單元 59: 牛頓勘根法
(課本 §10.6)

二次多項式

$$f(x) = ax^2 + bx + c$$

的根爲

$$x = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}$$

問. 一般函數 $f(x)$ 的根爲何?

答. 一個常用的方法爲下述的牛頓勘根法.

牛頓勘根法 (Newton's Method). 設 c 爲 $f(x)$ 的根, 亦即,

$$f(c) = 0$$

但 c 未知.

首先, 經由概略的估計, 選擇一個靠近 c 的 x_1, 並令

$$S_1(x) = f(x_1) + f'(x_1)(x - x_1)$$

此乃 $f(x)$ 在中心點爲 x_1 的 1 階泰勒多項式, 亦爲過點 $(x_1, f(x_1))$ 的切線, 因爲根據點斜式以及過此點的切線斜率 $f'(x_1)$, 得切線爲

$$y - f(x_1) = f'(x_1)(x - x_1)$$

亦相當於

$$y = f(x_1) + f'(x_1)(x - x_1)$$

剛好就是 $S_1(x)$.

接著, 因爲 $S_1(x)$ 與 $f(x)$ 在 x_1 附近相當靠近, 且 $f(x)$ 的未知根 c 又在 x_1 附近, 故一個直觀的結論爲, $f(x)$ 的根與 $S_1(x)$ 的根亦很靠近. 此乃建議以 $S_1(x)$ 的根, 亦即, 方程式

$$S_1(x) = f(x_1) + f'(x_1)(x - x_1) = 0$$

的解 x, 估計 c. 經由計算, 得

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

亦相當於

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

故, 以

$$x_2 \stackrel{\text{def}}{=} x_1 - \frac{f(x_1)}{f'(x_1)} \approx c$$

如圖示.

接著, 再以 $f(x)$ 在中心點為 x_2 的 1 階泰勒多項式

$$S_1(x) = f(x_2) + f'(x_2)(x - x_2)$$

的根估計 c, 亦即, 令

$$f(x_2) + f'(x_2)(x - x_2) = 0$$

得

$$x - x_2 = -\frac{f(x_2)}{f'(x_2)}$$

亦相當於

$$x = x_2 - \frac{f(x_2)}{f'(x_2)}$$

故, 以

$$x_3 \stackrel{\text{def}}{=} x_2 - \frac{f(x_2)}{f'(x_2)} \approx c$$

如圖示.

持續此種, 以前一次的估計值作為新的中心點的 1 階泰勒多項式的根, 估計 c 的過程, 可導出以

$$x_4 \stackrel{\text{def}}{=} x_3 - \frac{f(x_3)}{f'(x_3)} \approx c$$

$$\vdots$$

以

$$x_{n+1} \overset{\text{def}}{=} x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)} \approx c$$

$$\vdots$$

直至

$$|x_{n+1} - x_n| < \text{ 某一給定的精確度}$$

並以 x_{n+1} 作爲最後的估計.

註. 每一次的計算都可由前一次的結果求得, 故稱爲一個迭代 (iteration), 並稱

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

爲一迭代公式 (iterative formula).

例 1. 試以三次迭代的牛頓勘根法估計

$$f(x) = x^2 - 2$$

的正根, 並與眞正的正根

$$\sqrt{2} = 1.414213562\cdots$$

比較.

<解> (1) 求迭代公式. 因爲

$$f'(x) = 2x$$

故由 $f(x)$ 與 $f'(x)$ 的數學式, 得迭代公式爲

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

(2) 選擇一個初始估計, 如以

$$x_1 = 1$$

開始, 則根據迭代公式以及計算整理, 由第一次迭代得

$$\begin{aligned} x_2 &= x_1 - \frac{x_1^2 - 2}{2x_1} \\ &= 1 - \frac{1^2 - 2}{2 \cdot 1} = 1 + \frac{1}{2} = 1.5 \end{aligned}$$

由第二次迭代得

$$\begin{aligned} x_3 &= x_2 - \frac{x_2^2 - 2}{2x_2} \\ &= 1.5 - \frac{(1.5)^2 - 2}{2 \cdot 1.5} = 1.416667 \end{aligned}$$

且由第三次迭代得

$$\begin{aligned} x_4 &= x_3 - \frac{x_3^2 - 2}{2x_3} \\ &= 1.416667 - \frac{(1.416667)^2 - 2}{2 \cdot 1.416667} \\ &= 1.414216 \end{aligned}$$

因此, 根據題意, 以

$$\begin{aligned} x_4 &= 1.414216 \\ &\approx \sqrt{2} = 1.414213562\cdots \end{aligned}$$

準確至小數點以下第 5 位.

