Predavanja 7

Reševanje nelinearnih enačb

Sedmi sklop izročkov

Fakulteta za računalništvo in informatiko
Univerza v Ljubljani

22. november 2021

Metode fiksne točke

Metodo fiksne točke dobimo tako, da enačbo

$$f(x) = 0$$

preoblikujemo v ekvivalentno enačbo

$$g(x) = x.$$

Točki x pravimo negibna točka funkcije g.

Tangentna metoda je poseben primer metode fiksne točke.

Izrek

Naj bo g zvezno odvedljiva na intervalu $I = [a, b]$ in naj velja $g(I) \subseteq I$. Naj bo še $\sup_{x \in I} |g'(x)| = m < 1$. Velja:

- *$g(x) = x$ ima enolično rešitev ξ na I.*
- *Za vsak $x_0 \in I$ zaporedje $x_n = g(x_{n-1})$ konvergira proti ξ, pri čemer je*

$$|x_{n+1} - \xi| \leqslant \frac{m^{n+1}}{1-m} |x_1 - x_0|$$

Metoda fiksne točke - dokaz konvergenčnega izreka

Dokaz.

- Velja:

$$|x_n - \xi| = |g(x_{n-1}) - g(\xi)| \underbrace{=}_{\zeta \in (\xi, x_{n-1})} |g'(\zeta)||x_{n-1} - \xi| \leqslant m|x_{n-1} - \xi|.$$

  Nadaljujemo in dobimo:

$$|x_n - \xi| \leqslant m^n |x_0 - \xi|.$$

  Torej zaporedje $\{x_n\}_n$ res konvergira za poljuben začetni približek x_0.

- Velja

$$|x_{n+k+1} - x_{n+k}| = |g(x_{n+k}) - g(x_{n+k-1})| \leqslant m|x_{n+k} - x_{n+k-1}| \leqslant \ldots \leqslant m^k |x_{n+1} - x_n|.$$

  Torej je

$$\begin{aligned} |x_{n+1} - \xi| &\leqslant |x_{n+2} - x_{n+1}| + |x_{n+3} - x_{n+2}| + \ldots \leqslant (m + m^2 + \ldots)|x_{n+1} - x_n| \\ &= \frac{m}{1-m}|x_{n+1} - x_n| = \frac{m^{n+1}}{1-m}|x_1 - x_0|. \end{aligned}$$

□

Metoda fiksne točke - red konvergence

Izrek

Naj bo iteracijska funkcija g v okolici negibne točke ξ p-krat zvezno odvedljiva in velja

$$g'(\xi) = g''(\xi) = \cdots = g^{(p-1)}(\xi) = 0$$

in $g^{(p)}(\xi) \neq 0$. Potem je red konvergence zaporedja $x_{n+1} = g(x_n)$ enak p.

Dokaz.

Razvijemo $g(x)$ v Taylorjevo vrsto okoli točke ξ:

$$x_{n+1} = g(x_n) = \xi + \frac{1}{p!} g^{(p)}(\xi)(x_{n+1} - \xi)^p.$$

Odtod sledi

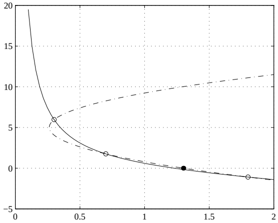
$$\frac{|x_{n+1} - \xi|}{|x_n - \xi|^p} = \frac{1}{p!} |g^{(p)}(\zeta)|,$$

kjer je ζ na majhnem intervalu okoli ξ. □

fzero funkcija

`fzero` je hibridna metoda v Matlabu, ki vključuje bisekcijo, sekantno metodo in obratno kvadratno interpolacijo.

Pri obratni kvadratni interpolaciji se išče presečišče parabole skozi tri točke $(x_0, f(x_0))$, $(x_1, f(x_1))$, $(x_2, f(x_2))$, z x-osjo.




```
r = fzero('fun',x0)
```

`fzero` izbere za naslednji približek

1. Rezultat obratne kvadratne interpolacije, če je le-ta znotraj začetnega intervala.
2. Rezultat sekantne metode, če prvi korak ni izpolnjen.
3. Rezultat bisekcije, če tudi drugi korak ni izpolnjen.

Sistemi nelinearnih enačb

Rešujemo sistem nelinearnih enačb:

$$\begin{aligned} f_1(x_1,\dots,x_n) &= 0, \\ f_2(x_1,\dots,x_n) &= 0, \\ &\vdots \\ f_n(x_1,\dots,x_n) &= 0. \end{aligned}$$

Če definiramo

$$\underline{f} := (f_1,\dots,f_n) : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n,$$

potem lahko sistem na kratko zapišemo kot

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

Posplošitev metode fiksne točke oz. navadne iteracije se imenuje Jacobijeva iteracija, posplošitev tangentne metode pa Newtonova metoda.

