PROF. DR. A. VAN DER SLUIS

UTRECHT. 17 oktober 1991
CICEROLAAN 4
TEL. (030) 51 21 59

Beste Jan,

Ik weet niet meer wanneer we elkaar voor het eerst ontmoet hebben, maar dat moet lang geleden zijn. Een regelmatig contact ontstond echter pas na mijn intrede in het Curatorium, nu zo'n 12 jaar geleden. Het Centrum zetelde toen nog in de Tweede Boerhaavestraat, van Wijngaarden zwaaide er nog de scepter en jij was druk bezig met de nieuwbouw in de Watergraafsmeer. Ik heb sindsdien met waardering gezien hoe je allerlei lastige klussen klaarde toen het Centrum moest uitgroeien tot een toonaangevend instituut op het terrein der informatica en toen het naderhand ook weer moest inkrimpen. Alsof de problematiek op zichzelf niet al moeilijk genoeg was moest je dan ook de OR nog van de noodzaak van de voorziene maatregelen overtuigen. Maar de manier waarop je met al dit soort zaken omging gaf mij de indruk dat je een en ander toch ook wel als een soort sport beschouwde. Evenwel, ook sport kan slopend zijn, en ik kan me dan ook wel voorstellen dat je, nu de mogelijkheid zich daartoe voordeed, deze arena wilt verlaten.
Ter opluistering van dit afscheid bied ik je gaarne bijgaande overwegingen aan over een onderwerp dat je wellicht nog zal doen terugdenken aan je beginjaren bij het Centrum. Er worden in dit stukje wat accenten gelegd waar ik zo in de loop van de jaren bij het onderwijs op gekomen ben, maar die je, voor zo ver ik weet,

niet in de literatuur aantreft. Liever dan het geheel in termen van abstracte theorie in een Banach ruimte setting te gieten heb ik de stijl wat informeel gehouden (zo kom je nogal eens het teken ≈ tegen); een zekere lichtvoetigheid leek mij wel passend voor de gelegenheid en aangenaam voor de lezer (jij dus)

Ik wens je aangename lectuur, maar bovenal een heel goede derde levensfase toe.

Bram

Enkele overwegingen bij de methode van Newton-Raphson

Prof.dr. A. van der Sluis

Aangeboden aan Drs. J. Nuis ter gelegenheid van zijn afscheid van de Stichting Mathematisch Centrum.

1. De methode van Newton-Raphson

De methode van Newton-Raphson om een niet-lineaire vergelijking

(1) $f(x)=0$

op te lossen is het iteratieve proces

(2) $$x_{i+1}=x_i-\frac{f(x_i)}{f'(x_i)}\ ,\quad i=0,1,2,...$$

uitgaande van een gekozen startwaarde x_0.

Onder omstandelijkheden convergeert dit proces heel snel zoals onderstaand voorbeeld 1 aantoont, maar het kan ook wel veel langzamer gaan zoals we in voorbeeld 2 zien. Hierin stelt α, zoals verder steeds in dit stuk, een wortel van de vergelijking (1) voor.

$f(x)$	=	x^3+3x-4
α	=	1
x_0	=	2
x_1	=	1,3333333333333
x_2	=	1,0488888888889
x_3	=	1,0011751554604
x_4	=	1,0000006902246
x_5	=	1,0000000000002
x_6	=	1,0000000000000

Voorbeeld 1

$f(x)$	=	x^3-3x+2
α	=	1
x_0	=	2
x_1	=	1,55556
x_2	=	1,29791
x_3	=	1,15539
x_4	=	1,07956
x_5	=	1,04029
x_6	=	1,02028

Voorbeeld 2

Het snelle convergentiegedrag in voorbeeld 1 is in feite het gebruikelijke gedrag van Newton-Raphson, waaraan ook de methode haar populariteit dankt. Dit gedrag wordt door veel mensen kort samengevat met: bij Newton-Raphson wordt per stap het aantal goede cijfers ongeveer verdubbeld.

