Rezolvarea numerică a ecuațiilor neliniare

De aici începe adevărata Analiză numerică

Radu Trîmbițaș

UBB

26 mai 2017

Ecuații neliniare I

- Problema discutată în acest capitol se poate scrie generic sub forma
$$f(x) = 0, \tag{1}$$
dar admite diverse interpretări, depinzând de semnificația lui x și f.
- Cel mai simplu caz este cel al unei singure ecuații cu o singură necunoscută, caz în care f este o funcție dată de o variabilă reală sau complexă și încercăm să găsim valorile acestei variabile pentru care f se anulează. Astfel de valori se numesc *rădăcini* ale ecuației (1) sau *zerouri* ale funcției f.
- Dacă x din (1) este un vector, să zicem $x = [x_1, x_2, \ldots, x_d]^T \in \mathbb{R}^d$ și f este de asemenea un vector ale cărui componente sunt funcții de cele d variabile $x_1, x_2, \ldots, x_d$, atunci (1) reprezintă un *sistem de ecuații*.

Ecuații neliniare II

- Se spune că sistemul este *neliniar* dacă cel puțin una dintre componentele lui f depinde neliniar de cel puțin una din variabilele $x_1, x_2, \ldots, x_d$. Dacă toate componentele lui f sunt funcții liniare de $x_1, \ldots, x_d$ avem de-a face cu un sistem de ecuații algebrice liniare.
- Mai general (1) ar putea reprezenta o ecuație funcțională, dacă x este un element al unui spațiu de funcții și f este un operator (liniar sau neliniar) ce acționează pe acest spațiu. În fiecare din aceste situații zeroul din dreapta lui (1) poate avea diverse interpretări: numărul zero în primul caz, vectorul nul în al doilea și funcția identic nulă în cel de-al treilea.
- Mare parte din acest capitol este consacrată unei ecuații neliniare scalare. Astfel de ecuații apar frecvent în analiza sistemelor în vibrație, unde rădăcinile corespund frecvențelor critice (rezonanță).

Ecuații neliniare III

- Cazul special al ecuațiilor algebrice, unde f din (1) este un polinom, este de importanță considerabilă și merită un tratament special.

Iterații, convergență și eficiență

- Nici chiar cele mai simple ecuații - de exemplu cele algebrice - nu admit soluții care să fie exprimabile prin expresii raționale sau radicali.
- Din acest motiv este imposibil, în general, să calculăm rădăcinile ecuațiilor neliniare printr-un număr finit de operații aritmetice. Este nevoie de o metodă iterativă, adică de o procedură care generează o secvență infinită de aproximații $\{x_n\}_{n\in\mathbb{N}}$ astfel încât

$$\lim_{n\to\infty} x_n = \alpha, \tag{2}$$

unde α este o rădăcină a ecuației.
- În cazul unui sistem x_k și α sunt vectori de dimensiune adecvată, iar convergența trebuie înțeleasă în sensul convergenței pe componente.
- În practică, ceea ce se dorește este o convergență rapidă.

Ordinul de convergență I

Conceptul de bază pentru măsurarea vitezei de convergență este ordinul de convergență.

Definiția 1

Spunem că x_n converge către α (cel puțin) liniar dacă

$$|x_n - \alpha| \leq e_n \tag{3}$$

unde $\{e_n\}$ este un șir pozitiv ce satisface

$$\lim_{n\to\infty} \frac{e_{n+1}}{e_n} = c, \quad 0 < c < 1. \tag{4}$$

Dacă (3) și (4) au loc cu egalitate în (3) atunci c se numește eroare asimptotică.

- Expresia „cel puțin" în această definiție se leagă de faptul că avem doar inegalitate în (3), ceea ce dorim în practică.

Ordinul de convergență II

- De fapt, strict vorbind, marginea e_n converge liniar, însemnând că, în final (pentru n suficient de mare) fiecare din aceste margini ale erorii este aproximativ o fracție constantă din precedenta.

Definiția 2

Se spune că x_n converge către α (cel puțin) cu ordinul $p \geq 1$ dacă (3) are loc cu

$$\lim_{n\to\infty} \frac{e_{n+1}}{e_n^p} = c, \quad c > 0 \tag{5}$$

- Astfel convergența de ordinul 1 coincide cu convergența liniară, în timp ce convergența de ordinul $p > 1$ este mai rapidă.

Ordinul de convergență III

- De notat că în acest ultim caz nu se pune nici o restricție asupra constantei c: odată ce e_n este suficient de mic, exponentul p va avea grijă de convergență. Și în acest caz, dacă avem egalitate în (3), c se numește *eroare asimptotică*.
- Aceleași definiții se aplică și șirurilor vectoriale, cu modulul înlocuit cu orice normă vectorială.
- Clasificarea convergenței în raport cu ordinul este destul de rudimentară, deoarece sunt tipuri de convergență la care definițiile (1) și (2) nu se aplică. Astfel, un șir $\{e_n\}$ poate converge către zero mai încet decât liniar, de exemplu dacă $c = 1$ în (4). Acest tip de convergență se numește *subliniară*. La fel, $c = 0$ în (4) conduce la convergență *superliniară*, dacă (5) nu are loc pentru nici un $p > 1$.

Ordinul de convergență IV

- Este instructiv să examinăm comportarea lui e_n, dacă în loc de relația la limită avem egalitate pentru un anumit n, să zicem

$$\frac{e_{n+1}}{e_n^p} = c, \quad n = n_0, n_0+1, n_0+2, \dots \tag{6}$$

- Pentru n_0 suficient de mare, relația (6) este aproape adevărată. Printr-o simplă inducție se obține că

$$e_{n_0+k} = c^{\frac{p^k-1}{p-1}} e_{n_0}^{p^k}, \quad k = 0, 1, 2, \dots, \tag{7}$$

care desigur are loc pentru $p > 1$, dar și pentru $p = 1$ când $p \downarrow 1$:

$$e_{n_0+k} = c^k e_{n_0}, \quad k = 0, 1, 2, \dots, \quad (p = 1) \tag{8}$$

Ordinul de convergență V

- Presupunând că e_{n_0} este suficient de mare astfel încât aproximarea x_{n_0} are un număr de zecimale corecte, scriem $e_{n_0+k} = 10^{-\delta_k} e_{n_0}$.
- Atunci δ_k, în conformitate cu (3) reprezintă numărul suplimentar de cifre zecimale corecte din aproximația x_{n_0+k} (în contrast cu x_{n_0}). Logaritmând (7) și (8) obținem

$$\delta_k = \begin{cases} k \log \frac{1}{c}, & \text{dacă } p = 1 \\ p^k \left[\frac{1-p^{-k}}{p-1} \log \frac{1}{c} + (1 - p^{-k}) \log \frac{1}{e_{n_0}} \right], & \text{dacă } p > 1 \end{cases}$$

