

Numerické metody a programování

Lekce 7

Řešení nelineárních rovnic

hledáme řešení \mathbf{x} problému

$$f(\mathbf{x}) = 0$$

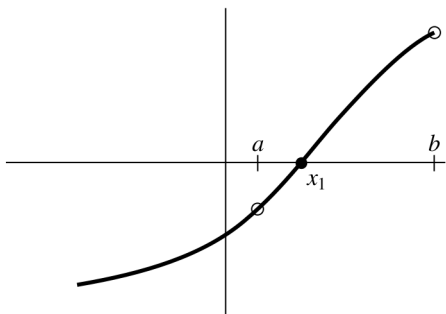
strategie:

- odhad řešení
- iterační proces postupného zpřesňování řešení
- výpočet skončen pokud je splněno kritérium přesnosti

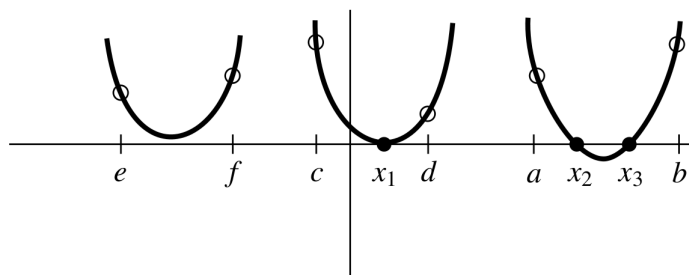
Kořeny funkce (1D problém)

kořen je uzavřen na intervalu (a, b) pokud $f(a)$ a $f(b)$ mají opačná znaménka

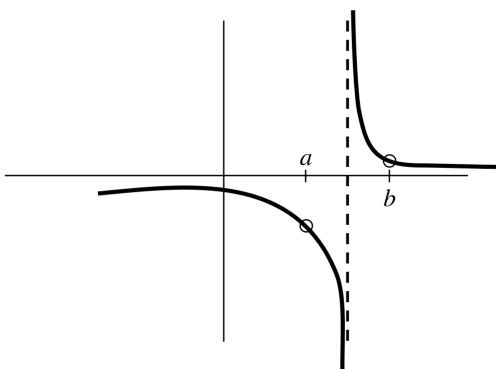
- kořen existuje pokud je funkce spojitá



- nemusí být změna znaménka v okolí dvojnásobného kořene



- patologický případ: uzavření singularity



- počáteční interval je zvětšován až dojde k uzavření kořene

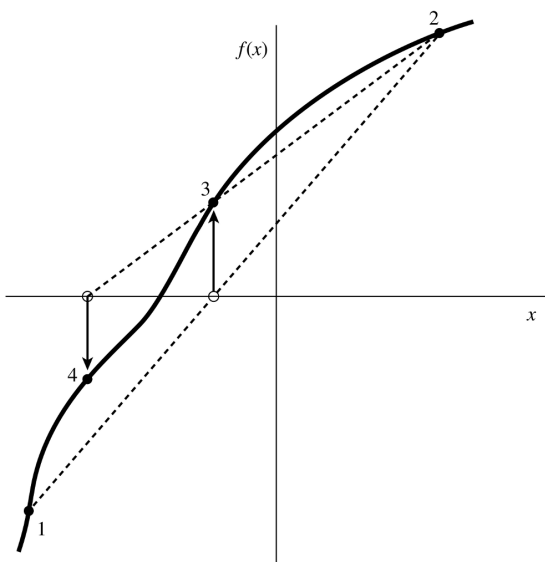
Metody nevyžadující derivace

metoda bisekce

- interval uzavírající kořen je rozpůlen
- středový bod intervalu nahradí krajní bod stejného znaménka
- tolerance (lineární konvergence)
- konverguje k případné singularitě uvnitř intervalu

metoda sečen, *regula falsi*

- rychlejší konvergence pro dobře se chovající funkce (superlineární)
- lineární aproximace funkce v okolí kořene

