Metody Obliczeniowe w Nauce i Technice

7. Równania nieliniowe (non-linear equations)

Marian Bubak, Katarzyna Rycerz

Department of Computer Science
AGH University of Science and Technology
Krakow, Poland
kzajac@agh.edu.pl
dice.cyfronet.pl

Contributors
Dawid Prokopek
Paweł Matejko
Kamil Doległo

Plan wykładu

Wstęp

Szukamy pierwiastków równań typu

$$f(x) = 0 \quad \text{(1 zmienna)}$$

$f(x)$: - o wartościach rzeczywistych
- ciągła

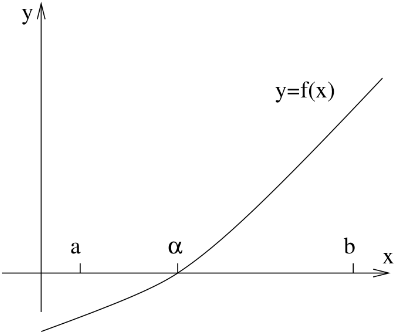
Pierwiastek - liczba α : $f(\alpha) = 0$

Np:

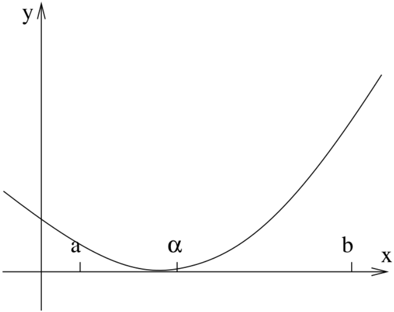
1. $e^{-x} - \sin(x) = 0$
2. $x^3 - 3x + 1 = 0 \quad \rightarrow \quad$ zera wielomianu (przypadek szczególny)

Istota - znajomość $f(x)$: papier, ołówek, kalkulator! - warto na początku!