- Deci când $k \to \infty$

$$\delta_k \sim c_1 k \quad (p = 1), \quad \delta_k \sim c_p p^k \quad (p > 1), \qquad (9)$$

Ordinul de convergență VI

unde $c_1 = \log \frac{1}{c} > 0$, dacă $p = 1$ și

$$c_p = \frac{1}{p-1} \log \frac{1}{c} + \log \frac{1}{e_{n_0}}$$

(presupunem că n_0 este suficient de mare și deci e_{n_0} suficient de mic, pentru a avea $c_p > 0$).

- Aceasta ne arată că numărul de cifre zecimale corecte crește liniar odată cu k când $p = 1$, dar exponențial când $p > 1$. În ultimul caz $\delta_{k+1}/\delta_k \sim p$ înseamnă că (pentru k mare) numărul de cifre zecimale corecte crește, pe iterație, cu un factor p.
- Dacă fiecare iterație necesită m unități de lucru (o ,,unitate de lucru'' este efortul necesar pentru a calcula o valoare a funcției sau a unei anumite derivate a sa), atunci *indicele de eficiență* al iterației poate fi definit prin

$$\lim_{k\to\infty} \left[\delta_{k+1}/\delta_k\right]^{1/m} = p^{1/m}.$$

Ordinul de convergență VII

- Aceasta ne dă o bază comună de comparare între diversele metode iterative. Metodele liniare au indicele de eficiență 1.

Criteriul de oprire I

- Calculele practice necesită o regulă de oprire care să termine iterația atunci când s-a obținut (sau se crede că s-a obținut) precizia dorită.
- Ideal, ne oprim atunci când $\|x_n - \alpha\| < tol$, tol dat.
- Deoarece α nu este cunoscut se obișnuiește să se înlocuiască $x_n - \alpha$ cu $x_n - x_{n-1}$ și se impune cerința ca

  $$\|x_n - x_{n-1}\| \leq tol \tag{10}$$

  unde

  $$tol = \|x_n\|\varepsilon_r + \varepsilon_a \tag{11}$$

  cu $\varepsilon_r, \varepsilon_a$ valori date ale erorii.
- Ca o măsură de siguranță, am putea cere ca (10) să aibă loc pentru mai multe valori consecutive ale lui n, nu doar pentru una singură.

Criteriul de oprire II

- Alegând $\varepsilon_r = 0$ sau $\varepsilon_a = 0$ se obține un test de eroare absolută sau relativă. Este totuși prudent să utilizăm un test mixt, cum ar fi, să zicem $\varepsilon_r = \varepsilon_a = \varepsilon$. Atunci, dacă $\|x_n\|$ este mic sau moderat de mare, se controlează efectiv eroarea absolută, în timp ce pentru $\|x_n\|$ foarte mare se controlează eroarea relativă.
- Testele de mai sus se pot combina cu $||f(x)|| \leq \varepsilon$. În algoritmii din acest capitol vom presupune că avem o funcție *crit_oprire* care implementează testul de oprire.

Metoda falsei poziții

- Ca în metoda înjumătățirii, presupunem că avem două numere $a < b$ astfel încât

$$f \in C[a, b], \quad f(a)f(b) < 0 \tag{12}$$

  și generăm un șir descendent de intervale $[a_n, b_n]$, $n = 1, 2, 3, \ldots$ cu $a_1 = a$, $b_1 = b$ astfel încât $f(a_n)f(b_n) < 0$.
- Spre deosebire de metoda înjumătățirii, pentru a determina următorul interval nu luăm mijlocul lui $[a_n, b_n]$, ci soluția $x = x_n$ a ecuației liniare

$$(L_1 f)(x; a_n, b_n) = 0.$$

- Aceasta pare să fie o alegere mai flexibilă decât în metoda înjumătățirii deoarece x_n va fi mai apropiat de capătul în care $|f|$ este mai mic (Vezi figura 1)

Metoda falsei poziții - algoritmul

Procedura decurge după cum urmează:

for $n := 1, 2, \ldots$ **do**
$$x_n := a_n - \frac{a_n - b_n}{f(a_n) - f(b_n)} f(a_n);$$
if $f(a_n) f(x_n) > 0$ **then**
$a_{n+1} := x_n;\ b_{n+1} := b_n;$
else
$a_{n+1} := a_n;\ b_{n+1} := x_n;$
end if
end for

Iterația se poate termina când $\min(x_n - a_n, b_n - x_n) \leq tol$, unde *tol* este o valoare dată.

Metoda falsei poziții - convergența I

- Convergența se analizează mai ușor dacă presupunem că f este convexă sau concavă pe $[a, b]$. Dacă f este convexă, avem

$$f''(x) > 0, \quad x \in [a, b], \quad f(a) < 0, \quad f(b) > 0. \quad (13)$$

- Șirul

$$x_{n+1} = x_n - \frac{x_n - b}{f(x_n) - f(b)} f(x_n), \quad n \in \mathbb{N}^*, \quad x_1 = a \tag{14}$$

  este monoton crescător și mărginit superior de α, deci convergent către o limită x, iar $f(x) = 0$.

