что на равномерной сетке в точке $x=x_i$ имеет место аппроксимация $O(h^2)$. Покажем, что на неравномерной сетке $(h_i \neq h_{i+1})$ погрешность аппроксимации будет иметь только первый порядок. Подставляя разложения (11), (12) в выражение (10) для $L''_{2,i}(x)$, получим

$$L''_{2,i}(x) = u''(x) + \left(x_i - x + \frac{h_{i+1} - h_i}{3}\right) u'''(x) + O(h^2).$$

Здесь даже на равномерной сетке второй порядок аппроксимации имеет место лишь в точке $x=x_i$, а относительно других точек (например, точек $x=x_{i-1}$ и $x=x_{i+1}$) выполняется аппроксимация только первого порядка.

ГЛАВА 5

РЕШЕНИЕ НЕЛИНЕЙНЫХ УРАВНЕНИЙ И СИСТЕМ УРАВНЕНИЙ

§ 1. Примеры итерационных методов решения нелинейных уравнений

1. Введение. Пусть задана функция $f(x)$ действительного переменного. Требуется найти корни уравнения

$$f(x) = 0 \tag{1}$$

или, что то же самое, нули функции $f(x)$.

Уже на примере алгебраического многочлена известно, что нули $f(x)$ могут быть как действительными, так и комплексными. Поэтому более точная постановка задачи состоит в нахождении корней уравнения (1), расположенных в заданной области комплексной плоскости. Можно рассматривать также задачу нахождения действительных корней, расположенных на заданном отрезке. Иногда, пренебрегая точностью формулировок, будем говорить, что требуется решить уравнение (1).

Задача нахождения корней уравнения (1) обычно решается в два этапа. На первом этапе изучается расположение корней (в общем случае на комплексной плоскости) и проводится их разделение, т. е. выделяются области в комплексной плоскости, содержащие только один корень. Кроме того, изучается вопрос о кратности корней. Тем самым находятся некоторые начальные приближения для корней уравнения (1). На втором этапе, используя заданное начальное приближение, строится итерационный процесс, позволяющий уточнить значение отыскиваемого корня.

Не существует каких-то общих регулярных приемов решения задачи о расположении корней произвольной функции $f(x)$. Наиболее полно изучен вопрос о расположении корней алгебраических многочленов

$$f(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \ldots + a_m x^m. \tag{2}$$

Например известно, что если для многочлена (2) с действительными коэффициентами выполнены неравенства

$$f(c) > 0,\ f'(c) > 0,\ \ldots,\ f^{(m)}(c) > 0,$$

то положительные корни $f(x)$ не превосходят числа c. Действительно, из формулы Тейлора

$$f(x)=f(c)+(x-c)f'(c)+\frac{(x-c)^2}{2!}f''(c)+\ldots+\frac{(x-c)^m}{m!}f^{(m)}(c)$$

получаем, что $f(x)>0$ при $x\geqslant c$.

Численные методы решения нелинейных уравнений являются, как правило, итерационными методами, которые предполагают задание достаточно близких к искомому решению начальных данных.

Прежде чем переходить к изложению конкретных итерационных методов, отметим два простых приема отделения действительных корней уравнения (1). Предположим, что $f(x)$ определена и непрерывна на $[a, b]$.

Первый прием состоит в том, что вычисляется таблица значений функции $f(x)$ в заданных точках $x_k\in[a, b]$, $k=0, 1, \ldots, n$. Если обнаружится, что при некотором k числа $f(x_k)$, $f(x_{k+1})$ имеют разные знаки, то это будет означать, что на интервале (x_k, x_{k+1}) уравнение (1) имеет по крайней мере один действительный корень (точнее, имеет нечетное число корней на (x_k, x_{k+1})). Затем можно разбить интервал (x_k, x_{k+1}) на более мелкие интервалы и с помощью аналогичной процедуры уточнить расположение корня.

Более регулярным способом отделения действительных корней является *метод бисекции* (*деления пополам*). Предположим, что на (a, b) расположен лишь один корень x_* уравнения (1). Тогда $f(a)$ и $f(b)$ имеют различные знаки. Пусть для определенности $f(a)>0$, $f(b)<0$. Положим $x_0=0{,}5(a+b)$ и вычислим $f(x_0)$. Если $f(x_0)<0$, то искомый корень находится на интервале (a, x_0), если же $f(x_0)>0$, то $x_*\in(x_0, b)$. Далее, из двух интервалов (a, x_0) и (x_0, b) выбираем тот, на границах которого функция $f(x)$ имеет различные знаки, находим точку x_1 — середину выбранного интервала, вычисляем $f(x_1)$ и повторяем указанный процесс. В результате получаем последовательность интервалов, содержащих искомый корень x_*, причем длина каждого последующего интервала вдвое меньше, чем предыдущего. Процесс заканчивается, когда длина вновь полученного интервала станет меньше заданного числа $\varepsilon>0$, и в качестве корня x_* приближенно принимается середина этого интервала.

