Egyenletek közelítő megoldása

2003. március 30.

1. A Newton–Raphson-eljárás

1.1. Az iteráció

Feladat. Az $f(x) = 0$ függvény-egyenlet egy megoldását keressük. Feltételezzük, hogy $f(x)$ folytonos és differenciálható egy olyan intervallumon, ami a megoldást is tartalmazza.

Megoldási ötlet. Ha ξ egy megoldás, azaz $f(\xi) = 0$, akkor az f-hez húzott ξ-beli érintő éppen ξ-ben metszi az x-tengelyt. Ha x_1 „majdnem"-megoldás, azaz ξ „közelében" van, akkor az f-hez húzott x_1-beli érintő az x-tengelyt olyan x_2 pontban metszi, amely közelebb „lehet" ξ-hez, mint x_1.

Kivitelezés. Tekintsük az $(x_1; f(x_1))$ ponton átmenő érintőt, melynek meredeksége m, így egyenlete $y = mx + c$. Nyilván $m = f'(x_1)$. Az $x = x_1$ helyettesítéssel $f(x_1) = f'(x_1)x_1 + c$ egyenletből $c = f(x_1) - f'(x_1)x_1$. Az x_2 pontot $y = 0$ esetén kapjuk, azaz a $0 = f'(x_1)x_2 + f(x_1) - f'(x_1)x_1$ egyenletet kell megoldani. Ha $f'(x_1) \neq 0$, akkor az $x_2 = x_1 - \frac{f(x_1)}{f'(x_1)}$ előállítást kapjuk.

Newton–Raphson-iteráció. A fenti lépést újra és újra megismételve az

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

rekurzióhoz jutunk. Amennyiben valamely n-re $f'(x_n) = 0$, úgy az algoritmus leáll (sikertelenül), és rendszerint újrakezdjük a számolást más x_1 választásával (amennyiben létezik megfelelő x_1 adott f esetén).

Példa. Az $a > 0$ szám négyzetgyökét az $f(x) = x^2 - a = 0$ egyenlet megoldása adja ($\xi = \sqrt{a}$). Ekkor a Newton–Raphson-iteráció az

$$x_{n+1} = x_n - \frac{x_n^2 - a}{2x_n} = \frac{2x_n^2 - x_n^2 + a}{2x_n} = \frac{x_n + \frac{a}{x_n}}{2}$$

alakot ölti, ami éppen a másodfokú Newton-iterációval azonos. Hasonlóan belátható, hogy az $f(x) = x^k - a$ függvény segítségével a magasabb fokú Newton-algoritmusokat kapjuk.

1.2. A konvergencia-sebesség

A következő tétel a konvergencia sebességéről állítja, hogy 2 rendű. Bizonyos megszorításokat kell tennünk, így pl. a derivált sehol sem lehet 0 és a függvény sem változhat akárhogy: a második deriváltnak korlátosnak kell lennie.

1. Tétel. Legyen f legalább kétszer deriválható. Tegyük fel, hogy $f'(x) = 0$ egyetlen x-re sem áll fenn. Ha a Newton–Raphson-iteráció konvergens, akkor a konvergencia kvadratikus.

Bizonyítás. {

Tegyük fel, hogy $f(\xi) = 0$ és $x_n \to \xi$. Fejtsük sorba f-et x_n körül:

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

ahol β – a Taylor-formulánál bebizonyítottak szerint – egy x_n és ξ közötti valós szám. A Newton–Raphson-iterációt a vele ekvivalens

$$f(x_n) = f'(x_n)(x_n - x_{n+1})$$

alakba írva, majd a fenti két egyenlőséget összeadva az

$$f(x_n) = f(x_n) + f'(x_n)(\xi - x_n + x_n - x_{n+1}) + \frac{f''(\beta)}{2}(\xi - x_n)^2$$

összefüggést kapjuk, ami egyszerűsítve

$$0 = f'(x_n)(\xi - x_{n+1}) + \frac{f''(\beta)}{2}(\xi - x_n)^2,$$

majd rendezve

$$|\xi - x_{n+1}| = \frac{f''(\beta)}{2f'(x_n)}(\xi - x_n)^2.$$

A konvergencia miatt az iteráció zárt intervallumon marad. Így, felhasználva, hogy $f'(x) = 0$ egyetlen x-re sem teljesül, a deriváltfüggvény zárt intervallumon meglévő folytonossága miatt létezik egy $m_1 > 0$ szám, amelyre $|f'(x)| \geq m_1$; a legkisebb ilyen szám

$$m_1 := \min |f'(x)|.$$

Ugyanezen a zárt intervallumon a második derivált korlátos lesz, hiszen a második derivált is folytonos, és ezen az intervallumon korlátos is. Így van olyan M_2 pozitív szám, amelyre $|f''(x)| \leq M_2$; a legnagyobb ilyen szám

$$M_2 := \max |f''(x)|.$$

Utolsó egyenletünket most már könnyűszerrel átírhatjuk a

$$\left| \frac{x_{n+1} - \xi}{(x_n - \xi)^2} \right| = \left| \frac{f''(\beta)}{2f'(x_n)} \right| \leq \frac{M_2}{2m_1}$$

formába, illetőleg egy egyenlőtlenséget is felírhatunk. Ez utóbbi egyenlőtlenség bizonyítja, hogy a konvergencia valóban kvadratikus, hiszen a $c = M_2/2m_1$ választás megfelelő. }

A következő tétel magát a konvergenciát biztosítja, amennyiben bizonyos feltételek teljesülnek.

