Hoofdstuk II

Nulpuntsbepaling

door P. Zegeling

1 Inleiding

2.1 Niet-lineaire vergelijkingen

Het vinden van één of meer wortels α van een niet-lineaire vergelijking (of anders gezegd: nulpunten van een niet-lineaire functie)

$$f(x) = 0, \quad x \in \mathbb{R}, \quad \text{of } x \text{ in het definitiegebied van } f \tag{1.1}$$

is een van de meest voorkomende problemen in de toegepaste wiskunde en in vele andere toepassingsgebieden. Indien $x \in \mathbb{R}^n$ en $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ dan hebben we te maken met niet-lineaire stelsels. We zullen ons voornamelijk bezig gaan houden met het geval $n = 1$: een scalaire niet-lineaire vergelijking. Sommige niet-lineaire vergelijkingen hebben een expliciete formule voor de oplossing; de bekendste is natuurlijk de *abc*-formule voor een kwadratische vergelijking. Er bestaan (wat minder overzichtelijke) formules, ofschoon weinig gebruikt in de praktijk, voor 3e-graads- en 4e-graadsvergelijkingen.
Het moge ook duidelijk zijn dat het *aantal* oplossingen van een algemene niet-lineaire vergelijking elke waarde $\in \mathbb{N}$ kan aannemen:

- $\exp(x) + 1 = 0$ heeft geen enkele oplossing
- $\exp(-x) - x = 0$ heeft precies één oplossing
- $x^2 - 4\sin(x) = 0$ heeft twee oplossingen
- $x^3 + 6x^2 + 11x - 6 = 0$ heeft drie oplossingen
- $\sin(x) = 0$ heeft ∞-veel oplossingen

Behalve voor enige speciale situaties, zoals eerder beschreven, zijn i.h.a. geen expliciete oplossingen van (1.1) voorhanden en moeten we tevreden zijn met de mogelijkheid om een numerieke benadering voor de wortel te vinden met een zekere van tevoren gespecificeerde nauwkeurigheid. Deze numerieke benaderingen van de oplossingen worden vaak verkregen met behulp van iteratieve methoden. Met een iteratieve methode wordt uitgaande van een geschatte startwaarde, die natuurlijk bij voorkeur zo dicht mogelijk bij het gezochte nulpunt ligt, een rij getallen x_i gegenereerd, met uiteraard de

bedoeling dat deze rij getallen convergeert naar het gevraagde nulpunt. Iedere volgende iteratiewaarde wordt op basis van zijn voorganger(s) volgens een bepaalde iteratieve formule berekend. In dit hoofdstuk zullen we voornamelijk de situatie beschouwen van één of twee voorgangers, dus $x_{i+1} = \phi(x_i)$, of $= \phi(x_{i-1}, x_i)$ voor een zekere functie ϕ. Als deze rij convergeert, dan bereiken we nooit de exacte waarde ('toevalstreffers' uitgesloten), maar kunnen we deze onder 'gunstige' omstandigheden wel zo dicht mogelijk benaderen. De grootheid $x_i - \alpha$ geeft dan de gemaakte fout aan in de i-de iteratie van het proces.
Bij het gebruik van iteratieve methoden voor nulpunten moet je je direkt de volgende zaken gaan afvragen. Bijvoorbeeld:

Vraag 1A. Wat is, numeriek gezien, een nulpunt eigenlijk? Plot n.a.v. deze vraag de functie $f(x) = (1-x)^6$ eens met Matlab (gebruik hiervoor de file `nulpvb1.m`).
NB. In hoofdstuk II kun je de variabelen en schermpjes 'schoonvegen' m.b.v. de file `schoon.m`; d.w.z. in Matlab: `schoon` ($\hookleftarrow$).

Vraag 1B. Probeer ook eens `nulpvb2.m` voor het plotten van de functie $f(x) = x - 3 + 10^{15}(\tan(\arctan(x)) - x)$. Wat is hier aan de hand?

Andere interessante vragen die we tegen zullen komen zijn bijvoorbeeld: hoeveel nulpunten zijn er (zie de eerdergenoemde voorbeelden), en naar welk van die nulpunten convergeert de iteratieve methode? Convergeert de methode wel en, zo ja, hoe snel? Hoe moet er gestart worden met het proces (startwaarde) en wanneer moet je stoppen (stopcriterium)? En, uiteindelijk, natuurlijk de belangrijkste vraag: hoe nauwkeurig is de berekende oplossing?
Een aantal van deze vragen zien we straks terug bij de experimenten.

Terugverwijzend naar Hoofdstuk I wordt het nut van numerieke methoden voor vergelijkingen als (1.1) op een andere manier duidelijk, indien we bijvoorbeeld Euler-Backward willen toepassen op een niet-lineaire DV.

Opgave 1C. *Schrijf nog eens Euler-Backward uit voor de niet-lineaire DV* (1.3) *uit Hoofdstuk I en zie in dat we een numerieke methode nodig hebben voor het oplossen van een niet-lineaire vergelijking om überhaupt van t_n naar t_{n+1} te kunnen komen.*

Nu volgen eerst enkele voorbeelden van niet-lineaire vergelijkingen en 'praktijkproblemen' die we nog tegen zullen komen.

Voorbeeld 1D.

$$f(x) = x^3 + 3x - 4 = 0. \tag{1.2}$$

Deze vergelijking heeft de unieke wortel $x = 1$. Dit is een simpel testprobleem voor numerieke methoden, waarbij we het gedrag van de fout tijdens het iteratieproces kunnen bijhouden.

Voorbeeld 1E.

$$f(x) = x^3 - 3x + 2 = 0. \tag{1.3}$$

Deze vergelijking lijkt op de voorgaande, maar heeft twee oplossingen $x_1 = -2$ en $x_2 = 1$, waarbij x_2 een zogenaamde 'dubbele' wortel is. Het is op dit moment nog onduidelijk naar welk van de twee nulpunten een iteratief proces convergeert en welke invloed het speciale karakter van x_2 mogelijk heeft.

Voorbeeld 1F.

$$f_B(x) = x + \exp(-Bx^2)\cos(x) = 0. \tag{1.4}$$

waarbij $B > 0$ een parameter is. Deze vergelijking heeft een unieke oplossing, waarvan de exacte waarde onbekend is. Het ophogen van de parameter B verhoogt de 'moeilijkheidsgraad' van het probleem navenant.

Voorbeeld 1G. Een interessant 'praktijk'probleem voor nulpuntsbepaling treedt op bij het berekenen van annuiteiten: een bedrag P_1 aan € wordt op een rekening gezet aan het begin van de jaren $1, 2, \ldots, N_1$. Het wordt jaarlijks vergroot met een factor r (bijv. $r = 0.05$ betekent een rentevoet van 5%). Aan het begin van de jaren $N_1{+}1, \ldots, N_1{+}N_2$ wordt een bedrag van P_2 in € opgenomen van de rekening. Na de laatste transactie staat er precies € 0,– op de rekening. De relatie die dit proces beschrijft wordt gegeven door de volgende vergelijking:

$$P_1[(1 + r)^{N_1} - 1] = P_2[1 - (1 + r)^{-N_2}]. \tag{1.5}$$

Als gegeven is dat $N_1 = 30$ jaar, $N_2 = 20$ jaar, $P_1 =$ € 2000,– en $P_2 =$ € 8000,–, wat is de rente r dan? Om dit te berekenen moeten we een niet-lineaire vergelijking oplossen.

