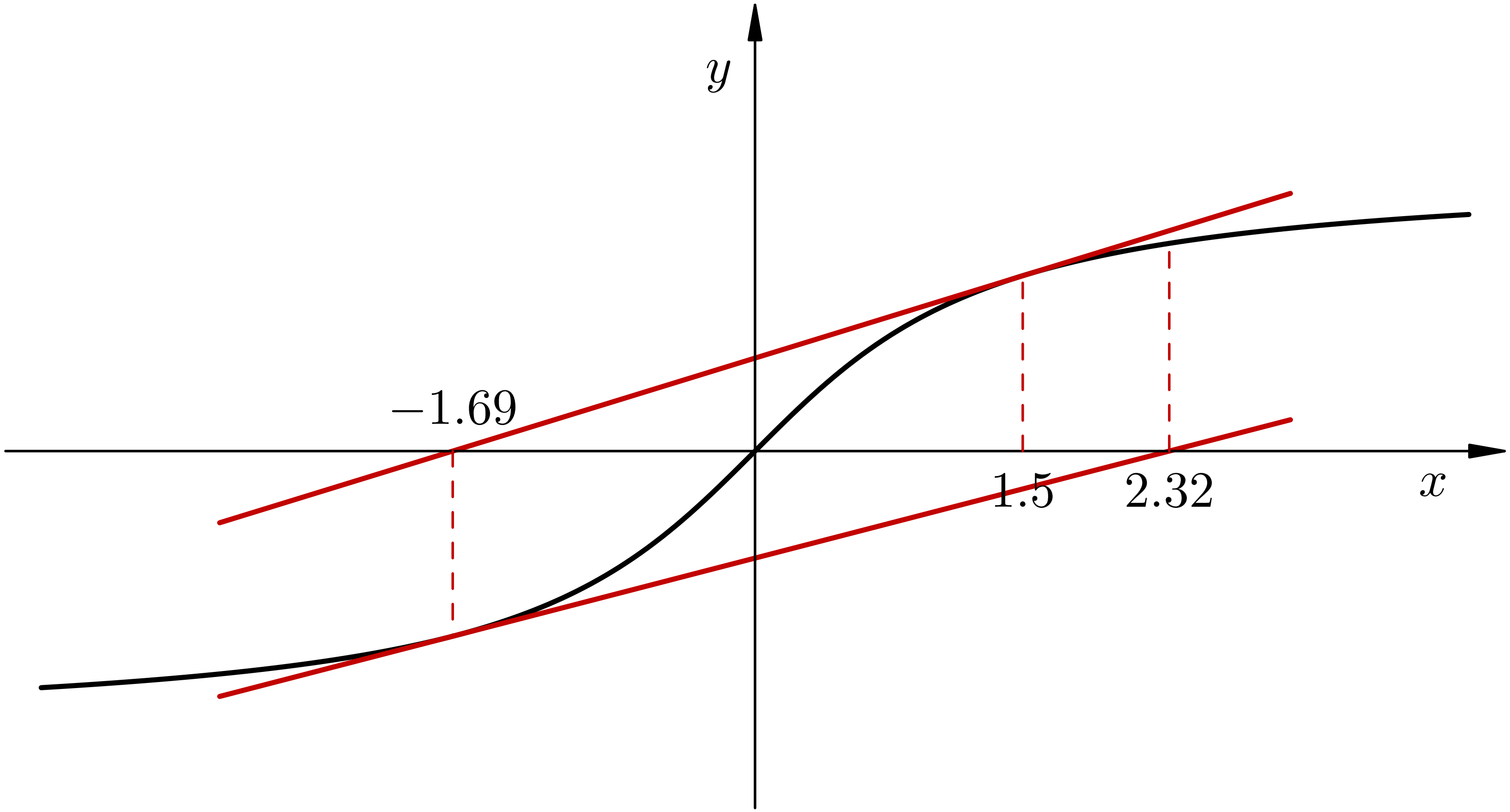
Numerički red konvergencije pokazuje da metoda zaista kubno konvergira prema $\alpha = 0$.

n	x_n	p_n	c_n
0	1.0000000000000000	—	—
1	−0.5707963267948966	—	—
2	0.1168599039989130	—	—
3	−0.0010610221170447	4.02288	1.13367E+00
4	0.0000000007963096	2.97361	6.28237E−01
5	−0.0000000000000000	2.99942	6.64032E−01
6	0.0000000000000000	2.99655	6.51104E−01

Na kraju iteracija dolazi do kraćenja, zbog nemonotonosti. Zato je p_6 malo manje točan od p_5.