- Viteza de convergență se determină scăzând α din ambii membri ai lui (14) și utilizând faptul că $f(\alpha) = 0$:

$$x_{n+1} - \alpha = x_n - \alpha - \frac{x_n - b}{f(x_n) - f(b)} [f(x_n) - f(\alpha)].$$

Metoda falsei poziții - convergența II

- Împărțind cu $x_n - \alpha$ avem

$$\frac{x_{n+1}-\alpha}{x_n-\alpha} = 1 - \frac{x_n - b}{f(x_n) - f(b)} \frac{f(x_n) - f(\alpha)}{x_n - \alpha}.$$

- Făcând $n \to \infty$ și utilizând faptul că $x_n \to \alpha$, obținem

$$\lim_{n\to\infty} \frac{x_{n+1}-\alpha}{x_n-\alpha} = 1 - (b-\alpha)\frac{f'(\alpha)}{f(b)}. \tag{15}$$

- Deci metoda converge liniar, cu eroarea asimptotică

$$c = 1 - (b-a)\frac{f'(\alpha)}{f(b)}.$$

- Datorită ipotezei convexității avem $c \in (0,1)$.
- Analog se face demonstrația în cazul când f este concavă.

Metoda falsei poziții - convergența III

- Dacă f nu este convexă sau concavă pe $[a, b]$, ci $f \in C^2[a, b]$ și $f''(\alpha) \neq 0$, f'' are semn constant pe o vecinătate a lui α și pentru un n suficient de mare x_n ajunge în acea vecinătate și se poate proceda ca mai sus.
- Dezavantaje. (i) Convergența lentă; (ii) Faptul că unul din capete poate rămâne fix. Dacă f este turtită în vecinătatea rădăcinii și a este apropiat de α și b depărtat convergența poate fi foarte lentă.

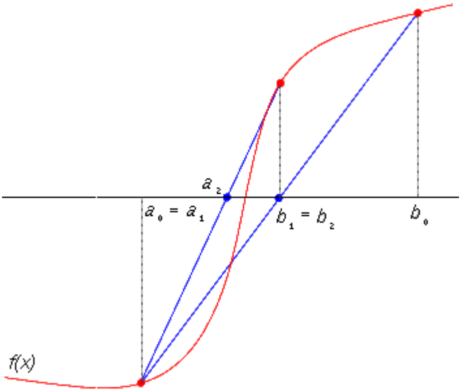


Figura: Metoda falsei poziţii

Metoda secantei I

- Este o variantă a metodei falsei poziții, în care nu se mai cere ca f să aibă valori de semne contrare, nici măcar la capetele intervalului inițial.
- Se aleg două valori arbitrare de pornire x_0, x_1 și se continuă cu

$$x_{n+1} = x_n - \frac{x_n - x_{n-1}}{f(x_n) - f(x_{n-1})} f(x_n), \quad n \in \mathbb{N}^* \tag{16}$$

- Aceasta preîntâmpină apariția unei false poziții și sugerează o convergență mai rapidă.
- Din păcate, nu mai are loc convergența ,,globală" pe $[a, b]$ ci doar convergența ,,locală", adică numai dacă x_0 și x_1 sunt suficient de apropiate de rădăcină.
- Vom avea nevoie de o relație între trei erori consecutive

Metoda secantei II

$$
\begin{aligned}
x_{n+1} - \alpha &= x_n - \alpha - \frac{f(x_n)}{f[x_{n-1}, x_n]} \\
&= (x_n - \alpha)\left(1 - \frac{f(x_n) - f(\alpha)}{(x_n - \alpha) f[x_{n-1}, x_n]}\right) \\
&= (x_n - \alpha)\left(1 - \frac{f[x_n, \alpha]}{f[x_{n-1}, x_n]}\right) \\
&= (x_n - \alpha)\frac{f[x_{n-1}, x_n] - f[x_n, \alpha]}{f[x_{n-1}, x_n]} \\
&= (x_n - \alpha)(x_{n-1} - \alpha)\frac{f[x_n, x_{n-1}, \alpha]}{f[x_{n-1}, x_n]}.
\end{aligned}
$$

Metoda secantei III

- Deci

$$(x_{n+1} - \alpha) = (x_n - \alpha)(x_{n-1} - \alpha)\frac{f[x_n, x_{n-1}, \alpha]}{f[x_{n-1}, x_n]}, \quad n \in \mathbb{N}^* \tag{17}$$

- Din (17) rezultă imediat că dacă α este o rădăcină simplă ($f(\alpha) = 0$, $f'(\alpha) \neq 0$) și $x_n \to \alpha$ și dacă $f \in C^2$ pe o vecinătate a lui α, convergența este superliniară.

Ordinul de convergență I

- Înlocuim raportul diferențelor divizate din (17) cu o constantă, ceea ce este aproape adevărat când n este mare. Punând $e_k = |x_k - \alpha|$, avem

$$e_{n+1} = e_n e_{n-1} C, \quad C > 0$$

- Înmulțind ambii membri cu C și punând $E_n = Ce_n$ obținem

$$E_{n+1} = E_n E_{n-1}, \quad E_n \to 0.$$

- Logaritmând și punând $y_n = \frac{1}{E_n}$ obținem

$$y_{n+1} = y_n + y_{n-1}, \tag{18}$$

care este recurența pentru șirul lui Fibonacci.

Ordinul de convergență II

- Soluția este
$$y_n = c_1 t_1^n + c_2 t_2^n,$$
c_1, c_2 constante și
$$t_1 = \frac{1}{2}(1+\sqrt{5}), \qquad t_2 = \frac{1}{2}(1-\sqrt{5}).$$
- Deoarece $y_n \to \infty$, avem $c_1 \neq 0$ și $y_n \sim c_1 t_1^n$, căci $|t_2| < 1$. Revenind la substituție $\frac{1}{E_n} \sim e^{c_1 t_1^n}$, $\frac{1}{e_n} \sim C e^{c_1 t_1^n}$ și deci
$$\frac{e_{n+1}}{e_n^{t_1}} \sim \frac{C^{t_1} e^{c_1 t_1^n t_1}}{C e^{c_1 t_1^{n+1}}} = C^{t_1-1}, \quad n \to \infty.$$
- Ordinul de convergență este
$$t_1 = \frac{1+\sqrt{5}}{2} \approx 1.61803\ldots \text{ (secțiunea de aur).}$$

Convergența metodei secantei I

Teorema 3

Fie α un zero simplu al lui f și fie $I_\varepsilon = \{x \in \mathbb{R} : \ |x - \alpha| < \varepsilon\}$ și presupunem că $f \in C^2[I_\varepsilon]$. Definim pentru ε suficient de mic

$$M(\varepsilon) = \max_{\substack{s \in I_\varepsilon \\ t \in I_\varepsilon}} \left| \frac{f''(s)}{2f'(t)} \right| . \tag{19}$$

Presupunem că

$$\varepsilon M(\varepsilon) < 1 \tag{20}$$

Atunci metoda secantei converge către rădăcina unică $\alpha \in I_\varepsilon$ pentru orice valoare de pornire $x_0 \neq x_1$ cu $x_0 \in I_\varepsilon$, $x_1 \in I_\varepsilon$.