Jacobijeva iteracija

1. Sistem $\underline{f}(\underline{x}) = 0$ preoblikujemo v ekvivalentno obliko $\underline{g}(\underline{x}) = \underline{x}$, kjer je $\underline{g} : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$.
2. Izberemo začetni približek $\underline{x}^{(0)} \in \mathbb{R}^n$.
3. Računamo zaporedje prebližkov $\underline{x}^{(r+1)} = \underline{g}(\underline{x}^{(r)})$.

Izrek (Konvergenčni izrek I)

Naj $\underline{g} : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ na nekem območju $\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$ zadošča:

1. $\underline{g}(\Omega) \subseteq \Omega$.
2. $\|\underline{g}(\underline{x}) - \underline{g}(\underline{y})\| \leqslant m\|\underline{x} - \underline{y}\|$ *za vsaka* $\underline{x}, \underline{y} \in \Omega$ *nek* $0 \leqslant m < 1$.

Enačba $\underline{g}(\underline{x}) = \underline{x}$ ima na območju Ω eno samo rešitev $\underline{\xi}$ in zaporedje $\underline{x}^{(r+1)}$ konvergira proti $\underline{\xi}$ za poljuben začetni približek $\underline{x}^{(0)} \in \Omega$. Velja še

$$\|\underline{x}^{(r+1)} - \underline{\xi}\| \leqslant \frac{m^r}{1-m}\|\underline{x}^{(1)} - \underline{x}^{(0)}\|.$$

Jacobijeva iteracija

Matriki prvih odvodov preslikave $\underline{g}$ pravimo Jacobijeva matrika, tj.

$$J_{\underline{g}}(\underline{x}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial g_1}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial g_1}{\partial x_n} \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial g_n}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial g_n}{\partial x_n} \end{bmatrix} (\underline{x}).$$

Izrek (Konvergenčni izrek II)

Naj $\underline{g} : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ zvezno odvedljiva v negibni točki $\underline{\xi}$ in naj bo $\|J_{\underline{g}}(\underline{\xi})\| < 1$. Potem obstaja zaprta okolica $\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$ fiksne točke $\underline{\xi}$, tako da zaporedje $\underline{x}^{(r+1)}$ konvergira proti $\underline{\xi}$ za poljuben začetni približek $\underline{x}^{(0)} \in \Omega$.

Algoritem in primeri:

`https://zalara.github.io/iteracija.m`

`https://zalara.github.io/testiteracijasistem.m`

Newtonova iteracija

Pri Newtonovi iteraciji tvorimo zaporedje približkov

$$\boxed{\underline{x}^{(r+1)} = \underline{x}^{(r)} - J_{\underline{f}}(\underline{x}^{(r)})^{-1}\underline{f}(\underline{x}^{(r)})}.$$

V praksi pa ne računamo inverza $J_{\underline{f}}(\underline{x}^{(r)})^{-1}$, ampak namesto tega rešimo sistem

$$\begin{aligned} J_{\underline{f}}(\underline{x}^{(r)})\Delta\underline{x}^{(r)} &= -\underline{f}(\underline{x}^{(r)}), \\ \underline{x}^{(r+1)} &= \underline{x}^{(r)} + \Delta\underline{x}^{(r)}. \end{aligned}$$

Algoritem in primeri:

`https://zalara.github.io/newtonsis.m`

`https://zalara.github.io/testnewton.m`

Kvazi-Newtonove metode: Broydenova metoda

- Pri velikim številu enačb je Newtonova metoda zelo zahtevna, saj potrebujemo na vsakem koraku n^2 parcialnih odvodov in $\mathcal{O}(n^3)$ računskih operacij za reševanje linearnega sistema.
- Kot se pri navadni tangentni metodi izognemo računanja odvodov z uporabo sekantne metode, se tudi pri *kvazi-Newtonovih* metodah izognemu računanju parcialnih odvodov. Najbolj znana je *Broydenova metoda*.

Naj bo B_r približek za $J_{\underline{f}}(\underline{x}^{(r)})$. Korak kvazi-Newtonove metode je:

1. reši $B_r \Delta \underline{x}^{(r)} = -\underline{f}(\underline{x}^{(r)})$,
2. $\underline{x}^{(r+1)} = \underline{x}^{(r)} + \Delta \underline{x}^{(r)}$,
3. določi B_{r+1}.