2. Tétel. Legyen f legalább kétszer deriválható és $f(\xi) = 0$. Tegyük fel, hogy $f'(x) = 0$ egyetlen x-re sem áll fenn. Ha a Newton–Raphson-iteráció korlátos (azaz létezik olyan $[a, b]$ intervallum, amelyen mindvégig belül marad), továbbá valamely n-re

$$|x_n - \xi| < \frac{2m_1}{M_2}$$

($m_1 = \min_{[a,b]} |f'(x)|$, $M_2 = \max_{[a,b]} |f''(x)|$), akkor $x_n \to \xi$ ($n \to \infty$ esetén), mégpedig kvadratikusan.

Bizonyítás. Világos, hogy a kvadratikus konvergencia már az 1. Tételből következik, így elegendő a konvergencia tényét igazolnunk.

Az 1. Tétel bizonyítása alapján

$$|x_{n+k} - \xi| \le \frac{M_2}{2m_1}(x_{n+k-1} - \xi)^2$$

fennáll tetszőleges $k > 0$ pozitív egészre. Azonban $|x_{n+k-1} - \xi|$-re további becslés adható:

$$|x_{n+k-1} - \xi| \le \frac{M_2}{2m_1}(x_{n+k-2} - \xi)^2.$$

A becslést egészen addig ismételjük, amíg k „el nem fogy", azaz

$$|x_{n+k-j} - \xi| \le \frac{M_2}{2m_1}(x_{n+k-(j+1)} - \xi)^2$$

becslések sora írható fel, amíg $j < k$. A becsléseket egybefűzve egyenlőtlenségek sora adódik:

$$\begin{aligned}
|x_{n+k} - \xi| &\le \frac{M_2}{2m_1}(x_{n+k-1} - \xi)^2 \le \left(\frac{M_2}{2m_1}\right)^{1+2} \cdot (x_{n+k-2} - \xi)^4 \le \\
&\le \left(\frac{M_2}{2m_1}\right)^{1+2+4} \cdot (x_{n+k-3} - \xi)^8 \le \ldots \le \\
&\le \left(\frac{M_2}{2m_1}\right)^{1+2+4+\ldots+2^{k-1}} \cdot (x_{n+k-k} - \xi)^{2^k} = \\
&= \left(\frac{M_2}{2m_1}\right)^{2^k-1} \cdot (x_n - \xi)^{2^k} = \left(\frac{M_2}{2m_1}|x_n - \xi|\right)^{2^k-1} \cdot (x_n - \xi) = \\
&= \left(\frac{M_2}{2m_1}|x_n - \xi|\right)^{2^k} \cdot \frac{2m_1}{M_2}.
\end{aligned}$$

Mivel feltettük, hogy

$$|x_n - \xi| < \frac{2m_1}{M_2},$$

ezért

$$\frac{M_2}{2m_1}|x_n - \xi| < 1.$$

Most ezen utolsó egyenlőtlenség bal oldalán álló kifejezést q-val jelölve világos, hogy amennyiben a fenti egyenlőtlenségek közül az elsőt és az utolsót összevetjük,

$$|x_{n+k} - \xi| < q^{2^k} \cdot \frac{2m_1}{M_2}$$

adódik. Most k növelésével a jobb oldal 0-hoz fog tartani, mivel $0 \leq q < 1$. Így a bal oldal is 0-hoz tart, vagyis $x_n \to \xi$.

Megjegyzés. A q^{2^k} kifejezés szépen mutatja, mit is jelent a kvadratikus konvergencia: 1-nél kisebb q értékekre ez „nagyon gyorsan" fog 0-hoz tartani.

Alkalmazás. Az $f(x) = x^k - a$ függvény zérushelyét kívánjuk kiszámítani, amennyiben $a > 1$. Legyen $1 < x_1 < a$. A Newton–Raphson-iteráció $x_{n+1} = A(x_n; x_n; \ldots; x_n; \frac{a}{x_n^{k-1}})$ alakú, a számtani-mértani egyenlőtlenség alapján emiatt $x_n \geq \sqrt[k]{a} > 1$. Így $a/x_n^{k-1} < a/1^{k-1} = a$, s mivel a számtani közép-függvény monoton, $A(x_n; x_n; \ldots; \frac{a}{x_n^{k-1}}) \leq A(a; a; \ldots; a; \frac{a}{1}) = a$ miatt $x_{n+1} \leq a$. Mivel $x_n \geq \sqrt[k]{a}$ is teljesül, az iteráció az $[1, a]$ intervallumra korlátozódik. Itt $f'(x) = kx^{k-1}$ és $f''(x) = k(k-1)x^{k-2}$, azaz $m_1 = f'(1) = k(> 0)$ és $M_2 = f''(a) = k(k-1)a^{k-2}$, feltéve, hogy $k \geq 2$. Most $2m_1/M_2 = \frac{2}{(k-1)a^{k-2}}$; ha x_1-et ξ-hez ennél a számnál közelebbi távolságra választjuk, akkor a 2. tétel értelmében a Newton–Raphson-iteráció konvergens, és $\sqrt[k]{a}$-t kvadratikusan közelíti. Például ha a $\sqrt[3]{2}$-t szeretnénk kiszámítani, akkor $k = 3$, $a = 2$, $2m_1/M_2 = 1/2$. Mivel tudjuk, hogy $1 < \sqrt[3]{2} < 2$, ezért pl. az $x_1 = 1,5$ választással garantálható a kvadratikus konvergencia.