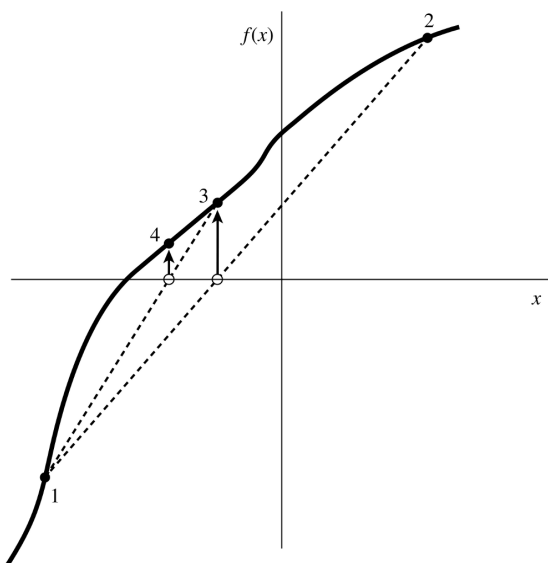


$$\frac{\Delta x}{\Delta f} = \frac{\Delta x'}{\Delta f'}$$

$$\downarrow$$

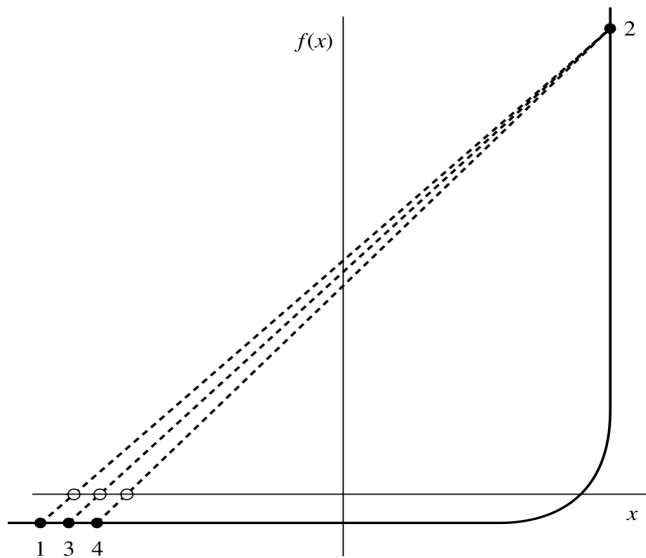
$$x_3 = x_2 - (x_2 - x_1) \frac{f(x_2)}{f(x_2) - f(x_1)}$$

sečny: ponechám poslední dva body



regula falsi: ponechám interval uzavírající kořen

- metoda sečen konverguje rychleji ale nové intervaly nemusí uzavírat kořen
- příklad funkce obtížné pro obě metody:



- pokud dlouho zůstává jeden krajní bod intervalu, upravíme funkční hodnotu v tomto bodě $f(x_2) \rightarrow f(x_2)/2$

Riddersova metoda

- odstraňuje “ohyb” funkce pomocí exponenciálních faktorů - linearizace

$$\frac{f(x_1) + f(x_2)e^{2Q}}{2} = f(x_3)e^Q, \quad x_3 = (x_1 + x_2)/2$$

- kvadratická rovnice pro faktor e^Q
- aplikace metody *regula falsi* na hodnoty $f(x_1), f(x_3)e^Q$ - nový bod v intervalu (x_1, x_2)
- zachovává uzavření kořene
- superlineární konvergence (řád $\sqrt{2}$)
- robustní

Brentova metoda

- fit (interpolace) třech bodů inverzní kvadratickou funkcí $x = P(y)$ (Lagrange)
- hodnota v $y = 0$ dává nový odhad

$$x = b + P/Q$$

$$P = S[T(R-T)(c-b) - (1-R)(b-a)], \quad Q = (T-1)(R-1)(S-1)$$

$$R \equiv f(b)/f(c), \quad S \equiv f(b)/f(a), \quad T \equiv f(a)/f(c)$$

- v případě problému (nový odhad je mimo uzavírací interval nebo pomalé zmenšování intervalu) je použit jeden krok bisekce

- kombinuje jistotu bisekce s rychlostí kvadratické metody

Newtonova – Raphsonova metoda využívající derivace

rozvoj funkce v řadu

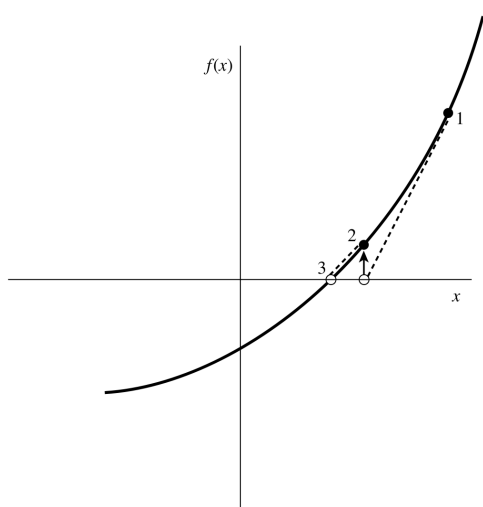
$$f(x + \delta) = f(x) + f'(x)\delta + f''(x)\frac{\delta^2}{2} + \dots$$