Pri Broydenovi metodi za B_{r+1} matriko, ki zadošča t.i. sekantnemu pogoju

$$B_{r+1}(\underline{x}^{(r+1)} - \underline{x}^{(r)}) = \underline{f}(\underline{x}^{(r+1)}) - \underline{f}(\underline{x}^{(r)})$$

in je v spektralni normi najbližje B_r (tj. največja lastna vrednost razlike $B_{r+1} - B_r$ je najmanjša možna).
Iščemo torej $\Delta B_r = B_{r+1} - B_r$ z minimalno spektralno normo, ki zadošča $\Delta B_r \Delta \underline{x}^{(r)} = f(\underline{x}^{(r+1)})$. Izkaže se, da je potem

$$B_{r+1} = B_r + \frac{\underline{f}(\underline{x}^{(r+1)})(\Delta \underline{x}^{(r)})^T}{\|\Delta \underline{x}^{(r)}\|_2^2}.$$

Algoritem in primeri:

`https://zalara.github.io/broyden.m`

`https://zalara.github.io/testbroyden.m`

Variacijske metode

- Iščemo ekstrem $x \in \mathbb{R}^n$ dvakrat zvezno odvedljive funkcije $g : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$.
- Iz analize vemo, da mora biti x stacionarna točka, tj.

$$\nabla g(x) = \begin{bmatrix} \frac{\partial g(x)}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial g(x)}{\partial x_n} \end{bmatrix} = 0.$$

- O vrsti in obstoju ekstrema v stacionarni točki odloča Hessejeva matrika

$$H_g(\underline{x}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 g(\underline{x})}{\partial x_1^2} & \cdots & \frac{\partial^2 g(\underline{x})}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial^2 g(\underline{x})}{\partial x_n \partial x_1} & \cdots & \frac{\partial^2 g(\underline{x})}{\partial x_n^2} \end{bmatrix}.$$

Če ima $H_g(\underline{x})$ same pozitivne lastne vrednosti (oz. negativne lastne vrednosti), je v $\underline{x}$ lokalni minimum (oz. lokalni maksimum).

- Namesto iskanja ničle funkcije $f(\underline{x})$ lahko iščemo globalne minimume funkcije

$$g : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}, \qquad g(\underline{x}) = \|f(\underline{x})\|^2 = \sum_{i=1}^{n} f_i^2(\underline{x}).$$

Variacijske metode

Minimum funkcije lahko iščemo iterativno tako, tekoči približek $\underline{x}^{(r)}$ popravimo v neki smeri v_r:

$$\underline{x}^{(r+1)} = \underline{x}^{(r)} + \lambda_r v_r,$$

kjer je λ_r neko realno število. Veljalo bo:

$$g(\underline{x}^{(r+1)}) < g(\underline{x}^{(r)}).$$

Imamo več možnosti za izbiro smeri v_r:

- *Splošna metoda spusta:* Izberemo katero koli smer, ki ni pravokotna na $\nabla g(\underline{x})$.
- *Metoda najhitrejšega spusta:* Za smer izberemo $v_r = -\nabla g(\underline{x})$.
- *Metoda koordinatnega spusta:* Za smeri zaporedoma izbiramo koordinatne smeri $e_1, e_2, \ldots, e_n$.

Po izbiri smeri moramo najti še λ_r. Definiramo

$$q(\lambda) = g(\underline{x}^{(r)} + \lambda v_r).$$

Uporabimo eno od naslednjih metod:

- *Metodo največjega spusta:* Rešimo enačbo $q'(\lambda) = 0$ z eno od metod za reševanje neenačb v eni spremenljivki.
- *Metoda tangentnega spusta:* Poiščemo presečišče tangente na $y = q(\lambda)$ v točki $\lambda = 0$ z osjo x.
- *Metoda paraboličnega spusta:* S tangento določimo α, nato pa čez točke $(0, q(0))$, $(\alpha/2, q(\alpha/2))$, $(\alpha, q(\alpha))$ potegnemo parabolo in za λ izberemo njen minimum.

Poglavje 4

Polinomska interpolacija

Interpolacija: uvod

Aproksimirati želimo neznano funkcijo $f(x)$ z 'bolj obvladljivimi' funkcijami, npr:

1. Polinomi.
2. Odsekoma polinomskimi funkcijami.
3. Racionalnimi funkcijami.
4. Trigonometričnimi funkcijami.
5. Drugo (eksponentna funkcija, Besselove funkcije, itd.)

Kako aproksimirati $f(x)$ z $g(x)$? V kakšnem smislu je aproksimacija dobra?

1. Interpolacija: $g(x)$ mora imeti iste vrednost kot $f(x)$ na dani množici točk.
2. Metoda najmanjših kvadratov: $g(x)$ se mora čim bolj prilegati $f(x)$, tj. 2-norma

$$\int_a^b |f(t) - g(t)|^2 \, dt$$

   mora biti čim manjša.