Заметим, что если на (a, b) имеется несколько корней, то указанный процесс сойдется к одному из корней, но заранее неизвестно, к какому именно. Можно использовать прием выделения корней: если корень $x=x_*$ кратности m найден, то рассматривается функция

$$g(x)=f(x)/(x-x_*)^m$$

и для нее повторяется процесс нахождения корня.

2. Метод простой итерации. Он состоит в том, что уравнение (1) заменяется эквивалентным уравнением

$$x=s(x) \tag{3}$$

и итерации образуются по правилу

$$x_{n+1}=s(x_n), \quad n=0, 1, \ldots, \tag{4}$$

причем задается начальное приближение x_0. Для сходимости большое значение имеет выбор функции $s(x)$. Эту функцию можно задавать различными способами, однако обычно она берется в виде

$$s(x) = x + \tau(x) f(x), \tag{5}$$

причем функция $\tau(x)$ не меняет знака на том отрезке, где отыскивается корень. В § 2 будет показано, что метод простой итерации сходится при надлежащем выборе начального приближения x_0, если $|s'(x_*)| < 1$, где x_* — корень уравнения (1).

Отметим, что в форме метода простой итерации (4) можно записать, по существу, любой одношаговый итерационный метод.

В частности, если $\tau(x) = \tau = \text{const}$, то получим *метод релаксации*

$$\frac{x_{n+1} - x_n}{\tau} = f(x_n), \quad n = 0, 1, \ldots, \tag{6}$$

для которого $s'(x) = 1 + \tau f'(x)$, и метод сходится при условии

$$-2 < \tau f'(x_*) < 0. \tag{7}$$

Если в некоторой окрестности корня выполняются условия

$$f'(x) < 0, \quad 0 < m_1 < |f'(x)| < M_1, \tag{8}$$

то метод релаксации сходится при $\tau \in (0, 2/M_1)$.

Чтобы выбрать оптимальный параметр τ в методе релаксации, рассмотрим уравнение для погрешности $z_n = x_n - x_*$. Подставляя $x_n = x_* + z_n$ в (6), получим уравнение

$$\frac{z_{n+1} - z_n}{\tau} = f(x_* + z_n).$$

По теореме о среднем имеем

$$f(x_* + z_n) = f(x_*) + z_n f'(x_* + \theta z_n) = z_n f'(x_* + \theta z_n),$$

где $\theta \in (0, 1)$. Таким образом, для погрешности метода релаксации выполняется уравнение

$$\frac{z_{n+1} - z_n}{\tau} = f'(x_* + \theta z_n)\, z_n.$$

Отсюда приходим к оценке

$$|z_{n+1}| \leqslant |1 + \tau f'(x_* + \theta z_n)| \cdot |z_n| \leqslant \max_x |1 + \tau f'(x_* + \theta z_n)| \cdot |z_n|,$$

и если выполнены условия (8), то

$$|z_{n+1}| \leqslant \max\{|1 - \tau M_1|, |1 - \tau m_1|\} |z_n|.$$

Таким образом, задача выбора оптимального параметра сводится к нахождению τ, для которого функция

$$q(\tau) = \max\{|1 - \tau M_1|, |1 - \tau m_1|\}$$

принимает минимальное значение.

Из рассмотрения графика функции $q(\tau)$ видно, что точка минимума определяется условием

$$|1-\tau M_1| = |1-\tau m_1|$$

и равна

$$\tau=\tau_0=2/(M_1+m_1).$$

При этом значении τ имеем

$$q(\tau_0)=\rho_0=\frac{1-\xi}{1+\xi}, \quad \xi=\frac{m_1}{M_1},$$

так что для погрешности справедлива оценка

$$|z_n|\leqslant\rho_0^n|z_0|, \quad n=0, 1, \ldots$$

3. Метод Ньютона. Пусть начальное приближение x_0 известно. Заменим $f(x)$ отрезком ряда Тейлора

$$f(x)\approx H_1(x)=f(x_0)+(x-x_0)f'(x_0)$$

и за следующее приближение x_1 возьмем корень уравнения $H_1(x)=0$, т. е.

$$x_1=x_0-\frac{f(x_0)}{f'(x_0)}.$$

Вообще, если итерация x_k известна, то следующее приближение x_{k+1} в *методе Ньютона* определяется по правилу

$$x_{k+1}=x_k-\frac{f(x_k)}{f'(x_k)}, \quad k=0, 1, \ldots \tag{9}$$

Метод Ньютона называют также *методом касательных*, так как новое приближение x_{k+1} является абсциссой точки пересечения касательной, проведенной в точке $(x_k, f(x_k))$ к графику функции $f(x)$, с осью Ox.