Het gedrag in voorbeeld 2 is in zekere zin exceptioneel: bij elke stap wordt de fout slechts ongeveer gehalveerd.

2. Analyse van het snelle convergentiegedrag

De opeenvolgende fouten $x_i - \alpha$ voldoen aan

(3) $$x_{i+1} - \alpha = (x_i - \alpha)^2 \frac{f''(\xi_i)}{2f'(x_i)}, \ \xi_i \text{ tussen } x_i \text{ en } \alpha.$$

Als $f'(\alpha)$ en $f''(\alpha)$ beide $\neq 0$ dan geldt voor x_i in de buurt van α dus

(4) $$x_{i+1} - \alpha \approx A(x_i - \alpha)^2$$

met $A = f''(\alpha)/2f'(\alpha)$. Als nu bijvoorbeeld $A = 1$ en $x_i - \alpha = 10^{-1}$ voor zekere i dan is $x_{i+1} - \alpha \approx 10^{-2}$, $x_{i+2} - \alpha \approx 10^{-4}$, $x_{i+3} - \alpha \approx 10^{-8}$ etc. Er is dus een zeer snelle toename van het aantal goede cijfers. Maar blijkt hier nu uit dat dit aantal per stap verdubbelt?

3. Het aantal goede cijfers

Met het praten over het aantal goede cijfers moet men oppassen. Als de exacte oplossing van een probleem het getal 1 is en men vindt als benadering 0,9999999999999999 dan heeft men geen enkel goed cijfer, maar de benadering is wel erg goed. Als men echter "16 goede cijfers" interpreteert als: "de relatieve fout is 10^{-16}" (wat in de meeste concrete situaties ongeveer op hetzelfde neer komt), dan is er in de gegeven situatie niets aan de hand. Algemener zullen we onder het aantal goede cijfers de (niet noodzakelijk gehele) waarde

(5) $$-{}^{10}\log \epsilon$$

verstaan, waarin ϵ de relatieve fout is.

4. Verdubbeling van het aantal goede cijfers bij Newton-Raphson als $f'(\alpha)$ en $f''(\alpha) \neq 0$?

4.1 We herhalen de vraag (aan het eind van § 2) of het aantal goede cijfers (in de zin van § 3) per stap verdubbelt als we dicht bij α zijn. Zij dus $n_i = -{}^{10}\log\left|\frac{x_i - \alpha}{\alpha}\right|$ het aantal goede cijfers in x_i, voor elke i, dan volgt uit (4)

(6) $$n_{i+1} = -{}^{10}\log\left|\frac{x_{i+1} - \alpha}{\alpha}\right| \approx -{}^{10}\log\left|\alpha A\left(\frac{x_i - \alpha}{\alpha}\right)^2\right|$$

$$= -{}^{10}\log|\alpha A| + 2n_i$$

en inderdaad, in geval van convergentie van het Newton-Raphson proces:

(7) $$\lim_{i \to \infty} \frac{n_{i+1}}{n_i} = 2.$$

Echter, voor het beperkte aantal cijfers waarmee computers werken of waarin we zelf geinteresseerd zijn (zeg 10 à 15) zal die verdubbeling alleen ten naaste bij optreden als ${}^{10}\log|\alpha A|$ niet meer dan 1 of 2 is. In voorbeeld 1 is $\alpha A=\frac{1}{2}$, dus ${}^{10}\log|\alpha A|<0$, zodat men inderdaad, voldoende dicht bij de wortel, elke stap zelfs nog iets beter dan verdubbeling van het aantal goede cijfers mag verwachten. In dit voorbeeld is dit zelfs vanaf het begin het geval (bijv. ${}^{10}\log(x_2-\alpha)/{}^{10}\log(x_1-\alpha)=2.74$).