Wstęp

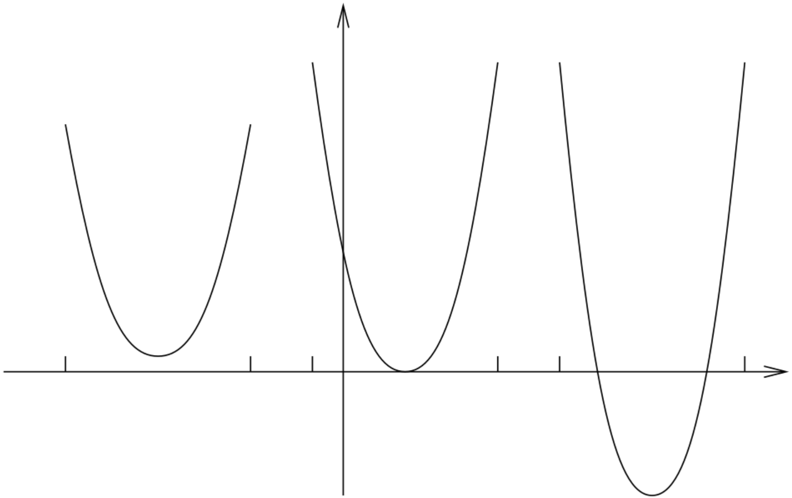


simple, isolated

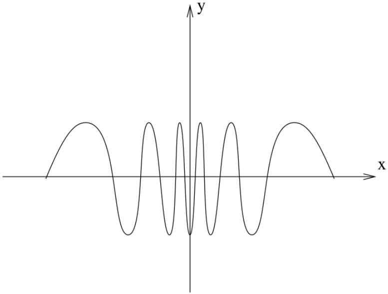


not simple

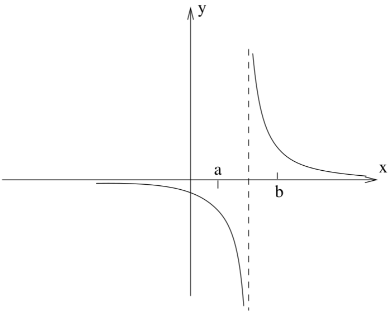
Wstęp



Wstęp



not isolated



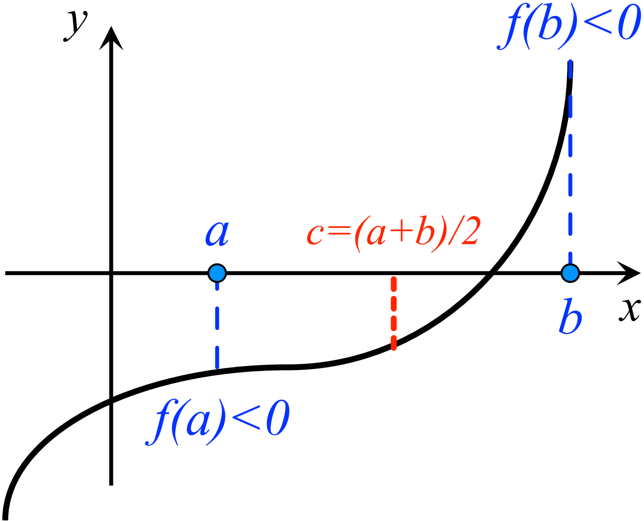
singularity

Wstęp

Należy więc:

- znać przebieg $f(x)$
- "bracket a root"
  $\longrightarrow$ przedział, w którym zmiana znaku funkcji,
- nie dopuszczać "wyjść" poza ustalony przedział.
- procedura szukania α **nie może** być "czarną skrzynką" dla jej użytkownika!

Metoda bisekcji (połowienia)



Metoda bisekcji (połowienia)

Dane: $a < b : \quad f(a) \cdot f(b) < 0$

N - liczba iteracji (ustalona)

$d := b - a$

for i := 1 to N do

- c := (a + b) / 2
- f(c) · f(a)

< 0	> 0
b := c	a := c

α := c

E := d/2^N

detekcja f(c) = 0

α : początkowo : w $[a_0, b_0]$ więc błąd $\sim b_0$ - a_0

po N krokach : w $[a_N, b_N]$ więc błąd $\Rightarrow$

$$E = b_N - a_N = \frac{b_{N-1} - a_{N-1}}{2} = \ldots = \frac{b_0 - a_0}{2^N}$$

Metoda bisekcji (połowienia)

Charakterystyka:

- gwarancja zbieżności
- wolno zbieżna $\leftarrow$ wykorzystywana informacja: znak funkcji
- $>$ niż 1 zero $\rightarrow$ znajduje jedno z nich
- kryterium zbieżności:
    - $E \approx 10^{-6} \rightarrow$ dobre dla $|\alpha| \sim 1$, złe $\rightarrow |\alpha| \sim 10^{-26}$
    - zwykle: $E = \epsilon \cdot \frac{a_0+b_0}{2}$ $\quad \epsilon$ - maszynowe

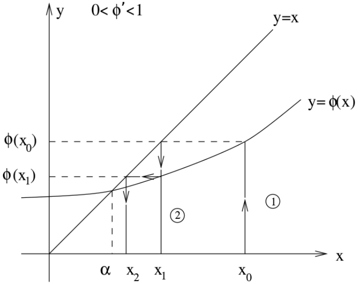
Metody iteracyjne $x = \phi(x)$

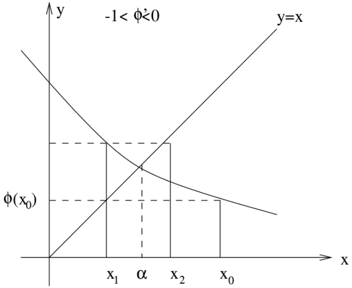
Uwaga: $f(x) = 0$ można zapisać jako $x = \phi(x)$ na nieskończoną liczbę sposobów, np.:
$x + \ln(x) = 0 \rightarrow x = -\ln(x), \quad x = e^{-x}, \quad \ldots$
$x^3 - 3x + 1 = 0 \rightarrow x = \frac{1}{3}(x^3 + 1), x = \frac{1}{3 - x^2}, x = (1-k) \cdot x + \frac{k}{3}(x^3 + 1)$
Istota metod iteracyjnych:

- zapisujemy nasz problem jako $\boxed{x = \phi(x)}$
- x_0 - przyjmujemy początkowe przybliżenie pierwiastka α
- generujemy ciąg $\{x_i\}$ stosując proces iteracyjny:

$$x_i = \phi(x_{i-1}), \quad i = 1, 2, \ldots$$

Metody iteracyjne $x = \phi(x)$





Twierdzenie o zbieżności procesu iteracyjnego $x_{i+1} = \phi(x_i)$

Twierdzenie

Niech:

1. $x = \phi(x)$ ma pierwiastek α
2. na przedziale $I = [\alpha - a, \alpha + a]$ zachodzi $|\phi'(x)| \leqslant L < 1$, gdzie L jest stałą

Wtedy: dla dowolnego $x_0 \in I$:

1. $x_i \in I$, $i = 1, 2, \ldots$
2. $\lim_{i\to\infty} x_i = \alpha$
3. α jest jedynym pierwiastkiem $x = \phi(x)$ w I

Twierdzenie o zbieżności procesu iteracyjnego $x_{i+1} = \phi(x_i)$

Dowód:

1. Niech $x_{i-1} \in I$

$$x_i - \alpha = \phi(x_{i-1}) - \phi(\alpha)$$

z Tw. o wartości średniej; $\exists \eta_{i-1} \in I$

$$\phi'(\eta_{i-1}) = \frac{\phi(x_{i-1}) - \phi(\alpha)}{x_{i-1} - \alpha}$$

$$x_i - \alpha = \phi(x_{i-1}) - \phi(\alpha) = (x_{i-1} - \alpha) \cdot \phi'(\eta_{i-1})$$

$$|x_i - \alpha| = |x_{i-1} - \alpha| \cdot |\phi'(\eta_{i-1})| \leqslant |x_{i-1} - \alpha| \cdot L \qquad \Rightarrow x_i \in I \quad (*)$$

2. $(*)$ używamy wielokrotnie

$$|x_i - \alpha| \leqslant L \cdot |x_{i-1} - \alpha| \leqslant L^2 \cdot |x_{i-2} - \alpha| \leqslant \ldots \leqslant L^i \cdot |x_0 - \alpha|$$

$$L < 1,\ \lim_{i\to\infty} L^i = 0 \quad \Rightarrow \quad \lim_{i\to\infty} |x_i - \alpha| = 0$$

3. Niech w I oprócz pierwiastka α będzie pierwiastek β

$$\alpha - \beta = \phi(\alpha) - \phi(\beta) = (\alpha - \beta) \cdot \phi'(\eta)$$

$$|\alpha - \beta| = |\alpha - \beta| \cdot \underbrace{|\phi'(\eta)|}_{<1} < |\alpha - \beta| \qquad \to \text{sprzeczność!}$$

Rząd zbieżności procedury iteracyjnej $x_i = \phi(x_{i-1})$

1. $\{x_i\}$ - zbieżność do α
2. "szybkość" zbieżności $\left|\frac{\epsilon_i}{\epsilon_{i-1}}\right| = ?$

$$\epsilon_i = x_i - \alpha = \phi(x_{i-1}) - \phi(\alpha)$$

rozwinięcie względem α

$$\phi(x_{i-1}) = \phi(\alpha) + \sum_{j=1}^{p-1} \frac{1}{j!} \underbrace{(x_{i-1} - \alpha)^j}_{\epsilon_{i-1}} \cdot \phi^{(j)}(\alpha) + \frac{1}{p!}(x_{i-1} - \alpha)^p \cdot \phi^{(p)}(\eta_{i-1})$$

$\eta_{i-1} \in (x_{i-1}, \alpha)$

$$\epsilon_i = \sum_{j=1}^{p-1} \frac{1}{j!} \epsilon_{i-1}^j \cdot \phi^{(j)}(\alpha) + \frac{\epsilon_{i-1}^p}{p!} \phi^{(p)}(\eta_{i-1})$$