Voorbeeld 1H. Beschouw het probleem van het richten van een kanon om een doel te raken op afstand d. Het kanon geeft een beginsnelheid V_0 mee aan de kanonskogel onder een hoek ϑ. Dit wordt beschreven door

$$f(\vartheta) = \frac{2V_0^2\cos(\vartheta)\sin(\vartheta)}{g} - d = 0. \tag{1.6}$$

Gevraagd is de hoek ϑ te bepalen bij gegeven V_0 en d ($g = 9.8\,\mathrm{m/s^2}$).

Voorbeeld 1I. Een pijp ter lengte L heeft een dwarsdoorsnede in de vorm van een halve cirkel met straal r. Als deze gevuld is met water tot een afstand h vanaf de bovenkant gerekend, geldt voor het volume V van het water:

$$V = L(0.5\pi r^2 - r^2\arcsin(h/r) - h\sqrt{r^2 - h^2}). \tag{1.7}$$

Stel dat $L = 10$ meter, $r = 1$ meter, and $V = 12.4$ kubieke meter. Gevraagd is: bepaal de diepte van het water in de pijp tot op een nauwkeurigheid van 0.01 meter.

Voorbeeld 1J. Een object valt verticaal door de lucht naar beneden en ondervindt zowel wrijving als zwaartekracht. Stel dat men het object met massa m laat vallen van een hoogte S_0 en dat de hoogte van het object na t seconden wordt gegeven door de volgende formule:

$$S(t) = S_0 + \frac{mg}{k}t - \frac{m^2g}{k^2}(1 - e^{-kt/m}), \tag{1.8}$$

waarbij g de versnelling t.g.v. de zwaartekracht is en k coefficient van de luchtweerstand weergeeft in kg sec/m.
Stel dat $S_0 = 300\,$meter, $m = 0.25\,$kg en $k = 0.1\,$kg sec/m.

De vraag is: bepaal met een nauwkeurigheid van 0.01 sec, de tijdsduur die het object nodig heeft om de grond te raken.

Voorbeeld 1K. De groeifactor in grote populaties kan worden gemodelleerd (over niet al te lange tijdperioden) door aan te nemen dat de populatie continu in de tijd groeit met de factor die evenredig is met het aantal individuen die er op dat moment zijn. Als we met $N(t)$ het aantal individuen op tijdstip t aangeven en met λ de constante geboorte factor van de populatie, dan voldoet de populatie aan de volgende DV

$$\frac{dN(t)}{dt} = \lambda N(t) + v, \tag{1.9}$$

waarbij v de constante immigratie factor beschrijft.
De oplossing van deze DV is

$$N(t) = N_0 e^{\lambda t} + \frac{v}{\lambda}(e^{\lambda t} - 1). \tag{1.10}$$

Stel nu dat een zekere populatie aanvankelijk 1 miljoen individuen telt, dat er, bijv., 435 000 individuen immigreren in het eerste jaar, en dat er 1 564 000 individuen aanwezig zijn aan het einde van het eerste jaar.
De vraag is: wat is de geboortefactor van deze populatie? Hiervoor moet eerst een niet-lineaire vergelijking voor λ uitgewerkt worden!

2.2 Een 'standaardroutine' in Matlab

Vraag 2A. Hoe benadert Matlab nulpunten van een functie en zijn deze uitkomsten betrouwbaar?

Experiment. Probeer beide nulpunten van vergelijking (1.3) (de functie wordt gedefinieerd in `f.m`) te vinden met de Matlab-function `fzero.m` (evt. `help fzero`). Speel met verschillende startwaarden (start ook eens 'zeer dicht' bij de wortel(s)) .

Verklaring. Om één of andere reden kan Matlab het nulpunt x_2 niet vinden! Op dit moment is het onduidelijk waarom. We zullen dus de eigenschappen van numerieke methoden moeten gaan onderzoeken om in te kunnen zien welke criteria van belang zijn.

2.3 De halveringsmethode

Als een expliciete uitdrukking voor een nulpunt α niet bestaat, zou je kunnen zoeken naar een interval, waar de functie in beide eindpunten een tegengesteld teken heeft!

Idee. We kunnen in dit geval gebruik maken van de tussenwaardestelling. Door twee x-waarden x_0 en x_1 te kiezen waarvoor $f(x_0)f(x_1) < 0$, weten we dan dat er in ieder geval één punt $\alpha \in [x_0, x_1]$ moet zijn waarvoor $f(\alpha) = 0$! Op basis van deze gedachte zouden we een iteratieve methode kunnen uitwerken die ons een benadering van een nulpunt van f oplevert.

Vraag 3A. Is het mogelijk met dit idee een algoritme te verzinnen dat convergeert naar een α met $f(\alpha) = 0$?

Experiment. Pas de file `halverng.m` toe op vergelijking (1.2). Kijk ook eens in de file en probeer er achter te komen hoe deze methode werkt.

Verklaring. Deze techniek heet de **halveringsmethode** (of **bisectie**) en convergeert naar de wortel van (1.2).

Opgave 3B. *Beschrijf het algoritme in een zogenaamd 'stroomdiagram', m.a.w. geef een schets van het algoritme in de vorm van een schema of diagram (kijk ook eens in de Matlab-file).*

Vraag 3C. Hoe 'snel' convergeert de halveringsmethode?

Experiment. Herhaal het vorige experiment, maar let nu op het aantal iteraties dat nodig is bij een voorgeschreven 'nauwkeurigheid' (of 'tolerantie').

Verklaring. Bij iedere iteratieslag kom je, door het halveren van het interval, hooguit 2 keer zo dicht bij de exacte oplossing.

Opgave 3D. *Controleer dat*

$$|x_{i+1} - x_i| = \frac{1}{2}|x_i - x_{i-1}| \tag{3.1}$$

en dus dat de onbetrouwbaarheid in slag i voldoet aan:

$$|x_{i+1} - \alpha| \leq |x_{i+1} - x_i| = \frac{|x_1 - x_0|}{2^i}, \quad \text{voor} \quad i \geq 1. \tag{3.2}$$

D.w.z. de onbetrouwbaarheid wordt per iteratieslag gehalveerd. Vanwege deze eigenschap wordt de halveringsmethode een (gedomineerd) lineair convergent proces genoemd.

Vraag 3E. Aangezien vergelijking (1.3) bijzonder veel op (1.2) lijkt qua moeilijkheidsgraad, zou je ongeveer hetzelfde gedrag van de halveringsmethode verwachten. We gaan proberen het nulpunt $\alpha = 1$ te vinden.

Experiment. Gebruik `halverng.m`. Probeer, indien nodig, meerdere startwaarden (kies als default 'precisie' 0.001 om de verschillende methoden later goed met elkaar te kunnen vergelijken).

Verklaring. De halveringsmethode kan het 'dubbele' nulpunt $\alpha = 1$ niet detecteren, en convergeert dus, of helemaal niet, of naar het andere nulpunt $\alpha = -2$.

We zien dus dat deze methode niet altijd het gewenste resultaat oplevert. Bovendien is de convergentie 'slechts' lineair. Verder is het niet duidelijk hoe we dit principe zouden moeten uitbreiden naar stelsels van niet-lineaire vergelijkingen. Redenen genoeg om wellicht een andere weg in te slaan...