4.2 We zien echter uit (6) ook nog

$$n_{i+1}-n_i \approx 2(n_i-n_{i-1}). \tag{8}$$

Dit zegt dus dat de *toename van het aantal goede cijfers elke stap verdubbelt* en dit hangt er nu niet meer van of of αA groot is of niet. Dit is dus een veel algemener resultaat, dat toepasbaar is voor elk rangnummer i waarvoor $|x_{i-1}-\alpha|\leqslant\delta$ en $|x_i-\alpha|\leqslant\delta$ als δ zodanig is dat $\frac{f''(\xi)}{f'(x)}\approx\frac{f''(\alpha)}{f'(\alpha)}$ voor $|\xi-\alpha|<|x-\alpha|\leqslant\delta$.

4.3 Nog even terugkerend naar 4.1 vragen we ons af wat de conditie $|\alpha A|\leqslant 1$ (waarbij dus het aantal goede cijfers zelf verdubbelt) voor de functie f betekent. Nemen we eens voor f de kwadratische functie $x\mapsto(x-\alpha)(x-\beta)$, dan is $A=\frac{f''(\alpha)}{2f'(\alpha)}=\frac{1}{\alpha-\beta}$. De conditie $|\alpha A|\leqslant 1$ betekent nu dat β buiten het interval $(0,2\alpha)$ moet liggen. Dus voor een willekeurige functie mogen we in de buurt van de wortel elke stap (minstens) verdubbeling van het aantal goede cijfers verwachten als de functie zich in de buurt van de wortel voldoende gedraagt als een kwadratische functie waarvan de andere wortel buiten het interval $(0,2\alpha)$ ligt.

5. Het gedrag van Newton-Raphson als $f'(\alpha)\neq 0$, $f''(\alpha)=0$

Hierover willen we kort zijn. Wegens $A=0$ zegt formule (4) nu niet zo veel meer. Het is wel duidelijk dat de convergentie nu erg snel gaat. Als $f'(\alpha)\neq 0$, $f''(\alpha)=\ldots=f^{(p-1)}(\alpha)=0$, $f^{(p)}(\alpha)\neq 0$, dan wordt voldoende dicht bij de wortel de toename van het aantal goede cijfers elke stap ver-p-voudigd.

6. Het gedrag van Newton-Raphson als $f'(\alpha)=0$

Nu geldt (4) blijkbaar niet meer en dat nu ook de snelle convergentie verdwenen kan zijn toont voorbeeld 2. Als α een p-voudig nulpunt van f is, d.w.z.

$$f(x)=(x-\alpha)^p g(x),\quad g(\alpha)\neq 0, \tag{9}$$

dan vindt men

$$x_{i+1}-\alpha=(x_i-\alpha)\left[1-\frac{1}{p+(x_i-\alpha)g'(x_i)/g(x_i)}\right], \tag{10}$$

dus voor x_i in de buurt van α

$$\frac{x_{i+1}-\alpha}{x_i-\alpha}\approx 1-\frac{1}{p}. \tag{11}$$

Er gaat dan dus per stap slechts een fractie $\frac{1}{p}$ van de fout af, hetgeen goed correspondeert met voorbeeld 2, waar $p=2$.

Als $f'(\alpha)=0$ convergeert Newton-Raphson dus langzaam. Bijv. voor $p=2$ heeft men 10 iteratieslagen nodig om het aantal goede cijfers met 3 te laten toenemen, en voor $p=3$ zelfs 17 slagen.

7. VERSNELLING VAN NEWTON-RAPHSON ALS $f'(\alpha)=0$.

7.1 Er zijn allerlei pogingen ondernomen om ook in het geval van meervoudige wortels snellere convergentie te krijgen.

Een manier om dit te doen is gebaseerd op de overweging dat (11) impliceert

(12) $$\frac{x_{i+1}-x_i}{x_i-x_{i-1}} \approx 1-\frac{1}{p}.$$

Met behulp hiervan schat men p als het gehele getal waarvoor (12) zo goed mogelijk vervuld is (in het algemeen weet men nl. niet van te voren wat p is).