Rząd zbieżności procedury iteracyjnej $x_i = \phi(x_{i-1})$

Jeżeli: $\phi'(\alpha) = \phi''(\alpha) = \ldots = \phi^{(p-1)}(\alpha) = 0, \quad \phi^{(p)}(\alpha) \neq 0$

to: $\epsilon_i = \frac{\epsilon_{i-1}^p}{p!}\phi^{(p)}(\eta_{i-1})$

$\lim_{i\to\infty}|\frac{\epsilon_i}{\epsilon_{i-1}^p}| = \frac{1}{p!}|\phi^{(p)}(\alpha)|$

$|\frac{\epsilon_i}{\epsilon_{i-1}^p}|$ - *p-ty rząd zbieżności (p-th order of convergence)*

$\frac{1}{p!}|\phi^{(p)}(\alpha)|$ - stała asymptotyczna błędu (asymptotic error constant)

p = 1 - linear
2 - quadratic
3 - cubic

Rząd zbieżności procedury iteracyjnej $x_i = \phi(x_{i-1})$

Można konstruować metody iteracyjne $x_i = \phi(x_{i-1})$ dowolnego rzędu p - lecz: konieczne wyliczanie 0, 1, ..., $p-1$ pochodnych: np. Richmond's:

$$x_i = x_{i-1} - \frac{2 \cdot f(x_{i-1}) \cdot f'(x_{i-1})}{2 \cdot (f'(x_{i-1}))^2 - f(x_{i-1}) f''(x_{i-1})}$$

Metoda Newtona-Raphsona

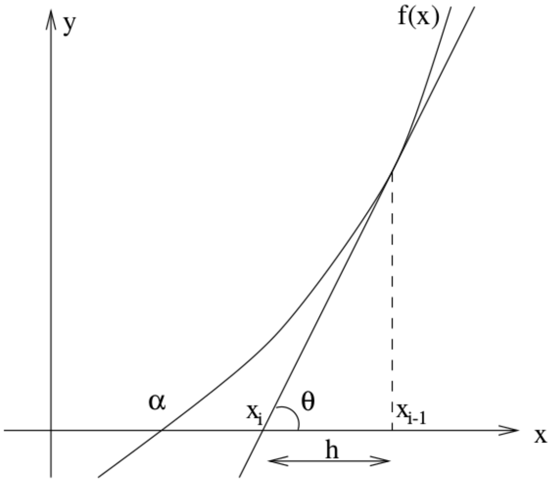
$f(x) = 0$, α - prosty pierwiastek
x_{i-1} - przybliżenie α
niech $\alpha = x_{i-1} + h$

$$f(\alpha) = 0 = f(x_{i-1} + h) = f(x_{i-1}) + h \cdot f'(x_{i-1}) + \underbrace{\cdots}_{\text{pomijamy}}$$

$$h = -\frac{f(x_{i-1})}{f'(x_{i-1})}$$

$$\boxed{x_i = x_{i-1} - \frac{f(x_{i-1})}{f'(x_{i-1})}}$$

Metoda Newtona-Raphsona



Metoda Newtona-Raphsona

$$\frac{f(x_{i-1})}{h} = \mathrm{tg}(\theta) = f'(x_{i-1})$$

wzór iteracyjny: $x = \phi(x)$, czyli $\rightarrow \phi(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)}$

Warunek zbieżności: $\phi'(x) = \frac{f''(x) \cdot f(x)}{(f'(x))^2}$ dla $x = \alpha : f'(\alpha) \neq 0$, $\phi'(\alpha) = 0$ bo $f(\alpha) = 0$

Powinno istnieć otoczenie α, w którym $|\phi'(x)| < 1$ tj. przy odpowiednim doborze x_0 met. N-R jest zawsze zbieżna do α

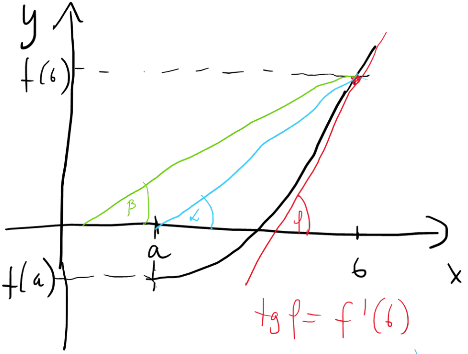
Twierdzenie o wyborze przedziału dla m. N-R