2.4 De methode van successieve substitutie

Idee. We kunnen vergelijking (1.1) herschrijven naar de vorm

$$x = \phi(x) \tag{4.1}$$

om vervolgens via, bijvoorbeeld, het iteratieve proces

$$x_{i+1} = \phi(x_i) \tag{4.2}$$

en een gekozen startwaarde x_0 een nulpunt van f proberen te vinden. Dit principe heeft de naam methode van successieve substitutie en is gebaseerd op de zogenaamde 'vaste-punt-theorie' (vaste punten van ϕ, d.w.z. oplossingen van (4.1), komen dan overeen met wortels van (1.1)). Het moge intuitief al duidelijk zijn, dat niet iedere keuze van ϕ tot een goed resultaat hoeft te leiden, ook al zijn oplossingen van (1.1) per definitie wel vaste punten van $\phi(x)$.

Opgave 4A. *Laat met een simpel voorbeeldje zien dat* $f(x) = 0$ *altijd te herschrijven is naar* $x = \phi(x)$.

Vraag 4B. Laten we eerst eens bekijken hoe een dergelijk proces werkt op het eerste testprobleem (1.2). Convergeert het, en zo ja, hoe snel, en naar welke wortel?

Opgave 4C. *Check eerst dat de functie* $\phi_1(x) = \frac{4}{x^2+3}$ *een kandidaat is voor de functie* ϕ *uit* (4.1).

Experiment. Gebruik de file `xisphix.m` met bijbehorende file `phi.m` (hierin kan de functie $\phi(x)$ desgewenst aangepast worden). Doe enkele experimenten met verschillende startwaarden. 'Meet' ook de convergentiesnelheid; d.w.z. welke (gehele) $p > 0$ voldoet (ongeveer) aan $(x_{i+1} - \alpha)/(x_i - \alpha)^p \approx$ constant? ($\hookrightarrow$ maak zelf een tabelletje bij enkele runs voor een paar voordehand liggende waarden van p; probeer $p = 1$ en $p = 2$ bijv.)? Hoe wordt de 'precisie' hier gemeten? Heb je hiervoor andere (betere?) suggesties?

Verklaring. De functie ϕ_1 heeft blijkbaar zodanige eigenschappen dat er voor iedere startwaarde convergentie optreedt. Overigens is de convergentie lineair (d.w.z. $p = 1$): de convergentieorde is één (vergelijk met de halveringsmethode; wat is het subtiele verschil?).

Opgave 4D. *Laat zien dat de fout voldoet aan de volgende formule:*

$$x_{i+1} - \alpha = \phi'(\xi_i)(x_i - \alpha) \approx \phi'(\alpha)(x_i - \alpha) \quad \text{voor } i \text{ 'ver genoeg' (d.w.z. bij convergentie)}$$

voor zekere $\xi_i \in [\alpha, x_i]$. *We zien dus dat de afgeleide van* ϕ, *en i.h.b. de waarde ervan in* α, *een cruciale rol speelt in dit iteratieve proces. Check dat in de bovenstaande situatie de* ϕ' *in absolute waarde altijd kleiner is dan* $\frac{1}{2} < 1$. *Dus?*

Misschien hebben we geluk gehad met deze keuze van ϕ. We hadden net zo goed, zonder voorkennis, een andere functie kunnen kiezen!

Opgave 4E. *Laat zien dat vaste punten van de volgende functies ook nulpunten van* f *uit* (1.2) *zijn:*

$$\phi_2(x) = \frac{4 - x^3}{3},$$

$$\phi_3(x) = \frac{4 - 3x}{x^2},$$

$$\phi_4(x) = x^3 + 4x - 4,$$

$$\phi_5(x) = (4 - 3x)^{1/3},$$

$$\phi_6(x) = \frac{2x^3 + 4}{3x^2 + 3}.$$

Echter, niet alle keuzes zullen even 'goed' blijken te zijn (zie verderop voor een verklaring)!

Vraag 4F. Een 'snellere' convergentie, m.a.w. een hogere waarde van p, heeft het effect dat de fout $x_i - \alpha$ sneller klein wordt, en dus dat we eerder een goede benadering van het nulpunt hebben. Welke functie uit dit rijtje moeten we nemen om (snellere) convergentie te verkrijgen?

Experiment. Doe enkele experimenten met al deze functies om het nulpunt van (1.2) zo snel en nauwkeurig mogelijk te benaderen (pas hiertoe, per geval, de file `phi.m` aan). Kies een functie $\phi(x)$ en een 'tolerantie' en experimenteer met een paar verschillende startwaarden x_0. Ga pas daarna naar de volgende $\phi(x)$. Noteer onderweg alle bijzonderheden die je tegenkomt (convergentie, divergentie, snelheid van convergentie, afhankelijkheid van startwaarde x_0, etcetera).

Verklaring. De afgeleide van ϕ (en speciaal de waarde $\phi'(\alpha)$) is de overheersende factor in alle experimenten. Deze grootheid kan de numerieke resultaten verpesten ('langzamere' convergentie of zelfs divergentie), maar ook aanzienlijk verbeteren ('snellere' convergentie)!

Opgave 4G.

a. *Bereken $\phi'(x)$ en i.h.b. $\phi'(\alpha)$ voor alle gebruikte functies ϕ_j, $j = 1, \ldots, 6$. Wat voor gevolgen heeft dit voor de 'convergentie-snelheid? Teken ook in een $(x, \phi(x))$-diagram het iteratie proces voor minstens twee ϕ_j's.*

b. *Laat zien dat, als $|\phi'(\alpha)| > 1$, er <u>nooit</u> convergentie naar α kan optreden (toevalstreffers uitgesloten).*

Uit het voorafgaande experiment concluderen we dat er keuzes voor ϕ mogelijk zijn, waarvoor de convergentiesnelheid veel groter is dan misschien verwacht!

Vraag 4H. Is dit toeval of zit er een structuur in? Oftewel, kunnen we een dergelijke ϕ ook construeren voor het algemene geval (1.1)?

Opgave 4I. *Ontwikkel een aantal termen van een Taylorreeks voor de functie $\phi(x)$ in x_i rond het nulpunt α. Laat vervolgens zien dat voor de keuze $\phi(x) = x - f(x)/f'(x)$ met $f'(\alpha) \neq 0$ (welke ϕ_j uit het voorbeeld voldoet hieraan?) geldt: $\phi'(\alpha) = 0$ en dus:*

$$x_{i+1} - \alpha = \frac{\phi''(\xi_i)}{2}(x_i - \alpha)^2. \tag{4.3}$$

Geef een uitdrukking voor $\phi''(\xi_i)$ in termen van f. De fout voor de onderliggende iteratiemethode neemt dan, in principe (wanneer misschien niet bijvoorbeeld?), <u>**kwadratisch**</u> *af per iteratieslag. Een nadere analyse van deze speciale methode is dan ook gewenst.*

Opgave 4J. *Stel dat de iteratieve methode $x_{i+1} = \phi(x_i)$ lineair convergeert naar een oplossing α. Laat zien dat de iteratie*

$$x_{i+1} = \Phi(x_i), \qquad \text{met} \;\; \Phi(x) := \frac{x\ \phi(\phi(x)) - [\phi(x)]^2}{\phi(\phi(x)) - 2\phi(x) + x}$$

dan kwadratisch convergeert naar α.