例 2. 試以牛頓勘根法求

$$y = e^{-x^2}$$

與

$$y = x$$

的交點, 直至連續 2 個估計值的誤差在 0.0001 內.

<解> 因爲求此兩個函數的交點乃相當於解

$$x = e^{-x^2}$$

亦相當於解

$$f(x) \overset{\text{def}}{=} x - e^{-x^2} = 0$$

故可採用牛頓勘根法, 過程如下.

(1) 求迭代公式. 因爲

$$f'(x) = 1 - e^{-x^2}(-2x) = 1 + 2xe^{-x^2}$$

故由 $f(x)$ 與 $f'(x)$ 的數學式, 得迭代公式

$$\begin{aligned} x_{n+1} &= x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)} \\ &= x_n - \frac{x_n - e^{-x_n^2}}{1 + 2x_n e^{-x_n^2}} \end{aligned}$$

(2) 根據圖示, 一個可行的初始估計爲

$$x_1 = 0.5$$

則根據迭代公式, 以及計算整理, 由第一次迭代得

$$\begin{aligned} x_2 &= x_1 - \frac{x_1 - e^{-x_1^2}}{1 + 2x_1 e^{-x_1^2}} \\ &= 0.5 - \frac{0.5 - e^{-(0.5)^2}}{1 + 2(0.5)e^{-(0.5)^2}} \\ &= 0.65673 \end{aligned}$$

且連續 2 個估計值的誤差

$$|x_2 - x_1| = 0.15673 > 0.0001$$

不符合題意要求，故繼續估計，並由第二次迭代得

$$\begin{aligned} x_3 &= x_2 - \frac{x_2 - e^{-x_2^2}}{1 + 2x_2 e^{-x_2^2}} \\ &= 0.65673 - \frac{0.65673 - e^{-(0.65673)^2}}{1 + 2(0.65673)e^{-(0.65673)^2}} \\ &= 0.65292 \end{aligned}$$

且連續 2 個估計值的誤差

$$|x_3 - x_2| = 0.0381 > 0.0001$$

亦不符合題意要求，故繼續由第三次迭代得

$$\begin{aligned} x_4 &= x_3 - \frac{x_3 - e^{-x_3^2}}{1 + 2x_3 e^{-x_3^2}} \\ &= 0.65292 - \frac{0.65292 - e^{-(0.65292)^2}}{1 + 2(0.65292)e^{-(0.65292)^2}} \\ &= 0.65292 \end{aligned}$$

且連續 2 個估計值的誤差

$$|x_4 - x_3| = 0.00000 < 0.0001$$

符合題意要求.

因此, 以

$$x_4 = 0.65292$$

估計交點.

註. 牛頓勘根法失效的情況.

有時因爲初始估計值的影響或是函數本身的因素, 基本上有兩種情況會使得牛頓勘根法無法有效地估計函數的根, 分別爲

(1) 針對某個 n,

$$f'(x_n) = 0$$

如圖示, 因爲此時以 x_n 爲中心的 1 階泰勒多項式爲

$$\begin{aligned} S_1(x) &= f(x_n) + f'(x_n)(x - x_n) \\ &= f(x_n) \end{aligned}$$

乃一水平線, 與 x-軸無交點, 故無法得到下一個估計值 x_{n+1}, 而無法繼續估計. 例如,

$$f(x) = 2x^3 - 6x^2 + 6x - 1$$

且初始估計爲

$$x_1 = 1$$

時,

$$
\begin{aligned}
f'(1) &= 6x^2 - 12x + 6\Big|_{x=1} \\
&= 6 - 12 + 6 = 0
\end{aligned}
$$

故以 1 爲中心的 1 階泰勒多項式爲

$$
\begin{aligned}
S_1(x) &= f(1) + f'(1)(x-1) \\
&= 1 + 0(x-1) = 1
\end{aligned}
$$

乃一水平線, 與 x-軸無交點, 無法繼續估計. 或

$$f(x) = 4x^3 - 12x^2 + 12x - 3$$

且初始估計爲

$$x_1 = \frac{3}{2}$$

時,

$$
\begin{aligned}
f'\left(\frac{3}{2}\right) &= 12x^2 - 24x + 12\Big|_{x=3/2} \\
&= 12\left(\frac{9}{4}\right) - 24\left(\frac{3}{2}\right) + 12 \\
&= 27 - 36 + 12 = 3
\end{aligned}
$$