Исследование сходимости метода Ньютона будет проведено в § 3. Здесь отметим без доказательства лишь две особенности этого метода. Во-первых, метод имеет *квадратичную сходимость*, т. е. в отличие от линейных задач погрешность на следующей итерации пропорциональна квадрату погрешности на предыдущей итерации: $x_{k+1}-x_*=O((x_k-x_*)^2)$.

И, во-вторых, такая быстрая сходимость метода Ньютона гарантируется лишь при очень хороших, т. е. близких к точному решению, начальных приближениях. Если начальное приближение выбрано неудачно, то метод может сходиться медленно, либо не сойдется вообще.

Модифицированный метод Ньютона

$$x_{k+1}=x_k-\frac{f(x_k)}{f'(x_0)}, \quad k=0, 1, \ldots \tag{10}$$

применяют в том случае, когда хотят избежать многократного вычисления производной $f'(x)$. Метод (10) предъявляет меньше требований к выбору начального приближения x_0, однако обладает лишь *линейной сходимостью*, т. е. $x_{k+1}-x_*=O(x_k-x_*)$.

Метод (10) гарантирует отсутствие деления на нуль, если $f'(x_0)\neq 0$.

4. Метод секущих. Этот метод получается из метода Ньютона (9) заменой $f'(x_k)$ разделенной разностью $\dfrac{f(x_k)-f(x_{k-1})}{x_k-x_{k-1}}$, вычисленной по известным значениям x_k и x_{k-1}. В результате получаем итерационный метод

$$x_{k+1}=x_k-\frac{x_k-x_{k-1}}{f(x_k)-f(x_{k-1})}f(x_k),\qquad k=1,\,2,\,\ldots,\tag{11}$$

который в отличие от ранее рассмотренных методов является *двухшаговым*, т. е. новое приближение x_{k+1} определяется двумя предыдущими итерациями x_k и x_{k-1}. В методе (11) необходимо задавать два начальных приближения x_0 и x_1.

Геометрическая интерпретация метода секущих состоит в следующем. Через точки $(x_{k-1}, f(x_{k-1}))$, $(x_k, f(x_k))$ проводится прямая, абсцисса точки пересечения этой прямой с осью Ox и является новым приближением x_{k+1}. Иначе говоря, на отрезке $[x_{k-1}, x_k]$ функция $f(x)$ интерполируется многочленом первой степени и за очередное приближение x_{k+1} принимается корень этого многочлена.

5. Интерполяционные методы. Идея *интерполяционных методов* состоит в том, что нахождение корней уравнения (1) заменяется нахождением корней интерполяционного многочлена, построенного для $f(x)$. Интерполяционный метод первого порядка приводит к методу секущих. Интерполяционный метод второго порядка называется *методом парабол*. Метод Ньютона (9) можно получить, заменяя $f(x)$ интерполяционным многочленом Эрмита первой степени.

Получим формулы метода парабол. Пусть приближения x_{k-2}, x_{k-1}, x_k известны. Построим интерполяционный многочлен Ньютона (см. (11) из § 1 гл. 3)

$$P_2(x)=f(x_k)+(x-x_k)f(x_k,\ x_{k-1})+(x-x_k)(x-x_{k-1})f(x_k,\ x_{k-1},\ x_{k-2})$$

и обозначим $z=x-x_k$. Тогда уравнение $P_2(x)=0$ примет вид

$$az^2+bz+c=0,\tag{12}$$

где $a=f(x_k,\ x_{k-1},\ x_{k-2})$, $b=f(x_k,\ x_{k-1})+(x_k-x_{k-1})f(x_k,\ x_{k-1},\ x_{k-2})$, $c=$ $=f(x_k)$.