2.5 Newton-Raphson

De methode van <u>**Newton**</u>–<u>**Raphson**</u> (NR) voor (1.1) wordt gegeven door de iteratie (zie de voorlaatste opgave van het vorige hoofdstuk):

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)}, \quad i \geq 0, \qquad x_0 \text{ te kiezen.} \tag{5.1}$$

Vraag 5A. Uit (4.3) kunnen we afleiden dat NR alleen kwadratisch convergeert voor $i \to \infty$, indien $f'(\alpha) \neq 0$. Kunnen we NR ook op een andere manier (dus niet in termen van een functie ϕ), bijvoorbeeld grafisch, interpreteren? Het gebruik van de afgeleide van f suggereert een relatie met de raaklijn in verschillende x-waarden.

Experiment. Gebruik de file `newton.m` voor een zelfgekozen f (bijv. $\sin^2(\pi x)$ met $x_0 \in (0, 1/4)$ en een precisie van 10^{-4}; zie de files `f.m` en `facc.m`) om enkele iteratieslagen van NR te zien. Desgewenst kan m.b.v. `graffun.m` en `graffacc.m` de grafiek van $f(x)$, respectievelijk $f'(x)$, getekend worden.

Verklaring. In iedere iteratieslag maakt Newton-Raphson gebruik van de raaklijn aan de grafiek van f in de oude x-waarde om het volgende iteratiepunt te bereiken.

Opgave 5B. *Laat zien dat, om van x_0 naar x_1 te komen, we de raaklijn in x_0 kunnen nemen, en dat vervolgens het nulpunt van deze lineaire functie gelijk is aan de x_1 uit NR. Door vervolgens verder te gaan met x_1 als nieuwe 'startwaarde' en het proces te herhalen krijgen we het iteratieve proces horend bij NR. Ga dit na.*

Vraag 5C. In praktische situaties kennen we het nulpunt α natuurlijk niet, maar zou het toch prettig zijn om te weten hoever we ongeveer van α af zitten tijdens het proces. Zouden we, zonder het nulpunt α te kennen, een schatting kunnen geven van de onderweg gemaakte fout? We hebben immers al in een eerdere opgave gezien dat voor NR geldt:

$$\frac{x_{i+1} - \alpha}{(x_i - \alpha)^2} \approx \frac{f''(\alpha)}{2f'(\alpha)} \equiv C \qquad \text{voor } i \text{ groot genoeg}$$

Derhalve zouden we de constante C kunnen schatten met $\frac{f''(x_{i+1})}{2f'(x_{i+1})} \approx \frac{f''(\alpha)}{2f'(\alpha)}$ en via

$$x_{i+1} - \alpha \quad (= \text{de fout in slag } i+1) \approx C\ (x_i - \alpha)^2 \approx C\ (x_i - x_{i+1})^2, \tag{5.2}$$

waarbij x_i en x_{i+1} berekend zijn met NR, een indruk kunnen krijgen van de fout.

Experiment. Doe enkele experimenten met `newton.m` toegepast op (1.2). Vergelijk de geschatte fout uit formule (5.2) met de werkelijke fout $x_{i+1} - \alpha$; NB. de functie $f''/(2f')$ staat in de functionfile `f2f.m`.

Verklaring. De boven gegeven schatting voor de fout in NR geldt inderdaad (voor i groot genoeg); let wel: voor <u>deze</u> vergelijking met $f'(\alpha) \neq 0$.

Vraag 5D. In het NR-proces komt de afgeleide van f in de noemer voor. Wat gebeurt er als $f'(\alpha) = 0$ (immers, teller en noemer zijn dan beide gelijk aan nul; en tijdens de berekeningen kan derhalve $f'(x_i) \approx f'(\alpha)$ voor i groot genoeg, en dus delen we dan door een zeer klein getal...)? Hebben we dan nog steeds convergentie, laat staan kwadratische convergentie?

Experiment. Pas `newton.m` toe op vergelijking (1.3) en probeer het nulpunt $\alpha = 1$ (met $f'(1) = 0$) te benaderen. Noteer per iteratieslag de grootheid $(x_{i+1} - \alpha)/(x_i - \alpha)^p$ voor $p = 1$ en $p = 2$.

Verklaring. Voor $f'(\alpha) = 0$ wordt NR een lineair convergent proces...!

Opgave 5E. *Laat zien dat voor het geval $f(\alpha) = f'(\alpha) = 0$, $f''(\alpha) \neq 0$ geldt:*

$$\lim_{i \to \infty} \frac{x_{i+1} - \alpha}{x_i - \alpha} = \frac{1}{2}. \tag{5.3}$$

Vraag 5F. Zou in speciale situaties het NR-proces i.p.v. een langzamere (lineaire) juist een nog snellere (sneller dan kwadratische) convergentie kunnen opleveren?

Experiment. Pas `newton.m` toe op $f(x) = \tan(x-1) = 0$ en onderzoek het gedrag van de fout in de buurt van $\alpha = 1$. Is het proces nu lineair of kwadratisch convergent? Plot deze functie en probeer er achter te komen wat er rond $x = 1$ aan de hand is.

Verklaring. In $x = 1$ heeft deze speciale f een buigpunt, terwijl de eerste afgeleide daar niet gelijk aan nul is. Deze eigenschap versnelt het NR-proces blijkbaar.

Opgave 5G. *Laat zien dat geldt: als $f(\alpha) = f''(\alpha) = 0$ en $f'(\alpha) \neq 0$, dan convergeert Newton-Raphson minstens* **kubisch** *($\Longrightarrow$ convergentie-orde 3) naar het nulpunt α.*
(hint: werk o.a. $\phi''(\alpha)$ en $\phi'''(\alpha)$ uit voor $\phi(x) \equiv x - f(x)/f'(x)$.)

Vraag 5H. In de vorige experimenten hebben we de invloed van eigenschappen van de functie f zelf op het convergentie-gedrag van NR onderzocht, wanneer we dicht genoeg bij het nulpunt α zitten. Maar, hoe komen we dichtbij het nulpunt zonder kennis vooraf? Oftewel, welke invloed heeft de startwaarde x_0 op het iteratieproces?

Opgave 5I. *Onderzoek de functie f uit* (1.4) *en ga na wat de invloed is van de parameter B op de 'vorm' van de grafiek van f en dus op NR (denk aan het raaklijnen-verhaal uit een eerdere opgave).*

Experiment. Gebruik `newton.m` om het nulpunt van (1.4) te vinden voor verschillende startwaarden (dichtbij α, ver weg van α en probeer ook eens $x_0 = 0$). Doe dit voor enkele waarden van B (bijv. $B = 1, 5, 10, 25, 50$).

Verklaring. Numerieke methoden voor het berekenen van nulpunten zijn i.h.a. zeer gevoelig voor de keuze van de startwaarde.

Opgave 5J. *Laat zien dat voor NR geldt: als $f(\alpha) = 0$ voor $f \in \mathcal{C}^2$, $f(x) \neq 0$ en $f''(x)f(x) \geq 0 \quad \forall x \in (\alpha, b]$, dan convergeert NR monotoon naar α* voor iedere startwaarde $x_0 \in (\alpha, b]$. (NB. dit resultaat geldt natuurlijk voor een interval $[a, \alpha)$ 'links' van het nulpunt)

Opgave 5K. *Er kan bewezen worden dat voor het vinden van het nulpunt $\alpha = 0$ van de functie $f(x) = \arctan(x)$ ($x \in \mathbb{R}$) m.b.v. NR het geen zin heeft om startwaarden te kiezen die voldoen aan de ongelijkheid*

$$\arctan(|x_0|) > \frac{2|x_0|}{1 + x_0^2}.$$

Vind een concrete startwaarde x_0 die hieraan voldoet en bewijs dat in dat geval de NR-rij $(x_i)_{i \geq 0}$ divergeert, en i.h.b. $\lim_{i\to\infty} |x_i| = \infty$.