požadujeme

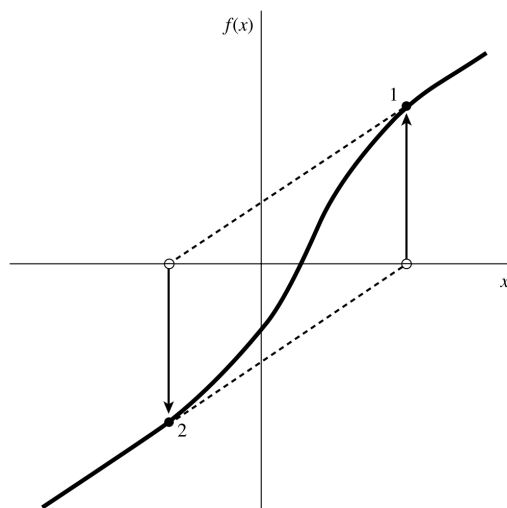
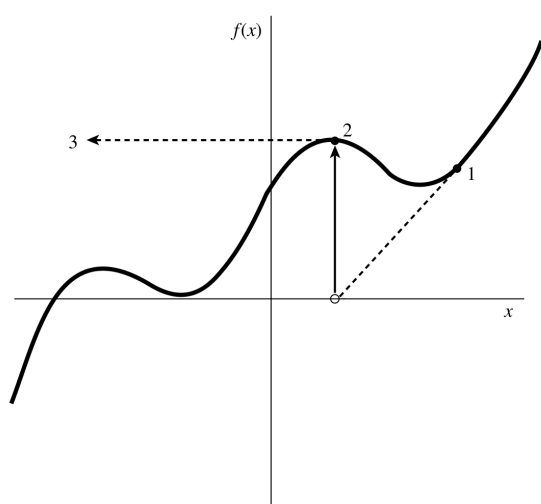
$$f(x + \delta) = 0$$

pro malé δ a dobře se chovající funkce

$$\delta = -\frac{f(x)}{f'(x)} \quad (\text{extrapolace derivace})$$



- může selhat - výskyt lokálních maxim/minim v blízkosti kořene, iterace v cyklu



- hlavní výhoda: velmi rychlá konvergence v blízkosti kořene

$$|\epsilon_{n+1}| = \epsilon_n^2 \left| \frac{f''(x)}{2f'(x)} \right|$$

- počet platných cifer se každým krokem přibližně zdvojnásobí
- možno kombinovat s bisekcí k dosažení lepší globální konvergence

Kořeny polynomů

- problémy s uzavíráním kořenů
- pomalá konvergence iteračních metod kvůli násobnosti kořenů

Laguerrova metoda

- najde jeden kořen x_1
- zjednodušení polynomu (faktorizace): $P(x) = (x - x_1)Q(x)$

$$P(x) = (x - x_1)(x - x_2) \cdots (x - x_n)$$

derivace

$$\frac{d \ln|P(x)|}{dx} = \frac{1}{x - x_1} + \frac{1}{x - x_2} + \cdots + \frac{1}{x - x_n} \equiv G$$

$$\frac{-d^2 \ln|P(x)|}{dx^2} = \frac{1}{(x - x_1)^2} + \frac{1}{(x - x_2)^2} + \cdots + \frac{1}{(x - x_n)^2} \equiv H$$

předpoklad:

$$x - x_1 = a, \quad x - x_i = b, \quad i = 2, 3, \dots$$

dostaneme

$$\frac{1}{a} + \frac{n-1}{b} = G$$

$$\frac{1}{a^2} + \frac{n-1}{b^2} = H$$

získáme odhad kořene $x_1 \approx x - a$

$$a = \frac{n}{G \pm \sqrt{(n-1)(nH - G^2)}}$$

opakujeme dokud není a dostatečně malé

postupy založené na vlastních číslech

- uvažujme x, \mathbf{v} , vlastní číslo a vlastní vektor matice A

$$(A - x \mathbf{1})\mathbf{v} = \mathbf{0}$$

- vlastní vektor patří do jádra matice $A - x \mathbf{1}$, takže matice $A - x \mathbf{1}$ je singulární
- vlastní čísla matice $A \rightarrow$ kořeny charakteristického polynomu $P(x) = \det[A - x \mathbf{1}]$
- výpočet kořenů polynomu je převeden na výpočet vlastních čísel speciální matice