Решая уравнение (12), получим два, может быть комплексных, корня, $z^{(1)}$ и $z^{(2)}$, по которым вычислим $x^{(1)}=x_k+z^{(1)}$, $x^{(2)}=x_k+z^{(2)}$. В качестве следующего приближения в методе парабол выбирается то из значений $x^{(1)}$, $x^{(2)}$, которое ближе к x_k, т. е. отвечающее минимальному по модулю корню уравнения (12). Метод парабол удобен тем, что позволяет получить комплексные корни уравнения (7), пользуясь вещественными начальными приближениями x_0, x_1, x_2.

6. **Использование обратной интерполяции.** Ряд итерационных методов можно получить с помощью интерполирования функции $x=\varphi(y)$, обратной $f(x)$. Заметим, что если x_* — корень уравнения $f(x)=0$, то $\varphi(0)=x_*$. Таким образом, задача нахождения корня x_* сводится к вычислению значения $\varphi(0)$.

Предположим, что известны приближения $x_0, x_1, \ldots, x_n$ к корню x_*. Тогда можно вычислить $y_i=f(x_i)$, $i=0, 1, \ldots, n$, и считать, что по переменной y заданы узлы $y_0, y_1, \ldots, y_n$ и в них известны значения $x_0=\varphi(y_0), \ldots, x_n=\varphi(y_n)$. По данным $(y_i, \varphi(y_i))$, $i=0, 1, \ldots, n$, строится интерполяционный многочлен $L_n(y)$ для функции $\varphi(y)$ и в качестве следующего приближения x_{n+1} берется $L_n(0)$.

Линейная обратная интерполяция ($n=1$) приводит к методу секущих. Квадратичная обратная интерполяция ($n=2$) приводит к методу

$$x_{k+1}=x_k-x_k\varphi(y_k, y_{k-1})+x_{k-1}x_k\varphi(y_k, y_{k-1}, y_{k-2}),$$

отличному от метода парабол. Здесь $\varphi(y_k, y_{k-1})$ и $\varphi(y_k, y_{k-1}, y_{k-2})$ — разделенные разности первого и второго порядков соответственно.

Сделаем следующее замечание. Перечисленные выше итерационные методы в случае сходимости позволяют при заданных начальных приближениях найти лишь один из корней уравнения (1). Чтобы отыскать другие корни, надо менять начальные приближения. Может оказаться, что и при других начальных данных метод сходится к тому же корню $x=x_*$. Тогда целесообразно отделить этот корень, т. е. применить итерационный метод к $g(x)=f(x)/(x-x_*)$.

§ 2. Сходимость метода простой итерации

1. **Теорема о сходимости.** Перепишем уравнение

$$f(x)=0 \tag{1}$$

в эквивалентном виде

$$x=s(x) \tag{2}$$

и рассмотрим метод простой итерации

$$x_{k+1}=s(x_k), \quad k=0, 1, \ldots, x_0 \text{ задан.} \tag{3}$$

Говорят, что итерационный метод *сходится*, если последовательность $\{x_k\}$ имеет предел при $k\to\infty$.

В следующей теореме формулируются условия на функцию $s(x)$, гарантирующие существование и единственность решения уравнения (2) и сходимость метода простой итерации к этому решению. Напомним, что функция $s(x)$ называется липшиц-непрерывной с постоянной q на множестве X, если для всех $x', x''\in X$ выполняется неравенство

$$|s(x')-s(x'')|\leqslant q|x'-x''|. \tag{4}$$

В дальнейшем в качестве X будем брать отрезок

$$U_r(a)=\{x\colon\ |x-a|\leqslant r\} \tag{5}$$

длины $2r$ с серединой в точке a.

Теорема 1. *Если $s(x)$ липшиц-непрерывна с постоянной $q \in (0, 1)$ на отрезке $U_r(a)$, причем*

$$|s(a)-a| \leqslant (1-q)r, \qquad (6)$$

то уравнение (2) имеет на отрезке $U_r(a)$ единственное решение x_* и метод простой итерации (3) сходится к x_* при любом начальном приближении $x_0 \in U_r(a)$. Для погрешности справедлива оценка

$$|x_k-x_*| \leqslant q^k |x_0-x_*|, \quad k=0, 1, 2, \ldots \qquad (7)$$

Доказательство. Сначала докажем по индукции, что $x_k \in U_r(a)$, $k=1, 2, \ldots$, т. е. что метод простой итерации не выводит за пределы того множества, на котором $s(x)$ липшиц-непрерывна с постоянной $q \in (0, 1)$. Предположим, что $x_j \in U_r(a)$ при некотором $j \geqslant 0$, и докажем, что тогда $x_{j+1} \in U_r(a)$. Из равенства

$$x_{j+1}-a=s(x_j)-a=(s(x_j)-s(a))+(s(a)-a)$$

получим

$$|x_{j+1}-a| \leqslant |s(x_j)-s(a)|+|s(a)-a|.$$

Учитывая условие липшиц-непрерывности, предположение индукции и условие (6), имеем

$$|s(x_j)-s(a)| \leqslant q|x_j-a| \leqslant qr,$$
$$|x_{j+1}-a| \leqslant qr+(1-q)r \leqslant r,$$

т. е. $x_{j+1} \in U_r(a)$.