Opgave 5L. *Beschouw de vergelijking* $\quad x^2 \ln x = a$.
Maak eerst een grafiek van $\quad g(x) = x^2 \ln x, \quad$ *op het interval* $(0, 2)$.

a. *Toon aan, dat voor iedere $a \geq 0$ de vergelijking precies één positieve oplossing, zeg $\alpha(a)$, heeft, en voor $a \in (-1/(2e), 0)$ de vergelijking twee oplossingen heeft, zeg $\beta(a) \leq \alpha(a)$.*

b. *Toon aan, dat voor $a > 0$, $1 < \alpha(a) < 1 + a$ terwijl het NR-proces, toegepast op $g - a$ gestart in $x_0 = 1$, op de eerste stap na, monotoon naar $\alpha(a)$ convergeert en wel kwadratisch.*

c. *Wat kun je zeggen wat betreft convergentie en monotonie van de NR-iteranden, als $a \in (-\frac{1}{2e}, 0)$ en $x_0 = 1$?*

d. *Zij nu $a = -\frac{1}{2e}$. Hoe is het convergentie gedrag van NR gestart in $x_0 = 1$?*

e. *Waar moet NR gestart worden, opdat gegarandeerd monotone convergentie naar $\beta(a)$ optreedt, als $a \in [-\frac{1}{2e}, 0) \setminus \{-\frac{3}{2e^3}\}$? Toon de juistheid van je bewering aan.*

f. *Laat nu* $a = -\frac{3}{2e^3}$. *Dan is* $\beta(a) = e^{-3/2}$ *en* $g''(\beta(a)) = 0$. *Op een onmiddellijke omgeving van* *deze* *wortel geldt nu* $ff'' < 0$, *met* $f(x) = g(x) - a$. *Laat zien, dat er van monotone convergentie bij het NR-proces geen sprake kan zijn, wel van alterneren om de wortel, op den duur. Zie dit ook grafisch in.*

Opgave 5M. *Generaliseer één van de argumenten die tot NR hebben geleid zodanig, dat dit de kubisch convergente methode*

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)} - \frac{1}{2}\frac{[f(x_i)]^2 f''(x_i)}{[f'(x_i)]^3}$$

oplevert.

Opgave 5N. *Stel dat de functie* $f(x)$ *een nulpunt* α *heeft met multipliciteit* q, *i.e.,*

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

We hebben eerder gezien dat NR hiermee zijn kwadratische convergentie zou kunnen verliezen. Echter, beschouw het geval $q = 2$. *Laat zien dat de volgende, ietwat aangepaste, versie van NR toch kwadratisch convergeert naar* α:

$$x_{i+1} = x_i - \frac{2f(x_i)}{f'(x_i)}.$$

(extra: je kunt eventueel algemener laten zien dat voor een wortel met multipliciteit q *geldt dat de iteratie* $x_{i+1} = x_i - \frac{qf(x_i)}{f'(x_i)}$ *kwadratisch naar* α *convergeert.)*

Vraag 5O. Zou het mogelijk zijn om een methode te bedenken waarbij we de afgeleide f' niet nodig hebben en toch de voordelen van NR, zoals het meer dan lineair convergente karakter van het proces, gedeeltelijk kunnen behouden?

2.6 Koorden-Newton

Idee. Om de laatste vraag te beantwoorden zouden we bijvoorbeeld de afgeleide $f'(x_i)$ in NR kunnen benaderen door een differentiequotiënt.

Opgave 6A. *Laat m.b.v. Taylorontwikkelingen zien dat*

$$f'(x_i) = \frac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{x_i - x_{i-1}} + E. \tag{6.1}$$

Bepaal dus ook de foutterm E.

Vraag 6B. Indien we $f'(x_i)$ in NR vervangen door $(f(x_i)-f(x_{i-1}))/(x_i-x_{i-1})$ krijgen we de zogenaamde **Koorden**–**Newton** methode (KN). Wat gebeurt er met het i.h.a. kwadratisch convergente karakter van de methode? Treedt er dan nog wel convergentie op naar het nulpunt?

Experiment. Probeer met de file `koordnwt.m` toegepast op (1.2) de convergentie-orde p te schatten in $(x_{i+1}-\alpha)/(x_i-\alpha)^p$. Merk op dat we nu 2 startwaarden x_0 en x_1 nodig hebben!

Verklaring. De methode KN verliest het kwadratisch convergente karakter van NR door de extra benadering die we maken, maar is nog steeds 'sneller dan' lineair convergent!

Opgave 6C. *Verklaar de naam Koorden-Newton met een plaatje.*
NB. de orde van convergentie van KN blijkt $\frac{1}{2}(1+\sqrt{5})$ *te zijn. Voor een bewijs m.b.v. Fibonacci-getallen verwijzen we naar de literatuur (zie referenties achterin).*

2.7 Toepassingen

Onderstaande 'praktijkproblemen' gaan we met numerieke methoden oplossen. Bij iedere opdracht is het niet alleen de bedoeling dat er simpelweg de oplossing van het probleem wordt bepaald, maar ook dat er enig inzicht wordt getoond o.a. in het gedrag van de fout, de convergentiesnelheid van de gebruikte methode, en, indien mogelijk, een vergelijking met een andere methode in termen van 'kosten' (hoeveel goedkoper of duurder?) en 'efficiëntie' (hoeveel sneller of langzamer?).

Opdracht 7A. Bereken de oplossing van het beschreven model uit Voorbeeld1G m.b.v. Koorden-Newton of Newton-Raphson.

Opdracht 7B. Bepaal de diepte van het water in de pijp uit Voorbeeld1I. Kies zelf een 'geschikte' methode.

Opdracht 7C. Bereken voor een aantal zelfgekozen waarden van V_0 en d de benodigde hoek om d te bereiken (zie Voorbeeld1H). Houd hierbij rekening met het feit dat niet iedere combinatie een (unieke) oplossing heeft!

Opdracht 7D. Bedenk zelf een functie ϕ voor de methode van successieve substitutie om het probleem uit Voorbeeld1J op te lossen (en los het probleem ook daadwerkelijk op).

Opdracht 7E. Gebruik Newton-Raphson voor het bepalen van de geboortefactor uit Voorbeeld1K met de aldaar gegeven parameters.

Opdracht 7F. Gegeven is de matrix

$$A = \begin{pmatrix} 10 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & 2 \\ 0 & 2 & 3 \end{pmatrix}$$

Benader met Newton-Raphson de eigenwaarde λ_1 van A die op het interval $[9, 11]$ ligt (tot op 3 correcte decimalen).
Bepaal daarna, *zonder NR te gebruiken*, ook de twee overige eigenwaarden λ_2 en λ_3 van A (hint: gebruik eigenschappen van het spoor, $\mathrm{sp}(A)$, en de determinant, $\det(A)$, in relatie tot de eigenwaarden).
Controleer je antwoorden met die van Matlab, maar dan berekend met de Matlab-function `eig.m` (evt. `help eig`).

2.8 Extra opgaven

Opdracht 8A. In de 'prehistorie' van het computertijdperk konden computers alleen maar optellen, aftrekken en vermenigvuldigen. Voor een deling als $\frac{1}{a}$ moest men gebruik maken van een iteratieve methode. Pas nu NR toe om een iteratie te construeren voor het berekenen van $\frac{1}{a}$, $a \neq 0$, *zonder* een deling te gebruiken. Voor welke startwaarden x_0 convergeert deze methode?