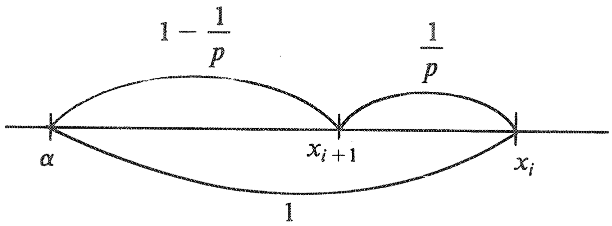

Fig. 1

Met behulp van (11) kan men nu in fig. 1. de verhoudingsgetallen $1-\frac{1}{p}$ en 1 invullen, waaruit dan het verhoudingsgetal $\frac{1}{p}$ volgt, en bijgevolg

(13) $$x_{i+1}-\alpha \approx \frac{1-\frac{1}{p}}{\frac{1}{p}}(x_i-x_{i+1}).$$

Zo vindt men als nieuwe benadering

(14) $$\alpha \approx x_{i+1}-(p-1)(x_i-x_{i+1}).$$

Door nu deze benaderingswaarde opnieuw als x_0 te nemen, en nieuwe x_1, x_2 uit te rekenen, opnieuw p te bepalen en weer m.b.v. (14) een nieuwe benadering voor α te bepalen etc. krijgen we een snel convergent proces.

We merken nog op dat het proces voor $p=1$ gewoon het Newton-Raphson proces is (zie (14)) vanaf het moment dat (12) ook $p=1$ oplevert.

Inmiddels is het proces niet zonder bezwaren, waarop we in § 9.1 terugkomen.

7.2 In zijn artikel "A derivative-free transformation preserving the order of convergence of iteration methods in case of multiple zeros" (Numer. Math. 33, pp. 385-389 (1979)) gaat J.B. Kioustelidis als volgt te werk. Hij merkt eerst op dat als f een meervoudig nulpunt heeft, $g=f/f'$ slechts een enkelvoudig nulpunt heeft, en Newton Raphson toegepast op g dus snel zal convergeren. Deze methode heeft echter het nadeel dat men nu ook f'' moet uitrekenen, zodat men in een op deze methode gebaseerde algemene oplosprocedure subroutines voor f, f' en f'' moet meegeven.

Om dit bezwaar te ondervangen vervangt hij nu in de definitie $g=f/f'$ de noemer door het differentie quotient $\dfrac{f(x+f(x))-f(x)}{f(x)}$, en beschouwt dus

(15) $$h(x)=\frac{f^2(x)}{f(x+f(x))-f(x)}.$$

Klaarblijkelijk heeft h nog steeds α als nulpunt, en Kioustelidis toont aan dat voor $f\in C^{p+1}$ geldt

(16) $$h'(\alpha)=\frac{1}{p},$$

dus α is een enkelvoudig nulpunt van h, en dit geldt ook nog als $p=1$.

Echter ook deze methode is niet zonder bezwaar, zoals we na het volgende intermezzo zullen zien.

8. Intermezzo over onbetrouwbaarheidsintervallen

Bij alle general-purpose oplosmethoden voor niet-lineaire vergelijkingen bepaalt het teken van de berekende f-waarde samen met additionele informatie of de volgende iterand links of rechts van de huidige komt te liggen. Bijv. bij Newton-Raphson: als $f'>0$ in de buurt van α dan zegt $f(x_i)\gtrless 0$ dat $x_{i+1}\lessgtr x_i$.

Evenwel, de berekende f-waarden zijn met afrondfouten behept, en wanneer deze een bedrag $\pm\epsilon$ kunnen belopen dan kan in principe in ieder punt van het interval (a,b) (zie fig. 2) een functiewaarde worden opgeleverd met een teken tegengesteld aan dat van de ware f-waarde ter plaatse, en als dat gebeurt wordt men dus bij Newton-Raphson de verkeerde kant opgestuurd. Evenzo is het mogelijk dat bijv. in het punt b de waarde 0 wordt opgeleverd, en dan blijft het proces daar "hangen": numeriek gesproken is het proces nu uitgeconvergeerd.