Primjer divergencije Newtonove metode

Za $x_0 = 1.5$ graf je



Primjer divergencije Newtonove metode

Metoda kvadratno divergira, ali $f(x)$ "konvergira" prema $\pm\frac{\pi}{2}$.

n	x_n	$f(x_n)$	korekcija
0	1.5000000000E+000	0.9827937232473	3.1940796006E+000
1	−1.6940796006E+000	−1.0375463591379	−4.0152065620E+000
2	2.3211269614E+000	1.1640020424220	7.4352147982E+000
3	−5.1140878368E+000	−1.3776945287028	−3.7409771751E+001
4	3.2295683914E+001	1.5398423269080	1.6076126347E+003
5	−1.5753169508E+003	−1.5701615339901	−3.8965513247E+006
6	3.8949760078E+006	1.5707960700539	2.3830292869E+013
7	−2.3830288974E+013	−1.5707963267949	−8.9202801611E+026
8	8.9202801611E+026	1.5707963267949	1.2499045994E+054
9	−1.2499045994E+054	−1.5707963267949	−2.4539946375E+108
10	2.4539946375E+108	1.5707963267949	

Primjeri za višestruke nultočke

Newtonova metoda i višestruke nultočke

Primjer. Funkcija (polinom)

$$f(x) = x^3 - 5.56x^2 + 9.1389x - 4.68999$$

ima dvostruku nultočku u $x = 1.23$ (treća nultočka je 3.1).

Pokažimo, redom, ponašanje

- obične Newtonove metode,
- Newtonove metode za dvostruku nultočku — stavljen je faktor $m = 2$ za korekciju,
- obične Newtonove metode, ali za funkciju $u = f/f'$.

Startna točka je $x_0 = 1.5$, a tražena točnost je $\varepsilon = 10^{-15}$.

- Točnost za nultočku je namjerno "slabija" nego prije.

Newtonova metoda, $\varepsilon = 10^{-15}$ (početak)

Pažljivo promatrajte kako se ponaša $f(x_n)$ i korekcija.

n	x_n	$f(x_n)$	korekcija
0	1.500000000000000	−0.116640000000000	0.147440273037543
1	1.352559726962457	−0.026248102309329	0.063506947954921
2	1.289052779007536	−0.006315190760541	0.030015778457640
3	1.259037000549896	−0.001552203168203	0.014633908572506
4	1.244403091977390	−0.000384941831542	0.007229603981965
5	1.237173487995426	−0.000095859059122	0.003593663348690
6	1.233579824646736	−0.000023918444247	0.001791630511788
7	1.231788194134948	−0.000005973865556	0.000894525173287
8	1.230893668961661	−0.000001492750955	0.000446941328040
9	1.230446727633621	−0.000000373098481	0.000223390506264
10	1.230223337127356	−0.000000093263474	0.000111675233252
11	1.230111661894104	−0.000000023314476	0.000055832614098

Newtonova metoda, $\varepsilon = 10^{-15}$ *(nastavak)*

n	x_n	$f(x_n)$	korekcija
12	1.230055829280006	−0.000000005828445	0.000027915056720
13	1.230027914223287	−0.000000001457089	0.000013957215816
14	1.230013957007471	−0.000000000364270	0.000006978529777
15	1.230006978477694	−0.000000000091067	0.000003489245354
16	1.230003489232340	−0.000000000022767	0.000001744617791
17	1.230001744614549	−0.000000000005692	0.000000872307704
18	1.230000872306845	−0.000000000001423	0.000000436153629
19	1.230000436153216	−0.000000000000356	0.000000218076376
20	1.230000218076841	−0.000000000000089	0.000000109038186
21	1.230000109038655	−0.000000000000022	0.000000054517907
22	1.230000054520748	−0.000000000000006	0.000000027259838
23	1.230000027260910	−0.000000000000001	0.000000013624333
24	1.230000013636577	−0.000000000000000	0.000000006828241
25	1.230000006808336	−0.000000000000000	0.000000003389306

Newtonova metoda, $\varepsilon = 10^{-15}$ (kraj)

n	x_n	$f(x_n)$	korekcija
26	1.230000003419030	−0.000000000000000	0.000000001729681
27	1.230000001689349	−0.000000000000000	0.000000000823684
28	1.230000000865665	−0.000000000000000	0.000000000401855
29	1.230000000463810	0.000000000000000	−0.000000000000000
30	1.230000000463810	0.000000000000000	

Korekcija linearno teži u 0, puno sporije nego $f(x)$. Razlog:

- Oko višestruke nultočke, funkcijska vrijednost je relativno mala, čak i kad smo relativno daleko od nultočke, tj.
- u okolini višestruke nultočke α, graf funkcije f se bolje "priljubi" uz os x, nego kad je nultočka jednostruka.