Opdracht 8B. Pas eenzelfde 'truc' als in de vorige opgave toe voor het berekenen van $y = \frac{1}{\sqrt{a}}$, $a > 0$, zonder dat gebruik wordt gemaakt van de bewerking $\sqrt{\ }$ en delingen.

Opdracht 8C. Tracht met Newton-Raphson een nulpunt te vinden van de functie $f(x) = c\ \mathrm{sign}(x)\ \sqrt{|x|}$. Wat is hier aan de hand?

Opdracht 8D. Het Gerlach-schema voor het benaderen van $\sqrt{A}$, $\quad A > 0$, is gegeven door

$$x_{i+1} = x_i - \frac{(x_i^2 - A)(3x_i^2 + A)(3x_i^6 + 27Ax_i^4 + 33A^2x_i^2 + A^3)}{2x_i(x_i^4 + 10Ax_i^2 + 5A^2)(5x_i^4 + 10Ax_i^2 + A^2)}, \quad i \geq 0$$

met startwaarde $x_0 = \frac{A}{2}$. Welke orde van convergentie heeft deze methode? (schrijf een Matlab-file `gerlach.m`, en test de methode voor enkele waarden van A; hoeveel extra correcte cijfers zie je na elke iteratieslag?)

Opdracht 8E. Het vinden van een juiste startwaarde voor Newton-Raphson is i.h.a. niet gemakkelijk. Stel we willen met NR een nulpunt vinden voor een 'ingewikkelde' functie $h(x)$, en we weten de oplossing, noem deze alvast x_0, van een 'simpeler' probleem $g(x) = 0$. De methode van Davidenko maakt handig gebruikt van deze kennis door het volgende model te beschouwen

$$(1 - \vartheta)\ g(x) + \vartheta\ h(x) = 0,$$

met een (continuerings-)parameter $\vartheta \in [0, 1]$. Voor $\vartheta = 0$, respectievelijk $\vartheta = 1$, zien we de afzonderlijke vergelijkingen $g(x) = 0$ en $f(x) = 0$ terug. Het algoritme van de methode van Davidenko luidt dan: start met $\vartheta = 0$, dit geeft x_0 als oplossing. Deel nu het interval $\vartheta = [0, 1]$ op in m stukken ter grootte $\Delta\vartheta = 1/m$. Bepaal met NR het nulpunt van $\Delta\vartheta h(x) + (1 - \Delta\vartheta)g(x) = 0$ met startwaarde x_0. Dit levert $x^{(1)}$. Ga verder met $\vartheta = 2\Delta\vartheta$, pas NR toe met startwaarde $x^{(1)}$, etcetera t/m $\vartheta = m\Delta\vartheta = 1$ met startwaarde $x^{(m-1)}$. Uiteindelijk geeft dit een benadering $x^{(m)}$ voor het probleem $h(x) = 0$.
Implementeer deze methode in Matlab (noem de file `davidenko.m`) en pas deze toe op (1.4), bijvoorbeeld voor $h(x) = f_{100}(x)$ en $g(x) = f_{10}(x)$.

Opdracht 8F. Beschouw voor *complexe* z de vergelijking $f(z) = z^3 - 1$. Deze vergelijking heeft drie oplossingen in het complexe vlak, n.l. $z^{(1)} = 1$, $z^{(2)} = \frac{1}{2}(-1 + i\sqrt{3})$ en $z^{(3)} = \frac{1}{2}(-1 - i\sqrt{3})$. De NR-methode luidt dan $z_{i+1} = z_i - \frac{f(z_i)}{f'(z_i)}$. Kies een startwaarde $z_0 = x + iy$ en laat NR hierop los. Geef, afhankelijk van naar welk van de drie punten de methode convergeert, een kleur aan het startpunt z_0: *rood* $\leftrightarrow z^{(1)}$, *blauw* $\leftrightarrow z^{(2)}$, en *groen* $\leftrightarrow z^{(3)}$. Doe dit voor meerdere startpunten z_0 in het complexe vlak, bijv. voor alle punten $z_0 := (x_m, y_n)_{m=1,\ldots,M}^{n=1,\ldots,N}$ met N en M *niet te klein* gekozen. Uiteindelijk levert de figuur een zogenaamde 'Newton-fractal' op. De opdracht is: schrijf een Matlab-code `newtonc.m` die de NR-iteraties uitvoert voor de gehele set van beginwaarden en die de fractal voor je plot.

Opdracht 8G. Vind alle nulpunten van de functie

$$f(x) = 720x^6 - 1764x^5 + 1624x^4 - 735x^3 + 175x^2 - 21x + 1.$$

2.9 Stelsels van niet-lineaire vergelijkingen

Opdracht 9A. In deze sectie zijn we geïnteresseerd in het oplossen van <u>stelsels</u> van niet-lineaire functies $f_j(x_1, x_2, ..., x_n) = 0$ voor $j = 1, ..., n$. Maak gebruik van de

literatuur uit de bibliotheek om numerieke methoden te beschrijven die dit probleem kunnen oplossen: hoe zou je bijvoorbeeld NR of successieve substitutie op dit soort stelsels toepassen?
Beschouw nu, voor het geval $n = 2$, het stelsel $f_1(x, y) := x^2 - y = 0$, $f_2(x, y) := y^2 - x = 0$. Teken deze situatie in $\mathbb{R}^2$. Welke nulpunten heeft dit stelsel? (hoe zie je dit in je tekening?) Pas NR toe op dit stelsel met een zelf gekozen startwaarde (x_0, y_0). Maak een tabel met benaderingen als functie van de iteratieslag i. Teken de convergentie of divergentie in je 2d-figuur en geef commentaar.

Opdracht 9B. Voor $n = 2$ willen we alle reële nulpunten gaan bepalen van het stelsel

$$f_1(x, y) := 2x^2 - xy - 5x + 1 = 0, \quad f_2(x, y) := x + 3 \ln |x| - y^2 = 0.$$

Maak een schets in $\mathbb{R}^2$ van deze situatie. Hoeveel nulpunten zijn er eigenlijk? Pas nu zowel NR als de methode van successieve substitutie toe op dit stelsel. Gebruik in dat laatste geval, bijvoorbeeld

$$x = \phi_1(x, y) := \sqrt{\frac{x(y + 5) - 1}{2}}, \quad y = \phi_2(x, y) := \sqrt{x + 3 \ln |x|}.$$

Kies zelf geschikte startwaarden om dit probleem op te lossen. Beschrijf je numerieke testwerk en trek conclusies.

Opdracht 9C. Benader met NR de nulpunten van de volgende stelsels (teken bovendien in een figuur de nul-contourlijnen van f_1 en f_2, d.w.z. de krommen $f_1 = 0$ en $f_2 = 0$):

1. $f_1(x, y) := \sin(x - y) = 0, \quad f_2(x, y) := \cos(x + y) = 0$

2. $f_1(x, y) := \frac{\sin(\sqrt{2x^2+y^2})}{\sqrt{x^2+2y^2}} = 0, \quad f_2(x, y) := \ln(\frac{x^2+y^4}{8}) = 0.$

Opdracht 9D. Bekijk het stelsel $y + x^{10}y^3 = 1 - x, \quad ye^y = x + x^3$.