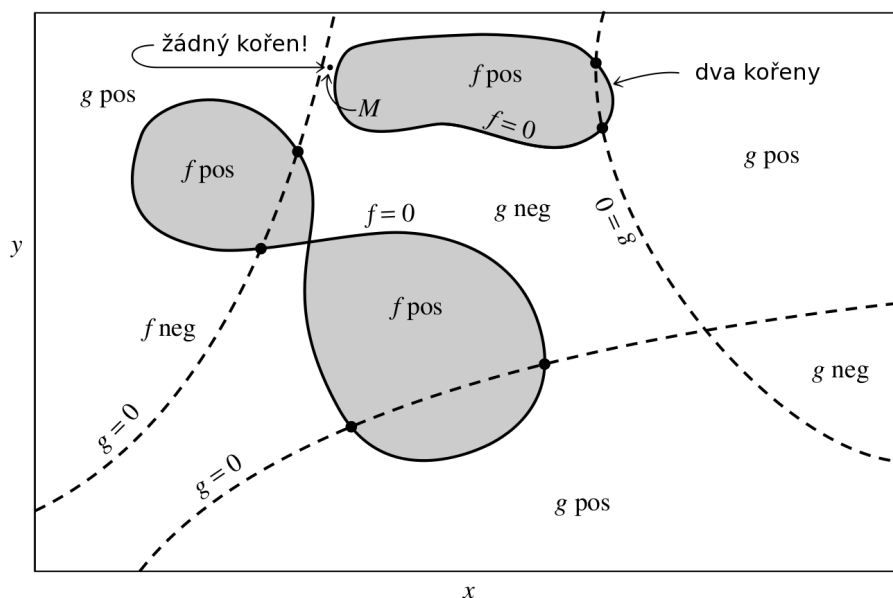
Nelineární systémy rovnic

- chybí efektivní metody řešení soustav více nelineárních rovnic
- obvykle je třeba něco vědět o existenci a poloze kořenů

př. kořeny soustavy

$$f(x, y) = 0$$

$$g(x, y) = 0$$



Newtonova-Raphsonova metoda pro soustavy rovnic

soustava

$$f_i(x_1, x_2, \dots, x_N) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, N$$

vektor levých stran

$$\mathbf{f} = \begin{pmatrix} f_1(\mathbf{x}) \\ f_2(\mathbf{x}) \\ \vdots \\ f_N(\mathbf{x}) \end{pmatrix}$$

Jacobián

$$J_{ij} \equiv \frac{\partial f_i}{\partial x_j}$$

rozvoj v okolí \mathbf{x}

$$\mathbf{f}(\mathbf{x} + \delta \mathbf{x}) = \mathbf{f}(\mathbf{x}) + \mathbf{J} \delta \mathbf{x}$$

Newtonův krok

požadujeme

$$\mathbf{f}(\mathbf{x} + \delta \mathbf{x}) = \mathbf{0}$$

dostaneme

$$\mathbf{J} \delta \mathbf{x} = -\mathbf{f}$$

řešení $\delta \mathbf{x}$ najdeme použitím LU rozkladu

nový odhad kořene: $\mathbf{x} + \delta \mathbf{x}$

proces se opakuje - kontrola konvergence v každém kroku – mohou nastat problémy s konvergencí

zajištění globální konvergence Newtonovy metody

kritérium konvergence

$$F = \frac{\mathbf{f}^T \mathbf{f}}{2} = \frac{1}{2} \sum_i f_i^2 \geq 0$$

ukážeme, že směr Newtonova kroku $\delta \mathbf{x}$ je směr poklesu F

$$(\nabla F)_j = \frac{\partial F}{\partial x_j} = \sum_i f_i \frac{\partial f_i}{\partial x_j} = \sum_i f_i J_{ij} = \sum_i (\mathbf{J}^T)_{ji} f_i$$

vektorově

$$\nabla F = \mathbf{J}^T \mathbf{f}$$

pokles F ve směru $\delta \mathbf{x}$

$$(\nabla F)^T \delta \mathbf{x} = (\mathbf{f}^T \mathbf{J}) (-\mathbf{J}^{-1} \mathbf{f}) = -\mathbf{f}^T \mathbf{f} < 0$$

- $\delta \mathbf{x}$ je směr poklesu F :
- postup
 - provést plný krok a zkontrolovat, zda došlo zmenšení kritéria F – kvadratická konvergence v blízkosti kořene
 - v opačném případě zkrátit délku kroku $\delta \mathbf{x} \rightarrow \alpha \delta \mathbf{x}$, $0 < \alpha < 1$