Оценим теперь разность двух соседних итераций $x_{j+1}-x_j$. Имеем

$$x_{j+1}-x_j=s(x_j)-s(x_{j-1}),$$

и поскольку все точки x_j, $j=1, 2, \ldots$, находятся на отрезке $U_r(a)$, получаем оценку

$$|x_{j+1}-x_j| \leqslant q|x_j-x_{j-1}|$$

и, следовательно,

$$|x_{j+1}-x_j| \leqslant q^j|x_1-x_0|, \quad j=1, 2, \ldots \qquad (8)$$

Оценка (8) позволяет доказать фундаментальность последовательности $\{x_k\}$. Действительно, пусть p — любое натуральное число. Тогда

$$x_{k+p}-x_k=\sum_{j=1}^{p}(x_{k+j}-x_{k+j-1}),$$

и согласно (8) имеем

$$|x_{k+p}-x_k| \leqslant |x_1-x_0|\sum_{j=1}^{p} q^{k+j-1}=q^k\frac{1-q^p}{1-q}|x_1-x_0| \leqslant \frac{q^k}{1-q}|x_1-x_0|,$$

т. е.

$$|x_{k+p}-x_k| \leqslant \frac{q^k}{1-q}|x_1-x_0|, \quad k, p=1, 2, \ldots \qquad (9)$$

Поскольку правая часть неравенства (9) стремится к нулю при $k \to \infty$ и не зависит от p, последовательность $\{x_k\}$ является фундаментальной. Следовательно, существует

$$\lim_{k\to\infty} x_k = x_* \in U_r(a).$$

Переходя в (3) к пределу при $k \to \infty$ и учитывая непрерывность функции $s(x)$, получим $x_* = s(x_*)$, т. е. x_* — решение уравнения (2).

Предположим, что x_*' — какое-то решение уравнения (2), принадлежащее отрезку $U_r(a)$. Тогда

$$x_* - x_*' = s(x_*) - s(x_*')$$

и по условию теоремы

$$|x_* - x_*'| \leqslant q\,|x_* - x_*'|.$$

Так как $q < 1$, последнее неравенство может выполняться лишь при $x_*' = x_*$, т. е. решение единственно.

Докажем оценку погрешности (7). Из уравнения (3) получим

$$x_{k+1} - x_* = s(x_k) - x_* = s(x_k) - s(x_*),$$

и так как $x_k,\ x_* \in U_r(a)$, приходим к неравенству

$$|x_{k+1} - x_*| \leqslant q\,|x_k - x_*|, \qquad (10)$$

справедливому для всех $k = 0, 1, \ldots$, из которого и следует оценка (7). Теорема 1 доказана.

Замечание 1. Если для погрешности какого-либо итерационного метода выполняется неравенство

$$|x_k - x_*| \leqslant M_1 q^k |x_0 - x_*|,$$

где $q \in (0, 1)$ и M_1 не зависит от k, то говорят, что метод сходится линейно со скоростью геометрической прогрессии со знаменателем q. Такая терминология объясняется тем, что при $k \to \infty$ погрешность убывает как q^k.

Замечание 2. Зафиксируем в неравенстве (9) индекс k и устремим p к бесконечности. Тогда получим оценку погрешности

$$|x_k - x_*| \leqslant \frac{q^k}{1-q}\,|s(x_0) - x_0|, \qquad k = 1, 2, \ldots \qquad (11)$$

В правую часть оценки (11) входят только известные величины, в то время как оценка (7) содержит заранее неизвестное значение x_*.

Приведем следствия из теоремы 1, содержащие более удобные для проверки условия сходимости.

Будем предполагать, что $s(x)$ непрерывно дифференцируема на отрезке $U_r(a)$.

Следствие 1. *Если*

$$|s'(x)| \leqslant q < 1 \qquad (12)$$

для $x \in U_r(a)$, *выполнено условие* (6) *и* $x_0 \in U_r(a)$, *то уравнение* (2) *имеет единственное решение* $x_* \in U_r(a)$, *метод* (3) *сходится и справедлива оценка* (7).