且

$$
\begin{aligned}
f\left(\frac{3}{2}\right) &= 4\left(\frac{27}{8}\right) - 12\left(\frac{9}{4}\right) + 12\left(\frac{3}{2}\right) - 3 \\
&= \frac{27}{2} - 27 + 18 - 3 = \frac{3}{2}
\end{aligned}
$$

故經由第一次迭代, 並將上述結果代入, 得

$$
\begin{aligned}
x_2 &= x_1 - \frac{f(x_1)}{f'(x_1)} \\
&= \frac{3}{2} - \frac{3/2}{3} = \frac{3}{2} - \frac{1}{2} = 1
\end{aligned}
$$

接著, 代入 $x_2 = 1$, 得

$$
\begin{aligned}
f'(x_2) &= f'(1) \\
&= 12 - 24 + 12 = 0
\end{aligned}
$$

故以 $x_2 = 1$ 爲中心的 1 階泰勒多項式爲

$$
\begin{aligned}
S_1(x) &= f(1) + f'(1)(x-1) \\
&= 1 + 0(x-1) = 1
\end{aligned}
$$

乃一水平線, 與 x-軸無交點, 無法繼續估計.

(2) 迭代公式的估計值 $\{x_n\}$ 發散, 如圖示, 因爲此時估計值 x_n 會無界交替地遞增與遞減, 或形成交替循環的現象, 而無法收斂到函數的根. 例如,

$$f(x) = x^{1/3}$$

則

$$f'(x) = \frac{1}{3}x^{-2/3}$$

且對任意的初始估計

$$x_1 \neq 0$$

時，經由第一次迭代，並化簡整理，得

$$\begin{aligned}
x_2 &= x_1 - \frac{f(x_1)}{f'(x_1)} \\
&= x_1 - \frac{x_1^{1/3}}{(1/3)x_1^{-2/3}} = x_1 - 3x_1 \\
&= -2x_1
\end{aligned}$$

接著，經由第二次迭代，化簡整理，以及代入 x_2，得

$$\begin{aligned}
x_3 &= x_2 - \frac{f(x_2)}{f'(x_2)} \\
&= x_2 - \frac{x_2^{1/3}}{(1/3)x_2^{-2/3}} = x_2 - 3x_2 \\
&= -2x_2 = (-2)(-2)x_1 \\
&= (-2)^2 x_1
\end{aligned}$$

同理，經由第三次迭代，化簡整理，以及代入 x_3，得

$$\begin{aligned}
x_4 &= x_3 - 3x_3 \\
&= -2x_3 = (-2)(-2)^2 x_1 \\
&= (-2)^3 x_1
\end{aligned}$$

$$\vdots$$

以及類推出的估計值的一般項

$$\begin{aligned} x_n &= x_{n-1} - 3x_{n-1} \\ &= -2x_{n-1} = (-2)(-2)^{n-2}x_1 \\ &= (-2)^{n-1}x_1 \end{aligned}$$

因此, 當初始估計 x_1 不爲 0 時,

$$\begin{aligned} \lim_{n\to\infty} x_n &= \lim_{n\to\infty} (-2)^{n-1}x_1 \\ &= \pm\infty \cdot x_1 = \pm\infty \end{aligned}$$

無界交替地遞增與遞減, 而無法收斂到函數的根.

或

$$f(x) = x^3 - 2x - 2$$

則

$$f'(x) = 3x^2 - 2$$

且當初始估計爲

$$x_1 = 0$$

時, 經由第一次迭代, 得

$$\begin{aligned} x_2 &= x_1 - \frac{f(x_1)}{f'(x_1)} \\ &= 0 - \frac{-2}{-2} = 0 - 1 \\ &= -1 \end{aligned}$$

接著, 經由第二次迭代, 得

$$\begin{aligned} x_3 &= x_2 - \frac{f(x_2)}{f'(x_2)} \\ &= -1 - \frac{-1+2-2}{3-2} = -1+1 \\ &= 0 \end{aligned}$$

又回到了初始估計值. 這意味著,

$$x_4 = -1,\ x_5 = 0,\ x_6 = -1,\ \cdots$$

在 0 與 -1 交替地循環, 亦即,

$$x_n = \begin{cases} 0, & n \text{ 爲奇數} \\ -1, & n \text{ 爲偶數} \end{cases}$$

而無法收斂到函數的根.