Observația 4

Convergența metodei secantei II

Se observă că $\lim\limits_{\varepsilon\to 0} M(\varepsilon) = \left|\frac{f''(\alpha)}{2f'(\alpha)}\right| < \infty$, *deci (20) poate fi satisfăcută pentru* ε *suficient de mic. Natura locală a convergenței este cuantificată prin cerința ca* $x_0, x_1 \in I_\varepsilon$.

Demonstrație - pasul I

Se observă că α este *singurul zero* al lui f în I_ε. Aceasta rezultă din formula lui Taylor pentru $x = \alpha$:

$$f(x) = f(\alpha) + (x-\alpha)f'(\alpha) + \frac{(x-\alpha)^2}{2} f''(\xi)$$

unde $f(\alpha) = 0$ și $\xi \in (x, \alpha)$ (sau (α, x)). Astfel dacă $x \in I_\varepsilon$, atunci și $\xi \in I_\varepsilon$ și avem

$$f(x) = (x-\alpha)f'(\alpha)\left[1 + \frac{x-\alpha}{2}\frac{f''(\xi)}{f'(\alpha)}\right]$$

Aici, dacă $x \neq \alpha$, toți trei factorii sunt diferiți de 0, căci

$$\left|\frac{x-\alpha}{2}\frac{f''(\xi)}{f'(\alpha)}\right| \leq \varepsilon M(\varepsilon) < 1.$$

Deci f se poate anula pe I_ε numai în $x = \alpha$.

Demonstrație - pasul II

Să arătăm că $x_n \in I_\varepsilon$ pentru orice n, în afară de cazul când $f(x_n) = 0$, în care $x_n = \alpha$ și metoda converge într-un număr finit de pași. Vom demonstra aceasta prin inducție: presupunem că $x_{n-1}, x_n \in I_\varepsilon$ și $x_n \neq x_{n-1}$. Acest lucru este adevărat pentru $n = 1$ din ipoteză.
Deoarece $f \in C^2[I_\varepsilon]$

$$f[x_{n-1}, x_n] = f'(\xi_1),\ f[x_{n-1}, x_n, \alpha] = \frac{1}{2} f''(\xi_2),\ \xi_i \in I_\varepsilon,\ i = 1, 2,$$

din (17) rezultă

$$|x_{n+1} - \alpha| \leq \varepsilon^2 \left| \frac{f''(\xi_n)}{2f'(\xi_1)} \right| \leq \varepsilon \varepsilon M(\varepsilon) < \varepsilon,$$

adică $x_{n+1} \in I_\varepsilon$.

Demonstrație - pasul III

Convergența. Mai mult, din relația între trei erori consecutive, (17), rezultă $x_{n+1} \neq x_n$ în afară de cazul când $f(x_n) = 0$ (și atunci $x_n = \alpha$). Utilizând (17) avem

$$|x_{n+1} - \alpha| \leq |x_n - \alpha| \varepsilon M(\varepsilon)$$

care aplicată repetat ne dă

$$|x_{n+1} - \alpha| \leq |x_n - \alpha| \varepsilon M(\varepsilon) \leq \cdots \leq [\varepsilon M(\varepsilon)]^{n-1} |x_1 - \alpha|.$$

Cum $\varepsilon M(\varepsilon) < 1$, rezultă că metoda este convergentă și $x_n \to \alpha$ când $n \to \infty$.

Algoritmul

Deoarece este nevoie de o singură evaluare a lui f pe pas, indicele de eficiență este $p = \frac{1+\sqrt{5}}{2} \approx 1.61803\ldots$.

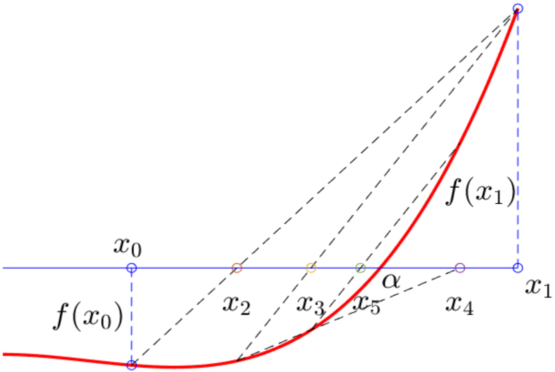


Figura: Ilustrarea metodei secantei

Algoritmul în pseudocod

Intrare: Funcția f, valorile de pornire x_0 și x_1, numarul maxim de iterații, $Nmax$, informații de toleranță tol

Ieșire: O aproximație a rădăcinii sau un mesaj de eroare

$xc := x_1; \qquad xv = x_0;$
$fc := f(x_1); \qquad fv := f(x_0);$
for $k := 1$ **to** $Nmax$ **do**
  $xn := xc - fc * (xc - xv)/(fc - fv);$
  if $crit\_oprire(tol)$ **then**
    return xn;{Succes}
  end if
  $xv := xc; \quad fv := fc; \quad xc := xn; \quad fc = f(xn);$
end for
error("S-a depășit numărul de iterații").