1. Laat zien dat er een unieke oplossing bestaat in $(x, y) \in [0, 1]^2$.

2. Benader de oplossing numeriek met NR.

Opdracht 9E. Bepaal met NR de snijpunten van de cirkel $x^2 + y^2 - 1 = 0$ en de parabool $x^2 - y = 0$.

Opdracht 9F. Beschouw de ellips met excentriciteit 0.5 gegeven door de vergelijking

$$x^2 + 4y^2/3 = 1.$$

We willen in deze opgave onderzoeken of een cirkel met hetzelfde middelpunt en dezelfde oppervlakte snijpunten heeft met de ellips. Laat eerst zien dat mogelijke snijpunten moeten voldoen aan het niet-lineaire stelsel

$$3x^2 + 4y^2 - 3 = 0, \quad x^2 + y^2 - \frac{\sqrt{3}}{2} = 0.$$

Bepaal met NR de potentiele snijpunten van deze twee krommen.

Opdracht 9G. Bepaal met de methode van successieve substitutie een nulpunt van het stelsel $f_1(x, y) := x^3 + 10x - y - 5 = 0, \quad f_2(x, y) := x + y^3 - 10y + 1 = 0.$

Opdracht 9H. Het niet-lineaire systeem

$$x^2 + y^2 - 4 = 0, \quad e^x + y - 1 = 0$$

heeft twee reële oplossingen. Teken beide krommen en noteer bij benadering de ligging van de oplossingen. Pas NR toe achtereenvolgens startend met de beginwaarden $(1, 1)$, $(1, -1)$ en $(0, 0)$ en onderzoek de convergentie van de iteratie (gebruik in Matlab `format long`).

Opdracht 9I. Construeer zelf (**!**) een stelsel van 3 niet-lineaire vergelijkingen met 3 onbekenden (x, y, z) (d.w.z. $n = 3$), waarvan je de exacte oplossing (x^*, y^*, z^*) kent. Pas NR toe om dat nulpunt numeriek te bepalen. Hoe zou je NR voor $n \gg 1$ in de praktijk toepassen? Leg uit wat in dat geval de extra (numerieke) complicaties zijn, t.o.v. kleinere waarden van n (denk hierbij aan de behandeling van de inverse van de Jacobiaan van de vectorfunctie $\vec{f}$ die voorkomt in NR).

2.10 Samenvatting

2.10.1 De halveringsmethode

• De halveringsmethode, ook wel bisectiemethode genoemd, is gebaseerd op de tussenwaardestelling:

Stelling 2.10.1 *Als $f(x)$ een continue functie is op het interval $[a, b]$ en $f(a) \neq f(b)$, dan geldt voor elk getal y tussen $f(a)$ en $f(b)$, dat er een getal x bestaat met $x \in [a, b]$ waarvoor $f(x) = y$ (lees in ons geval: $y = 0$).*

Zoek eerst een interval $[a, b]$ waarvoor $f(a)$ en $f(b)$ tegengesteld teken hebben. Neem het middelpunt m van $[a, b]$ en controleer of $f(m)$ hetzelfde teken heeft als $f(a)$ of $f(b)$. In het eerste geval ga je verder met het gehalveerde interval $[m, b]$, in het tweede met $[a, m]$. Hierna neem je het middelpunt van het volgende (kleinere) interval en je herhaalt bovenstaande procedure. Dit levert je het bisectie-algoritme op voor het bepalen van nulpunten.
Noem de startwaarden x_0 en x_1. Het voordeel van deze methode is dat, indien $f(x_0)f(x_1) < 0$, er altijd convergentie naar een nulpunt van f plaatsvindt. De vraag is alleen, in het geval van meerdere nulpunten, welk nulpunt uiteindelijk berekend wordt…
Verder hoeft 'de fout' niet monotoon naar nul te gaan. Oftewel, zonder stopcriterium zou bijv. iteratieslag 12 een betere benadering kunnen geven dan iteratieslag 14! De methode convergeert 'lineair' naar een nulpunt van f. Het is helaas niet mogelijk om de halveringsmethode uit te breiden naar stelsels van niet-lineaire vergelijkingen.

2.10.2 De methode van successieve substitutie

Een andere techniek is gebaseerd op het volgende principe:
Herschrijf $f(x) = 0$ naar $x = \phi(x)$ (dit is altijd mogelijk; vaak bestaan er zelfs meerdere mogelijkheden!). Oplossingen van $x = \phi(x)$ worden 'vaste punten' van de functie ϕ genoemd. Een iteratieve methode voor het bepalen van een vast punt van ϕ, en dus een nulpunt van f, wordt gegeven door

$$x_{i+1} = \phi(x_i), \quad i = 0, 1, \ldots \qquad x_0 \text{ te kiezen.} \tag{10.1}$$

Het is mogelijk om enkele nuttige lemma's en stellingen over deze methode te formuleren:

Lemma 2.10.2 *Als $\phi(x)$ continu is op $[a,b]$ en $\phi(x) \in [a,b]$ voor $x \in [a,b]$, dan heeft de vergelijking $x = \phi(x)$ minstens één oplossing $\alpha \in [a,b]$.*

Bewijs. m.b.v. de tussenwaardestelling. □

Lemma 2.10.3 *Als $\phi(x)$ continu is op $[a,b]$ en $\phi(x) \in [a,b]$ voor $x \in [a,b]$, en er bestaat een constante k*

$$0 < k < 1 \quad \textit{met} \quad |\phi(x) - \phi(y)| \leq k\,|x - y| \quad \forall x, y \in [a,b],$$

dan heeft de vergelijking $x = \phi(x)$ precies één oplossing $\alpha \in [a,b]$ en de rij $x_{i+1} = \phi(x_i)$ $(i \geq 0)$ convergeert voor iedere startwaarde $x_0 \in [a,b]$ naar α.

Bewijs. Stel dat ook $\beta \neq \alpha$ een oplossing is van $x = \phi(x)$. Er volgt een tegenspraak vanwege:

$$|\alpha - \beta| = |\phi(\alpha) - \phi(\beta)| \leq k|\alpha - \beta|.$$

Convergentie volgt door diezelfde relatie meerdere malen toe te passen (via volledige inductie). □

Lemma 2.10.4 *Als $\phi(x) \in C^1[a,b]$, dan geldt met $K \equiv max_{x\in[a,b]}|\phi'(x)|$ en gebruikmakend van de middelwaardestelling: $|\phi(x) - \phi(y)| \leq K|x - y|, \quad \forall x, y \in [a,b]$. Indien nu deze $K < 1$, dan kunnen de resultaten uit Lemma 2.10.3 toegepast worden.*

Een stelling over 'lokale' convergentie:

Stelling 2.10.5 *Als $\phi'(\alpha)$ bestaat en $|\phi'(\alpha)| < 1$, dan is er een $\delta > 0$ zodanig, dat voor elke startwaarde x_0 met $|x_0 - \alpha| < \delta$, (x_0 "ligt voldoende dicht" bij α) geldt:*

$$\lim_{i\to\infty} x_i = \alpha \quad \textit{en} \quad \lim_{i\to\infty} \frac{x_{i+1} - \alpha}{x_i - \alpha} = \phi'(\alpha).$$

Bewijs. Opgave of zie literatuur. □

Een stelling over 'globale' convergentie:

Stelling 2.10.6 *Als $\phi(x) \in C^1[a,b]$, $\phi(x) \in [a,b]$ voor $x \in [a,b]$ en*

$$K \equiv \max_{x\in[a,b]} |\phi'(x)| < 1,$$

dan geldt:

i) *$x = \phi(x)$ heeft een unieke oplossing $\alpha \in [a,b]$*

ii) *$\forall x_0 \in [a,b]$ convergeert het proces $x_{i+1} = \phi(x_i)$ naar α, d.w.z. $\lim_{i\to\infty} x_i = \alpha$.*

iii) *een afschatting voor de fout: $|x_{i+1} - \alpha| \leq K^i|x_0 - \alpha|$*

iv) $\displaystyle\lim_{i\to\infty} \frac{x_{i+1} - \alpha}{x_i - \alpha} = \phi'(\alpha)$.