Действительно, из (12) следует (4) с $q \in (0, 1)$.

Следствие 2. *Пусть уравнение* (2) *имеет решение* x_*, *функция* $s(x)$ *непрерывно дифференцируема на отрезке*

$$U_r(x_*)=\{x\colon\ |x-x_*|\leqslant r\} \tag{13}$$

и $|s'(x_*)|<1$. *Тогда существует* $\varepsilon>0$ *такое, что на отрезке* $U_\varepsilon(x_*)$ *уравнение* (2) *не имеет других решений и метод* (3) *сходится, если только* $x_0\in U_\varepsilon(x_*)$.

Доказательство. Поскольку $s(x)$ непрерывно дифференцируема на отрезке $U_r(x_*)$ и $|s'(x_*)|<1$, найдутся числа $q\in(0,\ 1)$ и $\varepsilon\in(0,\ r]$ такие, что

$$|s'(x)|\leqslant q<1$$

для всех $x\in U_\varepsilon(x_*)$.

2. **Метод Эйткена ускорения сходимости.** Предположим, что какой-либо итерационный метод имеет линейную сходимость, т. е.

$$x_k-x_*\approx aq^k,\quad q\in(0,\ 1),\quad k=1,\ 2,\ \ldots$$

Числа a, q, x_* заранее неизвестны, но их можно найти, используя три последовательных итерации x_k, x_{k+1}, x_{k+2}. Составим уравнения

$$x_k-x_*=aq^k,\quad x_{k+1}-x_*=aq^{k+1},\quad x_{k+2}-x_*=aq^{k+2}$$

(здесь равенства надо понимать как приближенные), из которых найдем

$$\begin{aligned}
\Delta x_k &= x_{k+1}-x_k=aq^k(q-1),\\
\Delta^2 x_k &= \Delta x_{k+1}-\Delta x_k=aq^k(q-1)^2,\\
x_* &= x_{k+2}-\frac{(\Delta x_{k+1})^2}{\Delta^2 x_k}\,.
\end{aligned} \tag{14}$$

Метод Эйткена ускорения сходимости состоит в том, что после вычисления x_k, x_{k+1}, x_{k+2} производится пересчет по формуле

$$y_{k+1}=x_{k+2}-\frac{(\Delta x_{k+1})^2}{\Delta^2 x_k} \tag{15}$$

и значение y_{k+1} принимается за новое приближение. Если бы равенство (14) выполнялось точно, то y_{k+1} совпало бы с точным решением x_*. В общем случае y_{k+1} дает лучшее приближение к x_*, чем очередная итерация x_{k+2}. Подчеркнем, что главным предположением здесь является требование линейной сходимости основного итерационного метода. В случае методов, имеющих более высокую скорость сходимости (например метода Ньютона), ускорение по Эйткену в форме (15) неэффективно.

На практике не обязательно проводить пересчет по формуле (15) на каждой итерации k. Употребительны методы, в которых такой пересчет осуществляется циклически, т. е. через определенное число основных итераций.

С помощью метода Эйткена на основе известных итерационных методов можно получить иногда новые итерационные методы, обладающие более высокой сходимостью. Рассмотрим, например, метод релаксации

$$\frac{x_{k+1}-x_k}{\tau}+f(x_k)=0 \tag{16}$$

(см. (6) из § 1), который имеет линейную сходимость, если

$$M_1>f'(x)>0, \qquad 0<\tau<2/M_1.$$

Предположим, что при некотором k получены значения x_k, x_{k+1}, x_{k+2}. Вычислим согласно (15) величину

$$y_{k+1}=x_{k+2}-\frac{(x_{k+2}-x_{k+1})^2}{x_{k+2}-2x_{k+1}+x_k} \tag{17}$$

и исключим из (17) с помощью (16) величины x_{k+1}, x_{k+2}. Имеем

$$x_{k+1}=x_k-\tau f(x_k),$$

$$x_{k+2}=x_{k+1}-\tau f(x_{k+1})=x_k-\tau f(x_k)-\tau f(x_k-\tau f(x_k)),$$

следовательно,

$$y_{k+1}=x_k-\tau\frac{f^2(x_k)}{f(x_k)-f(x_k-\tau f(x_k))}.$$

Проведенные построения позволяют предположить, что одношаговый итерационный метод

$$y_{k+1}=y_k-\tau\frac{f^2(y_k)}{f(y_k)-f(y_k-\tau f(y_k))} \tag{18}$$

обладает более быстрой сходимостью, чем исходный метод релаксации (16). Действительно, как показано, например, в [25], метод (18) при $\tau=1$ (*метод Стеффенсена*) имеет квадратичную сходимость.