Metoda lui Newton I

- Poate fi privită ca un caz la limită al metodei secantei, când $x_{n-1} \to x_n$:

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)} \tag{21}$$

- Altă interpretare: liniarizarea ecuației $f(x) = 0$ în $x = x_n$ (vezi figura 3)

$$f(x) \approx (T_1 f)(x) = f(x_n) + (x - x_n) f'(x_n) = 0.$$

- Astfel, metoda lui Newton se poate generaliza la ecuații neliniare de toate tipurile (sisteme neliniare, ecuații funcționale, caz în care f' trebuie înțeleasă ca derivată Fréchet), iar iterația este

$$x_{n+1} = x_n - [f'(x_n)]^{-1} f(x_n). \tag{22}$$

Metoda lui Newton II

- Studiul erorii în metoda lui Newton este la fel ca cel al erorii în metoda secantei

$$
\begin{aligned}
x_{n+1}-\alpha &= x_n-\alpha-\frac{f(x_n)}{f'(x_n)} \\
&= (x_n-\alpha)\left[1-\frac{f(x_n)-f(\alpha)}{(x_n-\alpha)f'(x_n)}\right] \\
&= (x_n-\alpha)\left(1-\frac{f[x_n,\alpha]}{f[x_n,x_n]}\right) \\
&= (x_n-\alpha)^2\frac{f[x_n,x_n,\alpha]}{f[x_n,x_n]}
\end{aligned} \tag{23}
$$

- De aceea, dacă $x_n \to \alpha$, atunci

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

și ordinul de convergență al metodei lui Newton este 2 dacă $f''(\alpha)\neq 0$.

Interpretarea geometrică a metodei lui Newton

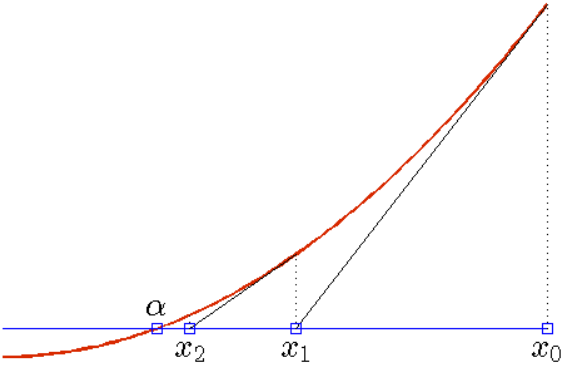


Figura: Metoda lui Newton

Convergența

Referitor la convergența locală a metodei lui Newton avem

Teorema 5

Fie α o rădăcină simplă a ecuației $f(x) = 0$ și $I_\varepsilon = \{x \in \mathbb{R} : |x - \alpha| \leq \varepsilon\}$. Presupunem că $f \in C^2[I_\varepsilon]$. Definim

$$M(\varepsilon) = \max_{\substack{s \in I_\varepsilon \\ t \in I_\varepsilon}} \left| \frac{f''(s)}{2f'(t)} \right| \tag{24}$$

Dacă ε este suficient de mic astfel încât

$$2\varepsilon M(\varepsilon) < 1, \tag{25}$$

atunci pentru orice $x_0 \in I_\varepsilon$, metoda lui Newton este bine definită și converge pătratic către singura rădăcină $\alpha \in I_\varepsilon$.

Demonstrația: ca la secantă.

Criteriul de oprire I

Criteriul de oprire pentru metoda lui Newton

$$|x_n - x_{n-1}| < \varepsilon$$

se bazează pe următoarea propoziție:

Propoziția 6

Fie (x_n) șirul de aproximante generat prin metoda lui Newton. Dacă α este o rădăcină simplă din $[a, b]$, $f \in C^2[a, b]$ și metoda este convergentă, atunci există un $n_0 \in \mathbb{N}$ astfel încât

$$|x_n - \alpha| \leq |x_n - x_{n-1}|, \qquad n > n_0.$$

Demonstrație. Vom arăta întâi că

$$|x_n - \alpha| \leq \frac{1}{m_1}|f(x_n)|, \qquad m_1 \leq \inf_{x\in[a,b]} |f'(x)|. \tag{26}$$

Criteriul de oprire II

Utilizând teorema lui Lagrange,
$f(\alpha) - f(x_n) = f'(\xi)(\alpha - x_n)$, cu $\xi \in (\alpha, x_n)$ (sau (x_n, α)).
Din relațiile $f(\alpha) = 0$ și $|f'(x)| \geq m_1$ pentru $x \in (a, b)$ rezultă că $|f(x_n)| \geq m_1|\alpha - x_n|$, adică chiar (26).
Pe baza formulei lui Taylor avem

$$f(x_n) = f(x_{n-1}) + (x_n - x_{n-1})f'(x_{n-1}) + \frac{1}{2}(x_n - x_{n-1})^2 f''(\mu), \tag{27}$$

cu $\mu \in (x_{n-1}, x_n)$ sau $\mu \in (x_n, x_{n-1})$.
Ținând cont de modul de obținere a unei aproximații de metoda lui Newton, avem
$f(x_{n-1}) + (x_n - x_{n-1})f'(x_{n-1}) = 0$ și din (27) se obține

$$|f(x_n)| = \frac{1}{2}(x_n - x_{n-1})^2 |f''(\mu)| \leq \frac{1}{2}(x_n - x_{n-1})^2 \|f''\|_\infty,$$

Criteriul de oprire III

iar pe baza formulei (26) rezultă că

$$|\alpha - x_n| \leq \frac{\|f''\|_\infty}{2m_1}(x_n - x_{n-1})^2.$$

Cum am presupus că metoda este convergentă, există un n_0 natural cu proprietatea că

$$\frac{\|f''\|_\infty}{2m_1}(x_n - x_{n-1}) < 1, \qquad n > n_0$$

și deci

$$|x_n - \alpha| \leq |x_n - x_{n-1}|, \qquad n > n_0.$$

■

Alegerea valorii de pornire

- Alegerea valorii de pornire este, în general, o problemă dificilă.
- În practică, se alege o valoare, iar dacă după un număr maxim fixat de iterații nu s-a obținut precizia dorită, testată prin unul din criteriile uzuale, se încearcă cu altă valoare de pornire.
- Criterii

  Criteriul 1 dacă rădăcina este izolată într-un interval $[a, b]$ și $f''(x) \neq 0$, $x \in (a, b)$, un criteriu de alegere este $f(x_0)f''(x_0) > 0$.

  Criteriul 2 dacă f este convexă sau concavă pe $[a, b]$, $f(a)f(b) < 0$ și tangentele în capete intersectează Ox în (a,b), orice valoare x0 se poate alege ca valoare de pornire.