U ovom primjeru, $f(x)$ ide kvadratno s korekcijom $(m = 2)$.

Modificirana Newtonova metoda, $m = 2$

Modificirana metoda pokazuje očitu kvadratnu konvergenciju.

n	x_n	$f(x_n)$	korekcija
0	1.500000000000000	−0.116640000000000	0.294880546075085
1	1.205119453924915	−0.001173009833879	−0.024718265674538
2	1.229837719599453	−0.000000049250590	−0.000162273360038
3	1.229999992959491	−0.000000000000000	−0.000000007049176
4	1.230000000008667	0.000000000000000	−0.000000026758865
5	1.230000026767532	−0.000000000000001	0.000000026771877
6	1.229999999995655	0.000000000000000	0.000000000000000
7	1.229999999995655	0.000000000000000	

Da smo pogriješili m — dobili bismo linearnu konvergenciju!

- Isto se događa ako pogriješite derivaciju, a tražite jednostruku nultočku.

Newtonova metoda za funkciju $u = f/f'$

Obična Newtonova metoda za funkciju $u = f/f'$, također, pokazuje očitu kvadratnu konvergenciju prema jednostrukoj nultočki funkcije u.

n	x_n	$f(x_n)$	korekcija
0	1.500000000000000	0.147440273037543	0.243748194650388
1	1.256251805349612	0.013220017840880	0.026062273270891
2	1.230189532078721	0.000094770842551	0.000189522471849
3	1.230000009606872	0.000000004803964	0.000000009608985
4	1.229999999997887	0.000000000000000	0.000000000000000
5	1.229999999997887	0.000000000000000	

Cijena:

- računanje vrijednosti druge derivacije funkcije f — za u'.

Primjeri metoda višeg reda konvergencije

Uvodno o primjerima

Dosad smo promatrali samo metode do reda konvergencije 2 za jednostruke nultočke.

- Mogu li se napisati i koristiti metode višeg reda?

Navest ćemo (samo kao ilustraciju) neke primjere metoda višeg reda i pokazati kako one rade za jednostavni primjer nultočke funkcije

$$f(x) = x^3 - 1.5,$$

na intervalu $[1, 2]$, uz traženu točnost $\varepsilon = 10^{-18}$.

Korigirane Newtonove metode — inverzna f-a

Neka je f funkcija koja je, u okolini izolirane nultočke α,

- monotona, tj. f' je različita od nula (α je jednostruka), i
- njezina derivacija $f^{(p)}$ je neprekidna na toj okolini, $p \geq 2$.

Tada postoji inverzna funkcija $\mathcal{F} := f^{-1}$ funkcije f, i njezina p-ta derivacija $\mathcal{F}^{(p)}$ je, također, neprekidna u okolini nule.

Razvijemo funkciju $\mathcal{F}$ u Taylorov polinom oko točke $y = f(x)$, tako da zadnji član ima $(p-1)$-u derivaciju od $\mathcal{F}$,

$$\mathcal{F}(t) \approx Q_{y,p-1}(t) := \sum_{k=0}^{p-1} \frac{\mathcal{F}^{(k)}(y)}{k!} (t-y)^k.$$

Tražimo $\alpha = \mathcal{F}(0) = f^{-1}(0)$. Za $t = 0$, desna strana $Q_{y,p-1}(0)$ je aproksimacija nultočke α, s greškom reda veličine y^p.

Korigirane Newtonove metode — inverzna f-a

Kad uvrstimo $y = f(x)$ i sve gledamo kao funkciju od x, onda

$$E_p(x) := Q_{f(x),p-1}(0) = \sum_{k=0}^{p-1} \frac{\mathcal{F}^{(k)}\big(f(x)\big)}{k!} \big(-f(x)\big)^k$$

definira jednostavnu iteracijsku funkciju $\varphi := E_p$, a pripadna iterativna metoda je $x_{n+1} = E_p(x_n)$.