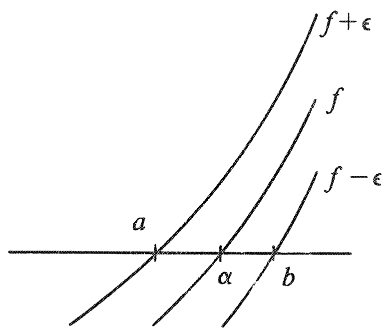

Fig. 2

Men mag er dus niet op rekenen dat een iteratie proces betere benaderingen voor de wortel α oplevert dan a of b. Men noemt het segment $[a,b]$ daarom het onbetrouwbaarheidsinterval voor de wortel α. Als $f'(\alpha)\neq 0$ dan is blijkbaar

$$(17) \qquad b-\alpha \approx \alpha - a \approx \frac{\epsilon}{|f'(\alpha)|}\cdot$$

Bij een p-voudig nulpunt (zie (9)) is

$$(18) \qquad b-\alpha \approx \alpha - a \approx \left|\frac{p!\epsilon}{f^{(p)}(\alpha)}\right|^{1/p}.$$

Onder de aanname dat ϵ evenredig is met 10^{-k} als k het aantal decimalen in de floating point mantisse is (dit is bij de standaard Wilkinsonse fouten analyse het geval; analoog bij binaire arithmetiek) zal dus het bereikbare aantal goede cijfers in de benadering bij een 2-voudig nulpunt slechts half zo snel toenemen als het aantal cijfers waarmee men werkt. Bij het rekenen met k decimalen ziet men dan ook meestal dat niet meer dan $\frac{1}{2}k$ goede cijfers bereikt kunnen worden. Analoog bij een 3-voudige wortel niet meer dan $\frac{1}{3}k$ goede decimalen.

Ter illustratie kijken we naar de vergelijking in voorbeeld 2, waar we een tweevoudige wortel hebben. Als daar voor een zekere i geldt $x_i = 1{,}000018084$ dan is $x_{i+1} = 1{,}000018433$ en $x_{i+2} = x_{i+4} = ... = x_i$, $x_{i+3} = x_{i+5} = ... = x_{i+1}$ bij het gebruik van 10 decimalen floating aritmetiek.

9. Terug naar de versnelde methoden

9.1 Uit § 8 is duidelijk dat men al op betrekkelijk grote afstand van de wortel niet meer mag verwachten dat (12) nog redelijke waarden voor p oplevert ten behoeve van de methode in § 7.1. Met het getallenvoorbeeld aan het eind van § 8 zou (12) bijv. opleveren $p = \frac{1}{2}$.

Een ander bezwaar is dat als de methode nu eens echt goed werkte en een schating voor α zou opleveren (zie (14)) vlak bij α, dan ligt deze schatting ook in het onbetrouwbaarheidsinterval van α voor f'; een volgende Newton-Raphson stap kan nu overal terecht komen, i.h.b. heel ver weg.

9.2 We keren nu terug naar de methode in § 7.2. Het teken van $h(x)$ wordt bepaald door dat van de noemer in (15). Voor $f(x)$ wordt opgeleverd $f(x)+\epsilon_1$, voor $f(x+f(x))$ dus $f(x+f(x)+\epsilon_1)+\epsilon_2$, dus voor de hele noemer

$$(19) \qquad f(x+f(x)+\epsilon_1) + \epsilon_2 - f(x) - \epsilon_1$$

(eigenlijk moet ook nog rekening gehouden worden met een afrondfout bij de aftrekking, maar daardoor verandert (althans bij een fatsoenlijke arithmetiek) het teken niet.