3. Aproksimacija Čebiševa: $g(x)$ se mora čim bolj prilegati $f(x)$ v smislu supremum norme, tj. minimizirati želimo

$$\max_{t \in [a,b]} |f(t) - g(t)|.$$

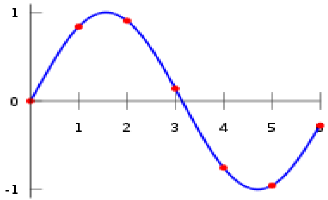
Interpolacijski polinom

Danih imamo $n+1$ različnih točk $x_0, \ldots, x_n$, in vrednosti $y_0, \ldots, y_n$. Iščemo polinom

$$p(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \cdots + a_n x^n,$$

stopnje n, ki zadošča

$$p(x_0) = y_0, \quad p(x_1) = y_1, \quad \ldots, \quad p(x_n) = y_n. \tag{1}$$



Dobimo sistem

$$\begin{aligned} a_0 + a_1 x_0 + a_2 x_0^2 + \cdots + a_n x_0^n &= y_0, \\ a_0 + a_1 x_1 + a_2 x_1^2 + \cdots + a_n x_1^n &= y_1, \\ &\vdots \\ a_0 + a_1 x_n + a_2 x_n^2 + \cdots + a_n x_n^n &= y_n. \end{aligned} \tag{2}$$

Polinomu $p(x)$ pravimo interpolacijski polinom.

V matrični obliki lahko sistem (2) zapišemo kot

$$Ax = b,$$

kjer je

$$A = \begin{bmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & \dots & x_0^n \\ 1 & x_1 & x_1^2 & \dots & x_1^n \\ 1 & x_2 & x_2^2 & \dots & x_2^n \\ & & & \vdots & \\ 1 & x_n & x_n^2 & \dots & x_n^n \end{bmatrix}, \quad x = \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix}, \quad b = \begin{bmatrix} y_0 \\ y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}.$$

Matriki A pravimo Vandermondova matrika na točkah $x_0, \dots, x_n$, velja pa

$$\boxed{\det(A) = \prod_{i>j} (x_i - x_j)}.$$

Posledica

Če so točke x_i, $i = 0, \dots, n$ paroma različne, ima sistem enolično rešitev. Polinom stopnje največ n skozi $n + 1$ točk je enoličen.

Vprašanje 1: Kako računsko zahtevno je reševanje sistema (2)?

Vprašanje 2: Ali je sistem (2) numerično občutljiv?

Odgovor 1: Računanje interpolacijskega polinoma s pomočjo Vandermondove matrike je zamudno ($\frac{2}{3}n^3 + \mathcal{O}(n^2)$ operacij).

Odgovor 2: Pogojenostno število $\kappa(A)$ v primeru ekvidistantnih točk na intervalu $[0, 1]$, tj. $x_0 = 0, x_1 = \frac{1}{n}, x_2 = \frac{2}{n}, \ldots, x_n = 1$, hitro raste s številom točk:

število točk n	5	10	20
$\kappa(A)$	$\approx 4.9 \cdot 10^3$	$\approx 1.2 \cdot 10^8$	$\approx 9.7 \cdot 10^{16}$

Rešitev: Namesto uporabe standardne baze $1, x, x^2, \ldots, x^n$ uporabimo eno od naslednjih baz:

- Lagrangeova baza:
$$\frac{(x-x_1)\cdots(x-x_n)}{(x_0-x_1)\cdots(x_0-x_n)}, \frac{(x-x_0)(x-x_2)\cdots(x-x_n)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)\cdots(x_1-x_n)}, \ldots, \frac{(x-x_0)\cdots(x-x_{n-1})}{(x_n-x_0)\cdots(x_n-x_{n-1})}.$$

- Newtonova baza: $1, x - x_0, (x - x_0)(x - x_1), \ldots, (x - x_0)\cdots(x - x_{n-1})$.

Obe zgornji bazi sta stabilni, Newtonova pa je cenejša za računanje in oomogoča enostavno dodajanje novih interpolacijskih točk.

Napaka polinomske interpolacije

Naj bo p_n interpolacijski polinom in f funkcija. Zanima nas razlika

$$e_n(t) = p_n(t) - f(t)$$

v neki točki $t \in \mathbb{R}$.

Naj bo q_{n+1} interpolacijski polinom funkcije f skozi točke $x_0, \ldots, x_n$ in t:

$$q_{n+1}(x) = p_n(x) + C \cdot \prod_{i=0}^{n}(x - x_i) \qquad \text{za nek } C \in \mathbb{R}.$$

Iz enakosti $f(t) = q_{n+1}(t)$ sledi

$$e_n(t) = p_n(t) - f(t) = -C \cdot \prod_{i=0}^{n}(t - x_i).$$

Za oceno napako moramo oceniti še koeficient C.

Izrek

Obstaja $\xi \in [a, b]$, tako da velja

$$-C \cdot \prod_{i=0}^{n}(t - x_i) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \cdot \prod_{i=0}^{n}(t - x_i).$$