Uz oznaku $z^{[k]}(x) := \mathcal{F}^{(k)}(f(x))$, ove funkcije iz brojnika možemo rekurzivno računati na sljedeći način (E. Schröder):

$$z^{[0]}(x) = x, \quad z^{[1]}(x) = \frac{1}{f'(x)},$$

$$z^{[k]}(x) = \frac{1}{f'(x)} \cdot \frac{d}{dx}\, z^{[k-1]}(x), \quad k = (1), 2, \ldots .$$

Korigirane Newtonove metode — inverzna f-a

Metoda E_p ima red konvergencije (barem) p. Ako je

$$z^{[p]}(\alpha)\, f'(\alpha) = \mathcal{F}^{(p)}(0)\, f'(\alpha) \neq 0,$$

onda je red E_p metode baš jednak p.

Za male vrijednosti p, dobivamo sljedeće iteracijske funkcije φ

$$E_2(x) = x - u, \qquad \text{(obična Newtonova m.)}$$

$$E_3(x) = E_2 - A_2 u^2, \qquad \text{(korigirana Newtonova m. } E_3\text{)}$$

$$E_4(x) = E_3 - (2A_2^2 - A_3)u^3, \qquad \text{(korigirana Newtonova m. } E_4\text{)}$$

pri čemu je

$$u = \frac{f}{f'}, \quad A_k = \frac{1}{k!} \cdot \frac{f^{(k)}}{f'}, \quad k \geq 2.$$

E_3 metoda, točnost $\varepsilon = 10^{-18}$

Startna točka je $x_0 = 2$.

n	x_n	$f(x_n)$	korekcija
0	2.000000000000000	6.500000000000000	0.688368055555556
1	1.311631944444444	0.756503210473290	0.162957102798705
2	1.148674841645739	0.015623490256523	0.003960520886559
3	1.144714320759180	0.000000307435976	0.000000078205848
4	1.144714242553332	0.000000000000000	0.000000000000000
5	1.144714242553332	0.000000000000000	

Izračunata nultočka je $x_5 = 1.1447142425533319$.

E_3 metoda, kubna konvergencija

Ispišemo li rezultat u znanstvenoj notaciji, vidimo da se broj točnih znamenki u x_n približno utrostručuje.

n	x_n	$f(x_n)$	korekcija
0	2.0000000000000000	6.50000000000E+00	6.88368055556E−01
1	1.3116319444444444	7.56503210473E−01	1.62957102799E−01
2	1.14867484164573903	1.56234902565E−02	3.96052088656E−03
3	1.14471432075918001	3.07435976264E−07	7.82058481467E−08
4	1.14471424255333187	1.08420217249E−19	2.75800370811E−20
5	1.14471424255333187	1.08420217249E−19	

E_3 metoda, numerički red konvergencije

Numerički red konvergencije pokazuje da je metoda E_3 zaista kubno konvergentna.

n	x_n	p_n	c_n
0	2.0000000000000000	—	—
1	1.3116319444444444	—	—
2	1.1486748416457390З	—	—
3	1.1447143207591800l	2.28964	2.38750E−01
4	1.14471424255333187	2.89555	7.06390E−01
5	1.14471424255333187	—	—

Metode izvedene iz Taylorovih polinoma

Funkciju f možemo aproksimirati Taylorovim polinomom P_s, stupnja s, u okolini točke x, i naći njegove nultočke.

Ako polinom stupnja 1 izjednačimo s nulom, dobijemo običnu Newtonovu metodu. Kad to napravimo za polinom stupnja 2,

$$P_2(t) = f(x) + f'(x)(t - x) + \frac{1}{2!} \cdot f''(x)(t - x)^2 = 0,$$

i riješimo po t, onda dobivamo iteracijsku funkciju φ za tzv. Laguerreovu metodu, $x_{n+1} = \varphi(x_n)$, pri čemu je

$$\varphi(x) = x - \frac{2u}{1 \pm (1 - 4A_2 u)^{1/2}}, \qquad (\text{kraćenje} \Longrightarrow + \text{ znak})$$

Za metode viših redova moraju se rješavati polinomne jednadžbe sve viših stupnjeva (preko 4 ne ide egzaktno).

Laguerreova metoda, točnost $\varepsilon = 10^{-18}$

Za početnu točku uzimamo $x_0 = 1$, jer za $x_0 = 2$, drugi korijen koji javlja u metodi ne daje realan broj.

n	x_n	$f(x_n)$	korekcija
0	1.000000000000000	−0.500000000000000	−0.145497224367903
1	1.145497224367903	0.003080095095887	0.000782981936678
2	1.144714242431225	−0.000000000480015	−0.000000000122107
3	1.144714242553332	0.000000000000000	0.000000000000000
4	1.144714242553332	0.000000000000000	

Izračunata nultočka je $x_4 = 1.1447142425533319$.