Algoritmul în pseudocod

Intrare: Funcția f, derivata f', valoarea de pornire x_0, numarul maxim de iterații, $Nmax$, informații de toleranță *tol*

Ieșire: O aproximație a rădăcinii sau un mesaj de eroare

for $k := 0$ **to** $Nmax$ **do**
  $x_{k+1} := x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}$;
  if $crit\_oprire(tol)$ **then**
    return x_{k+1};{Succes}
  end if
end for
$error($"S-a depășit numărul de iterații"$)$.

Metoda aproximațiilor succesive I

- Adesea, în aplicații, ecuațiile neliniare apar sub forma unei *probleme de punct fix:* să se determine x astfel încât
$$x = \varphi(x). \tag{28}$$
- Un număr α ce satisface această ecuație se numește *punct fix* al lui φ.
- Orice ecuație $f(x) = 0$ se poate scrie (în multe moduri diferite) în forma echivalentă (28). De exemplu, dacă $f'(x) \neq 0$, în intervalul de interes putem lua
$$\varphi(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)}. \tag{29}$$

Metoda aproximațiilor succesive II

- Dacă x_0 este o aproximație inițială a unui punct fix α a lui (28) atunci metoda aproximațiilor succesive generează un șir de aproximații

$$x_{n+1} = \varphi(x_n). \tag{30}$$

- Dacă acest șir converge și φ este continuă, atunci șirul converge către un punct fix a lui φ.
- De notat că (30) este chiar metoda lui Newton dacă φ este dată de (29). Astfel metoda lui Newton poate fi privită ca o iterație de tip punct fix, dar nu și metoda secantei.
- Pentru o iterație de forma (30), presupunând că $x_n \to \alpha$ când $n \to \infty$, ordinul de convergență este ușor de determinat.

Metoda aproximațiilor succesive III

- Să presupunem că în punctul fix α avem

$$\varphi'(\alpha) = \varphi''(\alpha) = \cdots = \varphi^{(p-1)}(\alpha) = 0, \quad \varphi^{p}(\alpha) \neq 0 \tag{31}$$

- Presupunem că $\varphi \in C^p$ pe o vecinătate V a lui α. Avem atunci, conform teoremei lui Taylor

$$\varphi(x_n) = \varphi(\alpha) + (x_n - \alpha)\varphi'(\alpha) + \ldots + \frac{(x_n-\alpha)^{p-1}}{(p-1)!}\varphi^{(p-1)}(\alpha) + \frac{(x_n-\alpha)^p}{p!}\varphi^{(p)}(\xi_n) = \varphi(\alpha) + \frac{(x_n-\alpha)^p}{p!}\varphi^{(p)}(\xi_n),$$

  unde $\xi_n \in (\alpha, x_n)$ (sau (x_n, α)).
- Deoarece $\varphi(x_n) = x_{n+1}$ și $\varphi(\alpha) = \alpha$ obținem

$$\frac{x_{n+1}-\alpha}{(x_n-\alpha)^p} = \frac{1}{p!}\varphi^{(p)}(\xi_n).$$

Metoda aproximațiilor succesive IV

- Când $x_n \to \alpha$, deoarece ξ_n este între x_n și α, deducem pe baza continuității că
$$\lim_{n\to\infty} \frac{x_{n+1}-\alpha}{(x_n-\alpha)^p} = \frac{1}{p!}\varphi^{(p)}(\alpha) \neq 0. \tag{32}$$
- Aceasta ne arată că ordinul de convergență este exact p și eroarea asimptotică este
$$c = \frac{1}{p!}\varphi^{(p)}(\alpha). \tag{33}$$

- Combinând aceasta cu condiția uzuală de convergență locală se obține:

Metoda aproximațiilor succesive V

Teorema 7

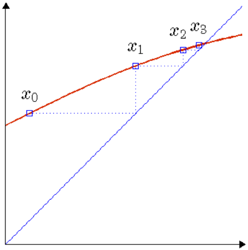
Fie α *un punct fix al lui* φ *și* $I_\varepsilon = \{x \in \mathbb{R} : \; |x - \alpha| \le \varepsilon\}$*. Presupunem că* $\varphi \in C^p[I_\varepsilon]$ *și satisface (31). Dacă*

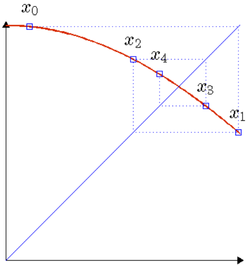
$$M(\varepsilon) := \max_{t \in I_\varepsilon} |\varphi'(t)| < 1 \tag{34}$$

atunci iterația (30) converge către α, $\forall \; x_0 \in I_\varepsilon$*. Ordinul de convergență este* p*, iar eroarea asimptotică este dată de (33).*

Interpretarea geometrica a metodei aproximațiilor succesive

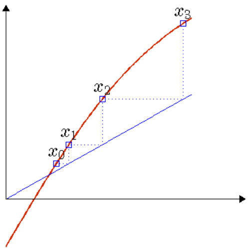
Convergența

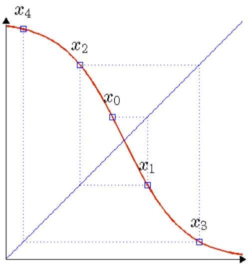




Interpretarea geometrica a metodei aproximațiilor succesive

Divergența





Metoda lui Newton pentru rădăcini multiple I

- Dacă α este o rădăcină multiplă de ordinul m, atunci ordinul de convergență a metodei lui Newton este doar 1. Într-adevăr, fie
$$\varphi(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)}.$$
- Deoarece
$$\varphi'(x) = \frac{f(x)f''(x)}{\left[f'(x)\right]^2}$$
procesul va fi convergent dacă $\varphi'(\alpha) = 1 - 1/m < 1$.

Metoda lui Newton pentru rădăcini multiple II

- O modalitate de a evita aceasta este să rezolvăm ecuația
$$u(x) := \frac{f(x)}{f'(x)} = 0$$
care are aceleași rădăcini ca și f, dar simple. Metoda lui Newton pentru problema modificată are forma
$$x_{k+1} = x_k - \frac{u(x_k)}{u'(x_k)} = \frac{f(x_k)f'(x_k)}{[f'(x_k)]^2 - f(x_k)f''(x_k)}. \quad (35)$$
- Deoarece α este o rădăcină simplă a lui u, convergența lui (35) este pătratică. Singurul dezavantaj teoretic al lui (35) este derivata a doua necesară suplimentar și complexitatea mai mare a calculului lui x_{k+1} din x_k. În practică aceasta este o slăbiciune, deoarece numitorul lui (35) poate lua valori foarte mici în vecinătatea lui α când $x_k \to \alpha$.