We schrijven $f(x)=(x-\alpha)^p g(x)$ (zie (9)), en nemen eens (gemakshalve) aan dat g constant is op een omgeving van α, zeg $g(x)=a$. Dan luidt (19):

$$(20) \qquad a[x+a(x-\alpha)^p+\epsilon_1-\alpha]^p+\epsilon_2-a(x-\alpha)^p-\epsilon_1 .$$

We beschouwen nu het geval $p=2$ en nemen eens aan dat $\epsilon_1=0$ en $\epsilon_2=-\epsilon$ (ϵ de maximale afrondfout in de waarden van f). Dan is voor ϵ klein genoeg en $x-\alpha=\frac{1}{10}\epsilon^{1/3}$ de uitdrukking in (20) negatief terwijl dit positief had moeten zijn (neem maar $\epsilon_1=\epsilon_2=0$). De lengte van het onbetrouwbaarheidsinterval voor α is nu dus minstens van de orde $\epsilon^{1/3}$ (en een nadere analyse toont aan dat de orde precies $\epsilon^{1/3}$ is), terwijl dit bij de oorspronkelijke functie f slechts van de orde $\epsilon^{1/2}$ is. We zijn er dus met de methode van Kioustelidis in bereikbare nauwkeurigheid op achteruit gegaan.

Ook voor $p=1$ gaan we er op achteruit: voor de uitdrukking in (20) krijgen we nu $a^2(x-\alpha)+(a-1)\epsilon_1+\epsilon_2$ hetgeen negatief kan zijn als $|x-\alpha|<\frac{1}{a^2}[|a-1|\epsilon+\epsilon]$ (neem nl. $\epsilon_1=\pm\epsilon$ als $a \lesseqgtr 1$, $\epsilon_2=-\epsilon$). Voor $a\geqslant 1$ is het rechterlid $\frac{\epsilon}{a}$, hetgeen overeenstemt met de onbetrouwbaarheid van α bij f (zie (17)), echter voor $a<1$ is het rechterlid $\frac{2-a}{|a|}\epsilon$ en dat kan willekeurig groot zijn.

Hiermee is de misere nog niet uitputtend beschreven. Merk immers op dat de noemer van h in het onbetrouwbaarheidsinterval van α voor h nul kan worden, zodat h daar ontploft. Aangezien we echter in een Newton-Raphson stap geïnteresseerd zijn in $\frac{h(x)}{h'(x)}$ (zie (2)) zal men doorgaans niet h en h' apart uitrekenen, maar de uitdrukking hiervoor zoveel mogelijk vereenvoudigen. Men komt zo op de uitdrukking

$$(21) \qquad \frac{h(x)}{h'(x)} = \frac{(\tilde{f}-f)f}{2\tilde{f}f'-ff'-f\tilde{f}'(1+f')}$$

waarin $f=f(x)$ en $f'=f'(x)$, $\tilde{f}=f(x+f(x))$, $\tilde{f}'=f'(x+f(x))$. We zien nu dat als voor de berekende waarden van $\tilde{f}$ en f voor $x=x_i$ de noemer in (15) nul wordt, dus $\tilde{f}=f$, het rechterlid in (21) nul wordt, en dus $x_{i+1}=x_i$, zodat het proces in x_i blijft hangen. Overigens blijft de mogelijkheid van ontploffing of van nul gedeeld door nul blijkbaar nog steeds aanwezig, en daarmee de mogelijkheid van volstrekt willekeurige Newton-Raphson stappen, net als aan het eind van § 9.1 vermeld.

Het blijven hangen ver van de wortel wordt fraai geïllustreerd voor de vergelijking in voorbeeld 2, waarbij de Newton-Raphson stap berekend wordt met (21) in 10 decimalen floating arithmetiek:

$$\begin{aligned} x_0 &= 1{,}2 \\ x_1 &= 0{,}8932892343 \\ x_2 &= 0{,}9837580218 \\ x_3 &= 0{,}9995725482 \\ x_4 &= 0{,}9997982051 \end{aligned}$$

en $x_5 = x_6 = ... = x_4$.

9.3 De moraal van dit verhaal is dat je erg moet uitkijken met het alleen maar uitvoeren van een zuiver wiskundige analyse van numerieke processen, maar dat je ook een numerieke analyse moet uitvoeren.