Jeżeli: $I = [a, b]$ w którym:

1. $f(a) \cdot f(b) < 0$ - jest min. 1 pierwiastek
2. $f'(x) \neq 0,\ x \in I$ - pierwiastek 1-krotny
3. $f''(x) \geqslant 0$ lub $f''(x) \leqslant 0$ dla wszystkich $x \in I$
   (convex - wypukła) (concave = wklęsła)
4. $|\frac{f(a)}{f'(a)}| < (b - a)$ i $|\frac{f(b)}{f'(b)}| < (b - a)$ - styczna przecina oś x w I

to: metoda N-R jest zbieżna dla dowolnego $x_0 \in I$ do α

Geometryczna interpretacja



$$\operatorname{tg}\varphi = f'(b)$$

$$\operatorname{tg}\alpha = \frac{f(b)}{b-a}$$

$$\varphi > \alpha$$

$$f'(b) > \frac{f(b)}{b-a}$$

$$\frac{f(b)}{f'(b)} < b-a$$

Rząd zbieżności metody N-R

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

$$\phi'(x) = \frac{f(x) \cdot f''(x)}{(f'(x))^2}; \quad \phi'(\alpha) = 0$$

$$\phi''(x) = \frac{f'(x) \cdot f''(x)}{(f'(x))^2} + f(x) \cdot \left(\frac{f''(x)}{(f'(x))^2}\right)'; \quad \phi''(\alpha) \neq 0$$

- tylko pierwsza pochodna jest równa 0, więc mamy 2gi rząd tzn: $\epsilon_i \sim \epsilon_{i-1}^2$ błąd maleje kwadratowo z ilością iteracji

Warunek zakończenia dla m. N-R

w procedurach bibliotecznych - **rozbudowane zabezpieczenia wyznaczanie:**

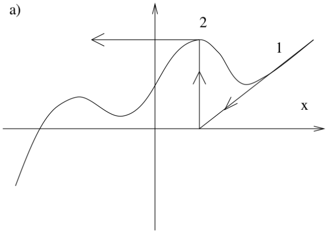
- $\frac{|x_i - x_{i-1}|}{|x_i|}$

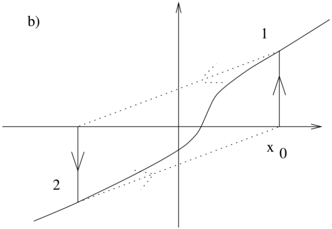
- $|f(x_i)|$

-ustalona maksymalna liczba iteracji

Warunek zakończenia dla m. N-R

Niebezpieczeństwa:





a) lokalne ekstrema
b) rozbieżny cykl iteracji
często stosowana kombinacja: bisekcja (gdy kłopoty) + N-R

Przyspieszanie zbieżności - metoda Aitkena

Stosowana aby polepszyć zbieżność dla metody o zbieżności liniowej

x_i, x_{i+1}, x_{i+2} - kolejne iteracje

$$x_i - \alpha = \phi(x_{i-1}) - \phi(\alpha) = (x_{i-1} - \alpha) \cdot \phi'(\eta_{i-1}), \quad \eta_{i-1} \in (x_{i-1}, \alpha)$$

$$x_{i+2} - \alpha = (x_{i+1} - \alpha) \cdot \phi'(\eta_{i+1})$$

$$x_{i+1} - \alpha = (x_i - \alpha) \cdot \underbrace{\phi'(\eta_i)}_{(*)}$$

Założenie: $(*)$ - nieznane, ale dla dwóch kolejnych iteracji blisko rozwiązania $\phi'(\eta_i) \approx \phi'(\eta_{i+1})$ ($\phi'(\eta_i)$ dąży do stałej asymptotycznej błędu)

Przyspieszanie zbieżności - metoda Aitkena

$$\frac{x_{i+2}-\alpha}{x_{i+1}-\alpha} = \frac{x_{i+1}-\alpha}{x_i-\alpha}$$

$$\alpha = \frac{x_i \cdot x_{i+2} - x_{i+1}^2}{x_{i+2} - 2 \cdot x_{i+1} + x_i} = x_i - \frac{(x_{i+1}-x_i)^2}{x_{i+2} - 2 \cdot x_{i+1} + x_i}$$

