NEWTONS METOD FÖR SKALÄR EKVATION $f(x) = 0$

Vi skriver en funktionsfil `newton.m` med anropet `x=newton(f,x0,tol)` som beräknar en approximativ lösning av ekvationen $f(x) = 0$ med hjälp av Newtons metod. Programmet använder funktionen `derivative.m` för approximativ beräkning av derivata, som vi skrev i en tidigare studioövning. Senare, i ALA-B, ska vi generalisera programmet till att lösa system av ekvationer.

1. Inledning

Låt $f : I \to \mathbf{R}$ vara en deriverbar funktion (I är ett intervall). Vi erinrar oss att ekvationen $f(x) = 0$ kan skrivas som en fixpunktsekvation $x = g(x)$ genom omskrivningen

$$x = x - \alpha(x)f(x),$$

dvs med

$$g(x) = x - \alpha(x)f(x).$$

Det gäller att hitta $\alpha(x)$ så att $g : I \to I$ blir en kontraktion. Då konvergerar fixpunktsiterationen

$$x_{k+1} = g(x_k). \tag{1}$$

Detta är inte lätt att åstadkomma, men Newtons metod ger oss en systematiskt sätt att göra detta.

Antag att vi har en approximativ lösning x_k och vi vill hitta en bättre approximation x_{k+1} som i (1). Vi bildar linjäriseringen av funktionen f i x_k (Definition 8 i Adams 4.7):

$$L(x) = f(x_k) + f'(x_k)(x - x_k) \tag{2}$$

och löser $L(x) = 0$ istället för $f(x) = 0$. Dvs

$$f(x_k) + f'(x_k)(x - x_k) = 0 \tag{3}$$

med lösningen

$$x = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}. \tag{4}$$

Detta får bli nästa approximation:

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}. \tag{5}$$

Detta är på formen (1) med

$$g(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)}, \quad \text{dvs } \alpha(x) = \frac{1}{f'(x)}.$$

Iterationen (5) kallas Newtons metod (eller Newton-Raphsons metod). För att Newtons metod ska fungera måste $f'(x_k) \neq 0$. Vi antar därför att

$$f'(x) \neq 0 \quad \text{för alla } x \in I.$$

Kom ihåg att ekvationen för tangenten till grafen $y = f(x)$ i $(x_k, f(x_k))$ är $y = L(x)$, dvs

$$y = f(x_k) + f'(x_k)(x - x_k).$$

Geometriskt betyder (3) att vi följer tangenten och hittar x_{k+1} där denna skär x-axeln.

Date: October 11, 2006, Stig Larsson, Mathematical Sciences, Chalmers University of Technology.

Example 1. Med $f(x) = x^2 - 2$ får vi

$$g(x) = x - \frac{x^2 - 2}{2x} = x - \frac{1}{2}x + \frac{1}{x} = \frac{1}{2}x + \frac{1}{x}.$$

Newtons iteration blir

$$x_{k+1} = \frac{1}{2}x_k + \frac{1}{x_k}.$$

Vi har tidigare sett att g är en kontraktion med $L = 1/2$ på $[1, 2]$ och denna iteration konvergerar snabbt mot $\sqrt{2}$ om vi väljer $x_0 \in [1, 2]$. □

Antag nu att $\bar{x} \in I$ är en rot, dvs

$$f(\bar{x}) = 0.$$

Om vi deriverar $g(x)$ får vi

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

så att

$$g'(\bar{x}) = \frac{f(\bar{x})f''(\bar{x})}{f'(\bar{x})^2} = 0$$

och $g'(x) \approx 0$ på varje litet intervall nära roten. Det betyder att g har en mycket liten Lipschitzkonstant på varje sådant intervall. Det innebär att Newtons metod konvergerar mycket snabbt.

Följande sats handlar om detta. Det är Theorem 7 i Adams 4.6.

Theorem 1. *Antag att $x_k, x_{k+1}, \bar{x} \in I$ och att vi har begränsningarna*

$$\frac{1}{|f'(x)|} \le M, \quad \forall x \in I, \tag{6}$$

$$|f''(x)| \le K, \quad \forall x \in I. \tag{7}$$

Då gäller

$$|x_k - \bar{x}| \le M|f(x_k)|, \tag{8}$$

$$|x_{k+1} - \bar{x}| \le \frac{1}{2}MK|x_{k+1} - x_k|^2, \tag{9}$$

$$|x_{k+1} - \bar{x}| \le \frac{1}{2}MK|x_k - \bar{x}|^2. \tag{10}$$

Begränsningarna (6) och (7) innebär att tangentens lutning inte får vara alltför nära 0 och inte ändra sig för mycket på intervallet I.

Feluppskattningen (8) relaterar felet i x till felet i $f(x)$, dvs relaterar felet $x_k - \bar{x}$ till residualen $f(x_k)$. Residualen anger hur väl x_k uppfyller ekvationen $f(x) = 0$. Om $f'(x)$ är liten på I så blir M stor och då kan felet vara stort även om residualen $f(x_k)$ är liten. Det betyder att ekvationen är svår att lösa om $f'(x)$ är liten.