Laguerreova metoda, kubna konvergencija

Ponovno, korekcija pokazuje da se broj točnih znamenki u x_n približno utrostručava.

n	x_n	$f(x_n)$	korekcija
0	1.0000000000000000	−5.00000000000E−01	−1.45497224368E−01
1	1.1454972243679028	3.08009509589E−03	7.82981936678E−04
2	1.1447142424312250	−4.80015464226E−10	−1.22106786356E−10
3	1.1447142425533318	1.08420217249E−19	2.75800370811E−20
4	1.1447142425533318	1.08420217249E−19	

Laguerreova m., numerički red konvergencije

Kao što i očekujeno, numerički red konvergencije je 3.

n	x_n	p_n	c_n
0	1.0000000000000000	—	—
1	1.1454972243679028	—	—
2	1.1447142424312250	—	—
3	1.1447142425533319	3.00297	2.59843E−01
4	1.1447142425533319	—	—

Metode izvedene iz razvoja $1/f$

Razvijemo li funkciju $1/f$ u Taylorov polinom, iz koeficijenata tog razvoja, također, možemo dobiti metode bilo kojeg reda konvergencije za nalaženje jednostruke nultočke funkcije f.

Podloga za konstrukciju ovih metoda je tzv. Königov teorem.

Neka f ima konvergentan Taylorov razvoj (analitička je) na nekom krugu oko točke x (općenito, u kompleksnoj ravnini $\mathbb{C}$), koji sadrži točno jednu jednostruku nultočku α od f.

Onda i funkcija $h = 1/f$ ima konvergentan Taylorov razvoj

$$h(t) := \frac{1}{f(t)} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{h^{(k)}(x)}{k!} (t-x)^k,$$

(tj. analitička je) na krugu $|t-\alpha| < |x-\alpha|$ (opet, u $\mathbb{C}$).

Metode izvedene iz razvoja $1/f$

Za $p \geq 2$, neka je $Q_{p-1}(x)$ omjer susjednih koeficijenata u ovom razvoju,

$$Q_{p-1}(x) := \frac{h^{(p-2)}(x)\,/\,(p-2)!}{h^{(p-1)}(x)\,/\,(p-1)!} = (p-1)\,\frac{\big(1/f(x)\big)^{(p-2)}}{\big(1/f(x)\big)^{(p-1)}}.$$

Onda iteracijska funkcija

$$\varphi_p(x) := x + Q_{p-1}(x)$$

konvergira prema α, i to s redom konvergencije (barem) p. ■

Za $p = 2$, i ovdje dobivamo Newtonovu metodu (provjerite).

Za $p = 3$, izlazi iteracijska funkcija za tzv. Halleyevu metodu

$$\varphi(x) = x - \frac{u}{1 - A_2 u}.$$

Halleyeva metoda — lakši izvod

Funkciju f, u okolini točke x, aproksimiramo Taylorovim polinomom P_2, stupnja 2, kao kod Laguerreove metode,

$$P_2(t) = f(x) + f'(x)(t-x) + \frac{f''(x)}{2}\,(t-x)^2.$$

U najvišem članu $(t-x)^2$, za jedan faktor $(t-x)$ iskoristimo Newtonovu aproksimaciju

$$t - x \approx -u = -\frac{f(x)}{f'(x)}.$$

Stupanj polinoma pada za 1, pa dobivamo linearni polinom $\widetilde{P}_1$,

$$\widetilde{P}_1(t) = f(x) + \left(f'(x) - \frac{f''(x)}{2}\,u\right)(t-x).$$

Iz $\widetilde{P}_1(t) = 0$, izlazi upravo Halleyeva metoda (red je barem 3).

Halleyeva metoda, točnost $\varepsilon = 10^{-18}$

Ponovno startamo iz $x_0 = 2$.

n	x_n	$f(x_n)$	korekcija
0	2.000000000000000	6.500000000000000	0.742857142857143
1	1.257142857142857	0.486798833819242	0.111805016364194
2	1.145337840778664	0.002452770217608	0.000623598102057
3	1.144714242676607	0.000000000484607	0.000000000123275
4	1.144714242553332	0.000000000000000	0.000000000000000
5	1.144714242553332	0.000000000000000	

Izračunata nultočka je $x_5 = 1.1447142425533318$7.