Metoda lui Newton pentru rădăcini multiple III

- Convergența pătratică a metodei lui Newton se poate realiza nu numai prin modificarea problemei ci și prin modificarea metodei. În vecinătatea unei soluții multiple de ordinul m, α, avem

$$f(x) = (x-\alpha)^m \varphi(x) \approx (x-\alpha)^m \cdot c, \qquad (36)$$

de unde rezultă

$$\frac{f(x)}{f'(x)} \approx \frac{x-\alpha}{m} \Rightarrow \alpha \approx x - m\frac{f(x)}{f'(x)}.$$

- Metoda modificată corespunzătoare

$$x_{k+1} := x_k - m\frac{f(x_k)}{f'(x_k)}, \qquad k = 0, 1, 2, \ldots \qquad (37)$$

converge pătratic către rădăcina multiplă de ordinul m când se întrebuințează o valoare corectă a lui m în (37).

Metoda lui Newton pentru rădăcini multiple IV

- Eficiența variantei (37) a metodei lui Newton depinde de utilizarea unei valori de aproximare bune pentru m, dacă această valoare nu este cunoscută din alte surse. În ipoteza

$$\left|x_k - \alpha\right| < \left|x_{k-1} - \alpha\right| \wedge \left|x_k - \alpha\right| < \left|x_{k-2} - \alpha\right|$$

putem înlocui în (36) α prin x_k

$$\begin{aligned} f\left(x_{k-1}\right) &\approx \left(x_{k-1} - x_k\right)^m \cdot c \\ f\left(x_{k-2}\right) &\approx \left(x_{k-2} - x_k\right)^m \cdot c. \end{aligned}$$

- În continuare se obține m:

$$m \approx \frac{\log\left[f\left(x_{k-1}\right)/f\left(x_{k-2}\right)\right]}{\log\left[\left(x_{k-1} - x_k\right)/\left(x_{k-2} - x_k\right)\right]}.$$

Această valoare poate fi utilizată în (37).

Ecuații algebrice I

- Există multe metode special concepute pentru a rezolva ecuații algebrice.
- Aici vom descrie numai metoda lui Newton aplicată în acest context, concentrându-ne asupra unui mod eficient de a evalua simultan valoarea polinomului și a primei derivate.
- Considerăm o ecuație algebrică de grad d

$$f(x) = 0, \quad f(x) = x^d + a_{d-1}x^{d-1} + \cdots + a_0, \quad (38)$$

  în care coeficientul dominant se presupune (fără a restrânge generalitatea) a fi egal cu 1 și unde putem presupune, fără a restrânge generalitatea că $a_0 \neq 0$.
- Pentru simplitate vom presupune că toți coeficienții sunt reali.

Ecuații algebrice II

- Pentru a aplica metoda lui Newton ecuației (38) este nevoie de o metodă bună de evaluare a polinomului și derivatei. Schema lui Horner este potrivită pentru așa ceva:

$bd := 1; \quad cd := 1;$
for $k = d - 1$ **downto** 1 **do**
  $b_k := tb_{k+1} + a_k;$
  $c_k := tc_{k+1} + b_k;$
end for
$b_0 := tb_1 + a_0;$

- Atunci $f(t) = b_0$, $f'(t) = c_1$.
- Deci procedăm astfel:
  - Se aplică metoda lui Newton, calculând simultan $f(x_n)$ și $f'(x_n)$

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

Ecuații algebrice III

- Se aplică apoi metoda lui Newton polinomului $\frac{f(x)}{x-\alpha}$.
- Pentru rădăcini complexe se începe cu x_0 complex și toate calculele se fac în aritmetică complexă.
- Este posibil să se împartă cu factori pătratici și să se folosească aritmetica reală – metoda lui Bairstow.
- Folosind metoda aceasta de scădere a gradului erorile pot fi mari.
- O modalitate de îmbunătățire este de a utiliza rădăcinile astfel calculate ca aproximații inițiale și a aplica metoda lui Newton polinomului original.

Metoda lui Newton pentru sisteme neliniare I

- Metoda lui Newton este ușor de generalizat la sisteme neliniare
$$F(x) = 0, \tag{39}$$
unde $F : \Omega \subset \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$, iar $x, F(x) \in \mathbb{R}^n$.
- Sistemul (39) se scrie pe componente
$$\begin{cases} F_1(x_1, \dots, x_n) = 0 \\ \vdots \\ F_n(x_1, \dots, x_n) = 0 \end{cases}$$
- Fie $F'^{(k)})$ jacobianul lui F în $x^{(k)}$:
$$J := F'^{(k)}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial F_1}{\partial x_1}(x^{(k)}) & \dots & \frac{\partial F_1}{\partial x_n}(x^{(k)}) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial F_n}{\partial x_1}(x^{(k)}) & \dots & \frac{\partial F_n}{\partial x_n}(x^{(k)}) \end{bmatrix}. \tag{40}$$

Metoda lui Newton pentru sisteme neliniare II

- Cantitatea $1/f'(x)$ se înlocuiește în acest caz cu inversa jacobianului în $x^{(k)}$:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - [F'(x^{(k)})]^{-1}F(x^{(k)}). \tag{41}$$

- Scriem iterația sub forma

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + w^{(k)}. \tag{42}$$

Se observă că w_k este soluția sistemului de n ecuații liniare cu n necunoscute

$$F'\left(x^{(k)}\right)w^{(k)} = -F(x^{(k)}). \tag{43}$$

- Este mai eficient și mai convenabil ca, în loc să inversăm jacobianul la fiecare pas, să rezolvăm sistemul (43) și să folosim iterația în forma (42).