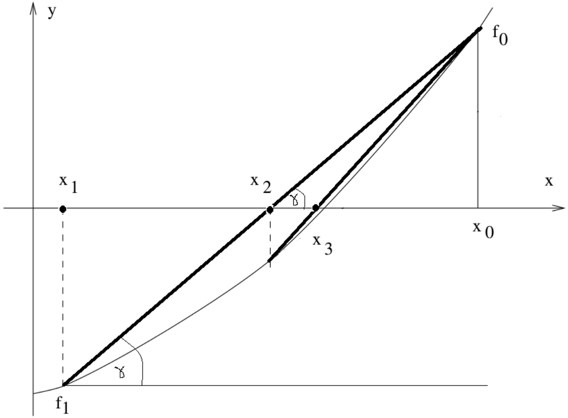
Na tej podstawie mamy wzór na nowe, lepsze przybliżenie x^*_{i+2}

$$\boxed{x^*_{i+2} = x_i - \frac{(x_{i+1}-x_i)^2}{x_{i+2}-2\cdot x_{i+1}+x_i} \longrightarrow (*)}$$

$(*)$ - zbieżność kwadratowa bez obliczania 2-gich pochodnych

.

Metody interpolacyjne - Regula falsi



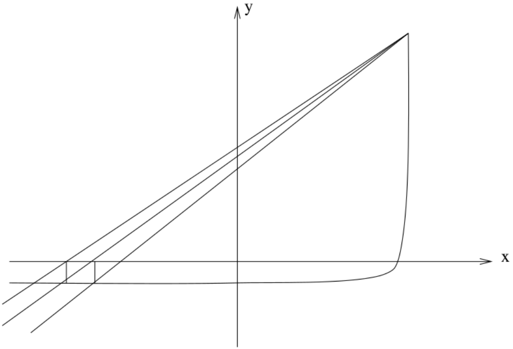
Regula falsi

1. Startujemy mając punkty x_0, x_1 takie, że $f(x_0) \cdot f(x_1) < 0$
2. przez punkty x_0 i x_1 prowadzimy prostą i znajdujemy jej punkt przecięcia x_2 z osią OX:
$$\frac{f(x_0)-f(x_1)}{x_0-x_1} = \frac{f(x_0)}{x_0-x_2} \Rightarrow x_2 = \frac{f(x_1)}{f(x_1)-f(x_0)}x_0 + \frac{f(x_0)}{f(x_0)-f(x_1)}x_1$$
3. sprawdzamy po której stronie osi OX znajduje się $f(x_2)$
Punkty do kolejnej interacji wybieramy tak, aby leżały po różnych stronach osi OX: $\left.\begin{array}{l} f(x_1) \cdot f(x_2) < 0 \\ f(x_0) \cdot f(x_2) < 0 \end{array}\right\} \Rightarrow x_3 \ldots$

- wolno zbieżna do poj. pierwiastka (zbieżność liniowa)

Regula falsi

Wyjątkowo trudny przypadek:

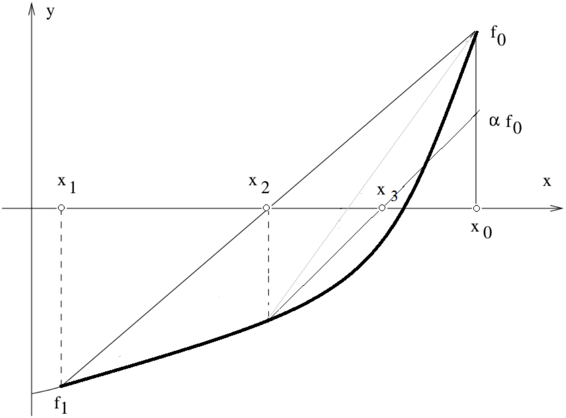


wszystkie iteracje po tej samej stronie pierwiastka

Metody Illinois i Pegasus - ulepszenie RF

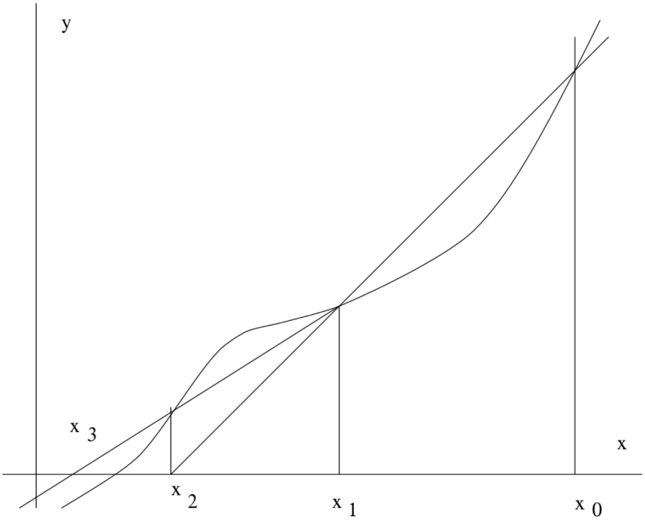
1. Jeśli mamy x_i, x_{i+1}, x_{i+2} takie że
$$\begin{cases} f(x_i) \cdot f(x_{i+1}) & < 0 \leftarrow \text{obejmują pierwiastek} \\ \mathrm{f}(\mathrm{x}_{i+1}) \cdot f(x_{i+2}) & > 0 \end{cases}$$
Czyli najnowsza wartość $f(x_{i+2})$ jest po tej samej stronie osi OX co poprzednia $f(x_{i+1})$
2. stosujemy RF korzystając ze starszego punktu x_i, czyli dla punktów x_i, x_{i+2} ale ze zmodyfikowaną starszą wartością : $f(x_i) = f(x_i)^* = \alpha \cdot f(x_i)$
3. podobnie gdy
$$f_{i+2} \cdot f_{i+3} \begin{cases} < 0 \text{ - RF dla } x_{i+2},\, x_{i+3} \\ > 0 \text{ - zmodyfikowana RF dla } x_{i+1},\, x_{i+3} \end{cases}$$

Metody Illinois i Pegasus - ulepszenie RF



Illinois $\rightarrow \alpha = \frac{1}{2}$, **Pegasus** $\rightarrow \alpha = \frac{f_0}{f_1 + f_0}$

Metoda siecznych



Metoda siecznych

- startujemy z (x_0, x_1)
- $f_0 \cdot f_1$ - nie badamy
linie prosta (x_0, f_0), (x_1, f_1) ...

$$x_{i+2} = x_{i+1} - \underbrace{\frac{x_{i+1} - x_i}{f_{i+1} - f_i}}_{(*)} \cdot f_{i+1}$$

Dziala jak N-R, ale z przybliżoną wartością $f'(x_i)$ za pomocą ilorazu różnicowego $(*)$

- rząd zbieżności ~ 1.62
- lepsza od RF
- gorsza od NR - lecz nie trzeba znać f' !

Metoda Steffensena

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{g(x_i)}$$

gdzie $g(x_i)$ to przybliżenie pochodnej poprzez iloraz różnicowy

$$\frac{f(x_i + f(x_i)) - f(x_i)}{f(x_i)}$$

- budujemy sieczną uzywając x_i, oraz $x_i + f(x_i)$
- x_{i+1} to punkt przecięcia tej siecznej z osią OX
- w kolejnym kroku budujemy sieczną używając x_{i+1} oraz $x_{i+1} + f(x_{i+1})$
- każdy krok wymaga policzenia dwóch nowych wartości funkcji (w metodzie siecznych od drugiego kroku tylko jednej)
- rząd zbieżności $=2$ (lepszy od metody siecznych)

Literatura

- B. N. Datta
  Numerical Methods for the Root Finding Problem
  http://www.math.niu.edu/~dattab/MATH435.2013/ROOT_FINDING.pdf
- C. T. Kelley
  Iterative Methods for Linear and Nonlinear Equations
  https://archive.siam.org/books/textbooks/fr16_book.pdf