Halleyeva metoda, kubna konvergencija

Gledanjem znanstvenog zapisa, vidi se kubna konvergencija.

n	x_n	$f(x_n)$	korekcija
0	2.0000000000000000	6.50000000000E−00	7.42857142857E−01
1	1.25714285714285714	4.86798833819E−01	1.11805016364E−01
2	1.14533784077866351	2.45277021761E−03	6.23598102057E−04
3	1.14471424267660666	4.84607030069E−10	1.23274793178E−10
4	1.14471424255333187	1.08420217249E−19	2.75800370811E−20
5	1.14471424255333187	1.08420217249E−19	

Halleyeva metoda, numerički red konvergencije

Numerički red konvergencije Halleyeve metode je blizu 3.

n	x_n	p_n	c_n
0	2.0000000000000000	—	—
1	1.2571428571428571	—	—
2	1.1453378407786635	—	—
3	1.1447142426766066	2.56001	1.67754E−01
4	1.1447142425533319	2.97168	4.12474E−01
5	1.1447142425533319	—	—

Metode s pamćenjem

Metode s pamćenjem imaju barem dvije startne točke. Takva je, na primjer, metoda sekante.

I za metode s pamćenjem možemo konstruirati metode višeg reda od 2. Na primjer, metoda ${}^*E_{1,2}$ definirana iteracijskom funkcijom

$$
{}^*E_{1,2} = x_n - u_n - \frac{u_n^2}{f_n'} \cdot \left[\frac{1}{x_n - x_{n-1}} \big(2f_n' + f_{n-1}' - 3f[x_n, x_{n-1}] \big) \right]
$$

ima svojstvo da treba jednako izvrednjavanja funkcije kao i Newtonova metoda (pamte se vrijednosti funkcije i derivacije).

Indeksi u formuli znače izvrednjavanje u odgovarajućoj točki!

Njezin red konvergencije je $p = 1 + \sqrt{3} \approx 2.73$.

Metoda ${}^*E_{1,2}$, točnost $\varepsilon = 10^{-18}$

Metodu startamo iz $x_0 = 2$, tako da x_1 dobijemo po Newtonovoj metodi, pa imamo dvije startne točke.

n	x_n	$f(x_n)$	korekcija
0	2.000000000000000	6.500000000000000	0.541666666666667
1	1.458333333333333	1.601490162037037	0.294212878320100
2	1.164120455013233	0.077588606715436	0.019397373047930
3	1.144723081965303	0.000034748987607	0.000008839411970
4	1.144714242553333	0.000000000000003	0.000000000000001
5	1.144714242553332	0.000000000000000	0.000000000000000
6	1.144714242553332	0.000000000000000	

Izračunata nultočka je $x_6 = 1.144714242553331187$.

Metoda $^*E_{1,2}$*, konvergencija*

Gledanjem znanstvenog zapisa, uočavamo brzu konvergenciju metode.

n	x_n	$f(x_n)$	korekcija
0	2.0000000000000000	6.50000000000E+00	5.41666666667E−01
1	1.4583333333333333	1.60149016204E+00	2.94212878320E−01
2	1.1641204550132330 2	7.75886067154E−02	1.93973730479E−02
3	1.1447230819653027 0	3.47489876068E−05	8.83941196996E−06
4	1.1447142425533327 5	3.45318391937E−15	8.78424181034E−16
5	1.1447142425533318 7	1.08420217249E−19	2.75800369996E−20
6	1.1447142425533318 7	1.08420217249E−19	

Metoda $^*E_{1,2}$, numerički red konvergencije

Numerički red konvergencije metode $^*E_{1,2}$ ovdje ide prema 3!

n	x_n	p_n	c_n
0	2.0000000000000000	—	—
1	1.4583333333333333	—	—
2	1.16412045501323302	—	—
3	1.14472308196530270	2.77393	4.83862E−01
4	1.14471424255333275	2.76510	4.79113E−01
5	1.14471424255333187	2.99347	1.17873E+00
6	1.14471424255333187	—	—

Napomena. Za kubni polinom $f(x) = x^3 - 1.5$, stvarni red konvergencije metode je zaista jednak 3.

Međutim, za polinom višeg stupnja ($x^4 - 2$), ili neku drugu funkciju ($e^x - 3$), numerički red konvergencije je blizu $1 + \sqrt{3}$.