De andra uppskattningarna visar att x_k konvergerar mycket snabbt om den konvergerar alls. Till exempel, om x_k har kommit så nära roten att $|x_k - \bar{x}| < 1$, så ser vi i (10) att felet i nästa steg är proportionellt mot kvadraten på det tidigare felet, dvs det minskar mycket snabbt. Vi säger att felet konvergerar kvadratiskt mot 0. Vi erinrar oss att bisektionsmetoden och fixpunktsiterationen i allmänhet bara konvergerar linjärt.

En nackdel med Newtons metod är att det är svårt att ange ett intervall I där ovanstående begränsningar gäller och sådant att iterationen stannar kvar i intervallet. I praktiken får man oftast nöja sig med att säga att metoden konvergerar om man väljer x_0 tillräckligt nära en rot och prova sig fram med olika x_0.

Beviset kan skippas om du inte orkar mer teori.

Bevis. Medelvärdessatsen (Theorem 11 i Adams 2.6) ger

$$f(x_k) - f(\bar{x}) = f'(s_1)(x_k - \bar{x}), \tag{11}$$

där $f(\bar{x}) = 0$ och s_1 är en punkt mellan x och $\bar{x}$. Vi får med hjälp av begränsningen (6)

$$|x_k - \bar{x}| = \frac{|f(x_k)|}{|f'(s_1)|} \le M|f(x_k)|, \tag{12}$$

vilket är (8). Linjärisering med felterm (Theorem 9 i Adams 4.7) ger

$$f(x_{k+1}) = f(x_k) + f'(x_k)(x_{k+1} - x_k) + \frac{1}{2}f''(s_2)(x_{k+1} - x_k)^2 = \frac{1}{2}f''(s_2)(x_{k+1} - x_k)^2 \tag{13}$$

där vi använde

$$f(x_k) + f'(x_k)(x_{k+1} - x_k) = 0$$

från (5). Tillsammans med (8) och begränsningen (7) ger detta

$$|x_{k+1} - \bar{x}| \le M|f(x_{k+1})| = \frac{1}{2}M|f''(s_2)|(x_{k+1} - x_k)^2 \le \frac{1}{2}MK(x_{k+1} - x_k)^2, \tag{14}$$

vilket är (9). Linjärisering med felterm ger även

$$f(\bar{x}) = f(x_k) + f'(x_k)(\bar{x} - x_k) + \frac{1}{2}f''(s_3)(\bar{x} - x_k)^2, \tag{15}$$

där $f(\bar{x}) = 0$ så att

$$x_k - \bar{x} = \frac{f(x_k)}{f'(x_k)} + \frac{1}{2}\frac{f''(s_3)}{f'(x_k)}(x_k - \bar{x})^2. \tag{16}$$

Enligt (5) har vi

$$\frac{f(x_k)}{f'(x_k)} = -(x_{k+1} - x_k), \tag{17}$$

så att

$$x_k - \bar{x} = -(x_{k+1} - x_k) + \frac{1}{2}\frac{f''(s_3)}{f'(x_k)}(x_k - \bar{x})^2, \tag{18}$$

vilket leder till

$$x_{k+1} - \bar{x} = \frac{1}{2}\frac{f''(s_3)}{f'(x_k)}(x_k - \bar{x})^2 \tag{19}$$

och sedan

$$|x_{k+1} - \bar{x}| = \frac{1}{2}\frac{|f''(s_3)|}{|f'(x_k)|}(x_k - \bar{x})^2 \le \frac{1}{2}MK(x_k - \bar{x})^2, \tag{20}$$

vilket är (10). □

När stoppar man? Vi vill stoppa iterationen när felet är mindre än en given tolerans:

$$|x_k - \bar{x}| \le \text{tol}. \tag{21}$$

Feluppskattningarna i satsen är inte användbara eftersom vi inte vill använda de svårbestända och grova begränsningarna M och K. Men (18) ger

$$x_k - \bar{x} = -(x_{k+1} - x_k) + \frac{1}{2}\frac{f''(s_3)}{f'(x_k)}(x_k - \bar{x})^2,$$

så att

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

Om iterationen konvergerar så är den sista termen snart mycket mindre än de andra termerna och vi har

$$|x_k - \bar{x}| \approx |x_{k+1} - x_k|. \tag{22}$$

Stoppvilkoret

$$|x_{k+1} - x_k| \leq \text{tol} \tag{23}$$

garanterar alltså (21) approximativt. Det betyder att vi accepterar x_k om ändringen i nästa iteration är mindre än toleransen.

Algoritmen. Algoritmen är mycket enkel.

while $|h| > \text{tol}$

beräkna residualen: $\quad b = -f(x)$

beräkna derivatan: $\quad a = f'(x)$

beräkna ändringen: $\quad h = b/a$

uppdatera x: $\quad x = x + h$

Derivatan beräknas lämpligen numeriskt. Newtons metod är nämligen okänslig för fel i derivatan.

Övning. Skriv en funktionsfil `newton.m` som implementerar ovanstående algoritm. Använd skalet `newton.m`

Kopiera in filen `derivative.m` i slutet av `newton.m` så att `derivative` fungerar som en "sub-function". Detta är praktiskt eftersom de två funktionerna då bildar ett paket i en fil.

Prova programmet på några exempel.

$(a) \quad x^2 = 2$

$(b) \quad \sin(x) = 0$

$(c) \quad \cos(x) = x$

$(d) \quad x^2 - 4x - 1 = 0$

Plotta funktionen $f(x)$ först för att få en bra gissning för x_0. Försök hitta alla rötter.

`/stig`