NB. Als $\phi'(\alpha) \neq 0$ en $K < 1$, dan noemen we het proces **lineair convergent** en $\phi'(\alpha)$ is de zogenaamde **asymptotische convergentiefactor**.

'Divergentie'. *Als* $|\phi'(\alpha)| > 1$, *dan zal het proces* $x_{i+1} = \phi(x_i)$ *nooit naar de oplossing* α *kunnen convergeren, tenzij* x_i *voor een of andere* i *per ongeluk gelijk is aan* α.

Een stelling over 'snellere' convergentie (van orde p):

Stelling 2.10.7 *Als '*x_0 *voldoende dicht bij* α*' gekozen wordt,* $\phi(x)$ p*-keer continu differentieerbaar is* $\forall x$ *rond* α *(voor zekere* $p \geq 2$*), en er geldt* $\phi'(\alpha) = \phi''(\alpha) = \ldots = \phi^{(p-1)}(\alpha) = 0$ *met* $\phi^{(p)}(\alpha) \neq 0$*, dan heeft het iteratieproces* $x_{i+1} = \phi(x_i) \quad (i \geq 0)$ *orde van convergentie* p *en er geldt:*

$$\lim_{i\to\infty} \frac{x_{i+1} - \alpha}{(x_i - \alpha)^p} = \frac{\phi^{(p)}(\alpha)}{p!}.$$

Voor $p = 1$, $p = 2$, $p = 3$ heet het proces respectievelijk **lineair**, **kwadratisch** en **kubisch** convergent.
De analyse van de methode van successieve substitutie hangt sterk samen met de theorie van 'vaste-punten'. In een vector-vorm kan deze methode ook voor stelsels van niet-lineaire vergelijkingen geformuleerd worden. Bij een 'slimme' keuze van de afbeelding ϕ kan snellere convergentie (zie bovengenoemde stelling) bewerkstelligd worden. *Echter*, het is niet altijd eenvoudig om de 'juiste' ϕ te bepalen.

2.10.3 Newton-Raphson

Voor de speciale keuze $\phi(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)}$ in de methode van successieve substitutie krijgt men de methode van **Newton–Raphson**.
Als $f'(\alpha) \neq 0$ en $f''(\alpha) \neq 0$, dan heeft dit proces convergentie-orde 2 met asymptotische convergentiefactor $\frac{1}{2}\frac{f''(\alpha)}{f'(\alpha)}$.
Een stelling over 'globale' en monotone convergentie van Newton-Raphson:

Stelling 2.10.8 *Als* $f \in C^2$, $f(\alpha) = 0$, $f(x) \neq 0$ *en* $f''(x)f(x) \geq 0 \quad \forall x \in (\alpha, b]$*, dan convergeert Newton-Raphson* monotoon *naar* α *voor iedere startwaarde* $x_0 \in (\alpha, b]$.

NB. een dergelijk resultaat geldt natuurlijk ook voor het interval $[a, \alpha)$.

Speciale situaties: voor $f'(\alpha) = 0$ en $f''(\alpha) \neq 0$ is NR lineair convergent, terwijl voor $f'(\alpha) \neq 0$, $f''(\alpha) = 0$ en $f'''(\alpha) \neq 0$ NR kubisch convergent is.

Deze methode (en varianten ervan) is in de praktijk de meest populaire methode voor het oplossen van (stelsels) niet-lineaire vergelijkingen. Een nadeel is echter het berekenen van f' en de Jacobiaan in het geval van stelsels.

2.10.4 Koorden-Newton

Deze methode is gebaseerd op Newton-Raphson en benadert de daarin voorkomende afgeleide f' alsvolgt:

$$f'(x_i) \approx \frac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{x_i - x_{i-1}}. \tag{10.2}$$

Door deze extra benadering verliest Koorden-Newton het kwadratisch-convergente karakter van Newton-Raphson. De orde van convergentie wordt (afleiding via Fibonacci-getallen, zie literatuur): $p = \frac{1}{2}(1 + \sqrt{5})$, dus nog steeds 'sneller' dan lineair convergent.

Voor deze methode hebben we geen f' nodig tijdens de iteraties, maar wel twee startwaarden. Het is onduidelijk hoe Koorden-Newton moet worden toegepast op stelsels van niet-lineaire vergelijkingen (dit kan slechts voor zeer speciale gevallen). Bovenstaande stelling 2.8 over globale convergentie voor NR geldt ook voor Koorden-Newton.

2.10.5 Slotopmerkingen

Voor alle behandelde methoden geldt: het kiezen van de juiste startwaarde(n) is essentieel voor de convergentie en nauwkeurigheid van het benaderingsproces. Verder speelt het stopcriterium in alle gevallen een belangrijke rol; bij een verkeerde interpretatie van het numerieke resultaat kunnen onjuiste conclusies getrokken worden over de nauwkeurigheid van de oplossing.

Opgave 10A. *(terugkoppeling naar Euler-Backward)*
Beschrijf het toepassen van Newton-Raphson en die van de methode van successieve substitutie op de niet-lineaire DV (1.3) *uit Hoofdstuk I. Bespreek de voor- en nadelen van beide methoden. Wanneer kunnen we beter Euler-Forward gebruiken, i.p.v. Euler-Backward gecombineerd met een nulpuntsmethode?*

Referenties

[1] K.E. Atkinson, *An Introduction to Numerical Analysis*, John Wiley & Sons, Inc., 1978.

[2] G.J. Borse, *Numerical Methods with Matlab, A Resource for Scientists and Engineers*, PWS Publishing Company, Boston, 1997.

[3] R.L. Burden and J.D. Faires, *Numerical Analysis*, PWS-KENT Publishing Company, Boston, 1989.

[4] K. Chen, P. Giblin and A. Irving, *Mathematical Explorations with Matlab*, Cambridge University Press, Cambridge, 2000.

[5] S.D. Conte and C. de Boor, *Elementary Numerical Analysis: An Algorithmic Approach*, McGraw-Hill, New York, 1980.

[6] D.J. Higham and N.J. Higham, *Matlab Guide*, SIAM, Philadelphia, 2000.

[7] E. Isaacson and H.B. Keller, *Analysis of Numerical Methods*, John Wiley & Sons, Inc., 1966.

[8] C.F. van Loan, *Introduction to Scientific Computing, A Matrix-Vector Approach Using Matlab*, Prentice Hall, Inc., 2000.

[9] J.H. Mathews and K.D. Fink, *Numerical Methods Using Matlab*, Pearson Prentice Hall, 2004.

[10] S.S. Rao, *Applied Numerical Methods for Engineers and Scientists*, Prentice Hall, Inc., 2002

[11] L.F. Shampine, R.C. Allen Jr. and S. Pruess, Fundamentals of Numerical Computing, John Wiley & Sons, Inc., 1997.

[12] R.D. Skeel and J.B. Keiper, *Elementary Numerical Computing with Mathematica*, McGraw-Hill, Inc., 1993.

Index