§ 3. Сходимость метода Ньютона

1. Простой вещественный корень. Предположим, что уравнение

$$f(x)=0 \tag{1}$$

имеет простой вещественный корень $x=x_*$, так что $f(x_*)=0$, $f'(x_*)\neq 0$. Будем предполагать, что $f(x)$ дважды непрерывно дифференцируема в окрестности корня x_*. Исследуем сходимость метода Ньютона

$$x_{k+1}=x_k-\frac{f(x_k)}{f'(x_k)}, \qquad k=0,1,\ldots \tag{2}$$

Заметим прежде всего, что (2) можно рассматривать как частный случай метода простой итерации

$$x_{k+1}=s(x_k), \qquad k=0,1,\ldots, \tag{3}$$

для которого

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

В § 2 было показано, что для сходимости метода (3) достаточно потребовать, чтобы в некоторой окрестности искомого корня выполнялось неравенство

$$|s'(x)| \leqslant q < 1. \tag{5}$$

Для функции (4) имеем

$$s'(x) = \frac{f(x) f''(x)}{(f'(x))^2},$$

и если x_* — корень $f(x)$, то $s'(x_*) = 0$. Поэтому найдется окрестность корня, в которой выполнено неравенство (5). Тем самым при надлежащем выборе начального приближения метод Ньютона сходится. Однако следствием малости $s'(x)$ в окрестности x_* является не просто сходимость, а сходимость существенно более быстрая, чем в общем случае метода простой итерации. В следующей теореме доказано, что метод Ньютона имеет квадратичную сходимость, т. е. что он сходится и погрешность на $(k+1)$-й итерации пропорциональна квадрату погрешности на k-й итерации.

Теорема 1. *Пусть x_* — простой вещественный корень уравнения* (1) *и пусть $f'(x) \neq 0$ в окрестности*

$$U_r(x_*) = \{x\colon\ |x - x_*| < r\}.$$

Предположим, что $f''(x)$ непрерывна в $U_r(x_*)$ и

$$0 < m_1 = \inf_{x \in U_r(x_*)} |f'(x)|, \quad M_2 = \sup_{x \in U_r(x_*)} |f''(x)|, \tag{6}$$

причем

$$\frac{M_2 |x_0 - x_*|}{2m_1} < 1. \tag{7}$$

Тогда если $x_0 \in U_r(x_*)$, то метод Ньютона (2) *сходится, причем для погрешности справедлива оценка*

$$|x_k - x_*| \leqslant q^{2^k - 1} |x_0 - x_*|, \tag{8}$$

где

$$q = \frac{M_2 |x_0 - x_*|}{2m_1} < 1. \tag{9}$$

Доказательство. Из уравнения (2) получим

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

или

$$x_{k+1} - x_* = \frac{F(x_k)}{f'(x_k)}, \tag{10}$$

где

$$F(x) = (x - x_*) f'(x) - f(x). \tag{11}$$

Заметим, что $F(x_*) = 0$ и

$$F'(x) = (x - x_*) f''(x). \tag{12}$$

Далее, воспользовавшись тождеством

$$F(x_k)=F(x_*)+\int\limits_{x_*}^{x_k}F'(t)\,dt$$

и выражением (12) для $F'(t)$, получим

$$F(x_k)=\int\limits_{x_*}^{x_k}(t-x_*)f''(t)\,dt.$$

Так как функция $t-x_*$ не меняет знак на отрезке интегрирования, можно воспользоваться формулой среднего значения и записать, что

$$F(x_k)=\int\limits_{x_*}^{x_k}(t-x_*)f''(t)\,dt=f''(\xi_k)\int\limits_{x_*}^{x_k}(t-x_*)\,dt=\frac{(x_k-x_*)^2}{2}f''(\xi_k),$$

где $\xi_k=\theta_k x_k+(1-\theta_k)x_*$, $|\theta_k|<1$. Обращаясь к (10), получим

$$x_{k+1}-x_*=\frac{f''(\xi_k)(x_k-x_*)^2}{2f'(x_k)}, \qquad (13)$$

т. е. погрешность на $(k+1)$-й итерации пропорциональна квадрату погрешности на k-й итерации.

