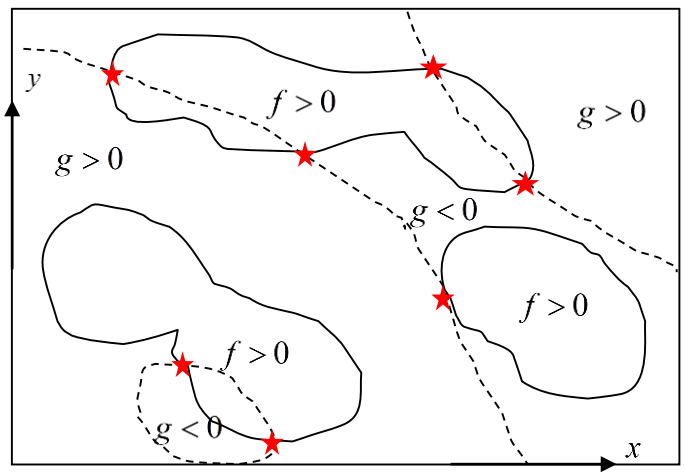
מציאת שורש במספר ממדים[1]

מחפשים פתרון ל $F_i\left(\{x_j\}_1^n\right)$ עבור $i=1\cdots n$ לדוגמה עבור $n=2$ מחפשים $x,y$ הפותרים בו זמנית את המשוואות $g(x,y)=0$ ; $f(x,y)=0$ . פתרון כללי ומציאת כל השורשים כלומר החיתוכים של הקונטורים $g=0$ , $f=0$ מחייב בעצם מיפוי של כל הקונטורים וזאת כי אין קשר בין $f$ ו- $g$ ו"מבחינת" $f$ אין שום דבר מיוחד בנקודות בהן גם $g=0$ ולהיפך. בגלל שהפונקציות מוגדרות במרחב דו-ממדי אין אפשרות ל"ציד אריות". יחד עם זאת, כאשר נמצאים בסביבת פתרון ניתן לבצע איטרציות ניוטון-רפסון (NR), בדומה למציאת שורש בממד אחד. נפתח לטור: $F_i\left(\bar{\mathbf{x}}+\bar{\boldsymbol{\delta}}\right)=F_i\left(\bar{\mathbf{x}}\right)+\left(\partial_j F_i\right)\cdot\bar{\boldsymbol{\delta}}+O\left(\left|\bar{\boldsymbol{\delta}}\right|^2\right)$ כאשר $\left(\partial_j F_i\right)$ היא מטריצת היעקוביאן $\mathbf{J}$ . נדרוש ש: $F_i\left(\bar{\mathbf{x}}+\bar{\boldsymbol{\delta}}\right)=0$ ומכאן נקבל את $\bar{\boldsymbol{\delta}}$ מתוך פתרון מערכת המשוואות הליניארית $\mathbf{J}\bar{\boldsymbol{\delta}}=-\bar{\mathbf{F}}\left(\bar{\mathbf{x}}\right)$ . כאשר הניחוש הנוכחי אינו קרוב מספיק NR עלול להתבדר. דרך אפשרית להתגבר על הבעיה היא על ידי הגדרת מדד לטיב הניחוש שהוא: $f(x)=\frac{1}{2}\bar{\mathbf{F}}\cdot\bar{\mathbf{F}}$ , ברור שכל פתרון של $\bar{\mathbf{F}}\left(\bar{\mathbf{x}}\right)=0$ הוא נקודת מינימום של $f(x)$ (אך לא להיפך !!!, לכן לא כדאי להפוך את בעיית מציאת שורשים לבעיה של חיפוש מינימום כללי של $f$ ).




ניתן לראות שהליכה בכיוון הצעד של NR אמורה להקטין את $f$ : השינוי ב $f$ בהליכה של צעד $\delta\bar{\mathbf{x}}$ קטן מספיק הוא מכפלה סקלארית של הצעד בגראדיאנט: $\bar{\nabla}f\cdot\delta\bar{\mathbf{x}}=\left(\bar{\mathbf{F}}\cdot\mathbf{J}\right)\cdot\alpha\left(-\mathbf{J}^{-1}\cdot\bar{\mathbf{F}}\right)=-\alpha\bar{\mathbf{F}}\cdot\bar{\mathbf{F}}<0$ כאשר הנחנו ש $\delta\bar{\mathbf{x}}=\alpha\left(-\mathbf{J}^{-1}\cdot\bar{\mathbf{F}}\right)$ כלומר צעד קטן בכיוון NR. לכן האלגוריתם הכללי הוא לחשב צעד של NR, כלומר $\bar{\mathbf{x}}_{\mathbf{new}}=\bar{\mathbf{x}}_{\mathbf{old}}+\left(-\mathbf{J}^{-1}\left(\bar{\mathbf{x}}_{\mathbf{old}}\right)\cdot\mathbf{F}\left(\bar{\mathbf{x}}_{\mathbf{old}}\right)\right)$ ואז אם $f\left(\bar{\mathbf{x}}_{\mathbf{new}}\right)<f\left(\bar{\mathbf{x}}_{\mathbf{old}}\right)$ נקבל את הניחוש $\bar{\mathbf{x}}_{\mathbf{new}}$ אחרת נחפש נקודה אחרת $\bar{\mathbf{x}}_{\mathbf{b}}$ על הקטע בין $\bar{\mathbf{x}}_{\mathbf{old}}$ ל- $\bar{\mathbf{x}}_{\mathbf{new}}$ עבורה מתקיים $f\left(\bar{\mathbf{x}}_{\mathbf{b}}\right)<f\left(\bar{\mathbf{x}}_{\mathbf{old}}\right)$ ומובטח לנו שנמצא נקודה שכזו.

[1] מבוסס על סעיפים 9.6 ו-9.7 ב-Numerical Recipes

לצורך מציאת נקודה לאורך קו ניתן לבצע חיפוש מינימום חד-ממדי על $g(\lambda)=f(\bar{\mathbf{x}}_{\mathbf{old}}+\lambda\bar{\mathbf{p}})$ כאשר $\bar{\mathbf{p}}=\delta\bar{\mathbf{x}}=-\mathbf{J}^{-1}\cdot\bar{\mathbf{F}}$ כאשר אנו יודעים ש $g(\lambda=1)>g(\lambda=0)$ ומובטח לנו שיש מינימום בקטע $[0,1]$.

למעשה לא כדאי "לבזבז" חישובים רבים של $f(x)$ על מנת למצוא את המינימום (מכיוון שבכל מקרה אנו מחשבים צעדי NR נוספים), וכדאי להסתפק בפחות איטרציות בתנאי שמוצאים $\bar{\mathbf{x}}_{\mathbf{b}}$ קביל. מסתבר שכדאי לדרוש $f(\bar{\mathbf{x}}_{\mathbf{b}})\le f(\bar{\mathbf{x}}_{\mathbf{old}})+\varepsilon\bar{\nabla}f\cdot(\bar{\mathbf{x}}_{\mathbf{b}}-\bar{\mathbf{x}}_{\mathbf{old}})$ כאשר $\varepsilon\approx 10^{-4}$ להלן יפורט אלגוריתם יעיל: בהתחלה נתון $g(\lambda=0)$ וכן $g'(\lambda=0)$ שהרי $g'(\lambda)=\bar{\nabla}f\cdot\bar{\mathbf{p}}$ אם $g(\lambda=1)$ אינו קביל אזי נניח תלות ריבועית של $g(\lambda)$ העוברת דרך הערכים הידועים ב- $\lambda=1$ , $\lambda=0$ וכן משתמשת בשיפוע ב- $\lambda=0$:

$$g(\lambda)\approx\left[g(1)-g(0)-g'(0)\right]\lambda^2+g'(0)\lambda+g(0)$$

ואז המינימום יהיה ב- $\lambda=-\dfrac{g'(0)}{2\left[g(1)-g(0)-g'(0)\right]}$ עבור $\varepsilon$ קטן ניתן להראות ש- $\lambda\le\frac{1}{2}$ ובנוסף נדרוש $\lambda_{\min}=\frac{1}{10}$. אם $\lambda$ זה אינו טוב, נשתמש ב- $g(\lambda_2),g(\lambda_1),g'(0),g(0)$ כדי להעביר פולינום ממעלה שלישית, כאשר $\lambda_1$ הוא ה- $\lambda$ האחרון ו- $\lambda_2$ הוא זה שלפניו: $g(\lambda)\approx a\lambda^3+b\lambda^2+g'(0)\lambda+g(0)$ כאשר המקדמים מתקבלים מהמשואות הבאות:

$$\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}=\frac{1}{\lambda_1-\lambda_2}\begin{pmatrix}1/\lambda_1^2 & -1/\lambda_2^2\\ -\lambda_2/\lambda_1^2 & \lambda_1/\lambda_2^2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}g(\lambda_1)-g'(0)\lambda_1-g(0)\\ g(\lambda_2)-g'(0)\lambda_2-g(0)\end{pmatrix}$$

והמינימום מתקבל ב- $\lambda=\dfrac{-b+\sqrt{b^2-3ag'(0)}}{3a}$ ובנוסף נדרוש $\lambda_{\min}=\frac{1}{10}\lambda_1\le\lambda\le\lambda_{\max}=\frac{1}{2}\lambda_1$,

כלומר, אם הערך המתקבל מפתרון המשוואה הריבועית חורג מערכים אלו יש להשתמש בערכי הקצה.