Докажем оценку (8) по индукции. При $k=0$ из (13) получим

$$x_1-x_*=\frac{f'(\xi_0)(x_0-x_*)^2}{2f'(x_0)}. \qquad (14)$$

По условию теоремы $x_0\in U_r(x_*)$, и поэтому согласно первому из условий (6) имеем $|f'(x_0)|\geqslant m_1>0$. Кроме того, $\xi_0=\theta_0x_0+(1-\theta_0)x_*$,

$$\xi_0-x_*=\theta_0(x_0-x_*),\ |\xi_0-x_*|\leqslant|\theta_0|\,|x_0-x_*|<r,$$

т. е. $\xi_0\in U_r(x_*)$. Но тогда согласно (6) $|f''(\xi_0)|\leqslant M_2$. Таким образом, приходим к оценке

$$|x_1-x_*|\leqslant\frac{M_2(x_0-x_*)^2}{2m_1}=q\,|x_0-x_*|,$$

совпадающей с оценкой (8) при $k=1$.

Предположим, что оценка (8) выполняется при $k=l\geqslant1$, и докажем, что она выполняется и при $k=l+1$. При $k=l$ выражение (13) принимает вид

$$x_{l+1}-x_*=\frac{f''(\xi_l)(x_l-x_*)^2}{2f'(x_l)}. \qquad (15)$$

Покажем, что x_l, $\xi_l\in U_r(x_*)$. Действительно, из (8) при $k=l$ имеем

$$|x_l-x_*|\leqslant q^{2^l-1}|x_0-x_*|<|x_0-x_*|<r,$$

т. е. $x_l\in U_r(x_*)$. Кроме того,

$$\xi_l-x_*=\theta_l(x_l-x_*),\qquad|\theta_l|<1,$$

и, следовательно, $\xi_l\in U_r(x_*)$

Теперь можно воспользоваться условиями (6) и оценить

$$|f'(x_l)| \geqslant m_1 > 0, \quad |f''(\xi_l)| \leqslant M_2.$$

Отсюда и из (15) получим

$$|x_{l+1} - x_*| \leqslant \frac{M_2 (x_l - x_*)^2}{2m_1}.$$

Из этого неравенства и из неравенства (8), имеющего следующий вид при $k=l$:

$$|x_l - x_*|^2 \leqslant q^{2^{l+1}-2} |x_0 - x_*|^2,$$

получим оценку

$$|x_{l+1} - x_*| \leqslant \left(\frac{M_2 |x_0 - x_*|}{2m_1}\right) q^{2^{l+1}-2} |x_0 - x_*| = q^{2^{l+1}-1} |x_0 - x_*|,$$

т. е. оценку (8) при $k=l+1$. Из оценки (8) следует сходимость метода (2), так как для $q \in (0, 1)$ правая часть неравенства (8) стремится к нулю при $k \to \infty$. Теорема 1 доказана.

Замечания. 1. Условие (7) означает, что начальное приближение надо брать достаточно близко к искомому корню.

2. Выполнение равенства (13) означает, что метод имеет квадратичную сходимость.

3. Поскольку x_* заранее неизвестен, иногда трудно проверить условие $x_0 \in U_r(x_*)$. Но если известно, что $|f'(x)| \geqslant m_1 > 0$ в некоторой окрестности корня, то для оценки близости начального приближения к корню можно воспользоваться неравенством

$$|x_0 - x_*| \leqslant |f(x_0)|/m_1. \tag{16}$$

Действительно,

$$f(x_0) = f(x_0) - f(x_*) = (x_0 - x_*) f'(\xi),$$

откуда и следует (16).

2. Кратные корни. Говорят, что x_* является корнем кратности p, если

$$f(x_*) = f'(x_*) = \ldots = f^{(p-1)}(x_*) = 0, \qquad f^{(p)}(x_*) \neq 0$$

Будем предполагать сейчас, что $f^{(p+1)}(x)$ непрерывна в окрестности корня x_* кратности p. В случае корня кратности p квадратичную сходимость имеет *метод Ньютона с параметром*

$$f'(x_k) \frac{x_{k+1} - x_k}{\tau} + f(x_k) = 0, \tag{17}$$

где $\tau = p$. Справедлива

Теорема 2. *Пусть x_* — корень кратности p уравнения* (1) *и в окрестности*

$$U_r(x_*) = \{x: |x - x_*| < r\}$$

производная $f^{(p)}(x)$ отлична от нуля.

Пусть $f^{(p+1)}(x)$ непрерывна в $U_r(x_*)$ и

$$0 < m_p = \inf_{x \in U_r(x_*)} |f^{(p)}(x)|, \quad M_{p+1} = \sup_{x \in U_r(x_*)} |f^{(p+1)}(x)|,$$