Metoda lui Newton pentru sisteme neliniare III

Teorema 8

Fie α o soluție a ecuației $F(x) = 0$ și presupunem că în bila închisă $B(\delta) \equiv \{x : \ \|x - \alpha\| \leq \delta\}$, există matricea Jacobi a lui $F : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$, este nesingulară și satisface condiția Lipschitz

$$\|F'(x) - F'(y)\|_\infty \leq c\|x - y\|_\infty, \ \forall \ x, y \in B(\delta), \quad c > 0.$$

Punem $\gamma = c \max\left\{\|[F'(x)]^{-1}\|_\infty : \|\alpha - x\|_\infty \leq \delta\right\}$ și $0 < \varepsilon < \min\{\delta, \gamma^{-1}\}$. Atunci pentru orice aproximație inițială $x^{(0)} \in B(\varepsilon) := \{x : \ \|x - \alpha\|_\infty \leq \varepsilon\}$ metoda lui Newton este convergentă, iar vectorii $e^{(k)} := \alpha - x^{(k)}$ satisfac următoarele inegalități:

(a) $\|e^{(k+1)}\|_\infty \leq \gamma\|e^{(k)}\|_\infty^2$

(b) $\|e^{(k)}\|_\infty \leq \gamma^{-1}(\gamma\|e^{(0)}\|_\infty)^{2^k}$.

Metoda lui Newton pentru sisteme neliniare IV

Demonstrație. Dacă F' este continuă pe segmentul ce unește punctele $x, y \in \mathbb{R}^n$, conform teoremei lui Lagrange

$$F(x) - F(y) = J_k(x - y),$$

unde

$$J_k = \begin{bmatrix} \frac{\partial F_1}{\partial x_1}(\xi_1) & \dots & \frac{\partial F_1}{\partial x_n}(\xi_1) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial F_n}{\partial x_1}(\xi_n) & \dots & \frac{\partial F_n}{\partial x_n}(\xi_n) \end{bmatrix} \Rightarrow$$

$$\begin{aligned} e^{(k+1)} &= e^{(k)} - [F'(x^{(k)})]^{-1}(F(\alpha) - F(x^{(k)})) \\ &= e^{(k)} - [F'(x^{(k)})]^{-1} J_k e^{(k)} \\ &= [F'(x_{(k)})]^{-1}(F'(x^{(k)}) - J_k)e^{(k)} \end{aligned}$$

Metoda lui Newton pentru sisteme neliniare V

și de aici rezultă imediat (a). Din condiția Lipschitz

$$\|F'(x^{(k)}) - J_k\|_\infty \leq c \max_{j=\overline{1,n}} \|x^{(k)} - \xi^{(j)}\| \leq c\|x^{(k)} - \alpha\|$$

Deci, dacă $\|\alpha - x^{(k)}\|_\infty \leq \varepsilon$, atunci

$$\|\alpha - x^{(k+1)}\|_\infty \leq (\gamma\varepsilon)\varepsilon \leq \varepsilon.$$

Deoarece (a) este adevărată pentru orice k, se obține (b) imediat. ■

Metoda lui Newton - pseudocod

Intrare: Funcția F, derivata Fréchet F', vectorul de pornire $x^{(0)}$, numarul maxim de iterații, $Nmax$, informații de toleranță tol

Ieșire: O aproximație a rădăcinii sau un mesaj de eroare

for $k := 0$ **to** $Nmax$ **do**
    Calculează matricea jacobian $J = F'(x^{(k)})$;
    Rezolvă sistemul $Jw = -F(x^{(k)})$;
    $x^{(k+1)} := x^{(k)} + w$;
    if $crit\_oprire(tol)$ **then**
        return $x^{(k+1)}$;{Succes}
    end if
end for
$error$("S-a depășit numărul de iterații").

Metode quasi-Newton I

- O slăbiciune semnificativă a metodei lui Newton pentru rezolvarea sistemelor de ecuații neliniare este necesitatea ca la fiecare pas să calculăm matricea jacobiană și să rezolvăm un sistem $n \times n$ cu această matrice.
- Pentru a ilustra dimensiunile unei astfel de slabiciuni, să evaluăm volumul de calcule asociat cu o iterație a metodei lui Newton. Matricea jacobiană asociată unui sistem de n ecuații neliniare scris în forma $F(x) = 0$ necesită evaluarea celor n^2 derivate parțiale ale celor n funcții componente ale lui F. În cele mai multe situații, evaluarea exactă a derivatelor parțiale este neconvenabilă și de multe ori imposibilă. Efortul total pentru o iterație a metodei lui Newton va fi de cel puțin $n^2 + n$ evaluări de funcții scalare (n^2 pentru evaluarea jacobianului și n pentru evaluarea lui F) și $O(n^3)$ operații aritmetice pentru a rezolva sistemul liniar.

Metode quasi-Newton II

Acest volum de calcule este prohibitiv, exceptând valori mici ale lui n și funcții scalare ușor de evaluat.

- Este firesc ca atenția să fie îndreptată spre reducerea numărului de evaluări și evitarea rezolvării unui sistem liniar la fiecare pas.
- La metoda secantei aproximația următoare $x^{(k+1)}$ se obține ca soluție a ecuației liniare

$$\bar{\ell}_k = f(x^{(k)}) + (x - x^{(k)})\frac{f(x^{(k)} + h_k) - f(x^{(k)})}{h_k} = 0.$$

- Aici funcția $\bar{\ell}_k$ poate fi interpretată în două moduri:
  1. ca aproximare a ecuație tangentei
  $$\ell_k(x) = f(x^{(k)}) + (x - x^{(k)})f'\left(x^{(k)}\right);$$
  2. ca interpolare liniară între punctele $x^{(k)}$ și $x^{(k+1)}$.

Metode quasi-Newton III

- Se pot obține diverse generalizări ale metodei secantei la sisteme de ecuații neliniare în funcție de modul în care se interpretează $\bar{\ell}_k$.
- Prima interpretare conduce la metode de tip Newton discretizate, iar a doua la metode bazate pe interpolare.
- Metodele de tip Newton discretizate se obțin dacă în metoda lui Newton (41) $F'(x)$ se înlocuiește cu cu o aproximare discretă $A(x, h)$. Derivatele parțiale din matricea jacobiană (40) se vor înlocui prin diferențele divizate

$$A(x, h)e_i := \left[F(x + h_i e_i) - F(x)\right] / h_i, \qquad i = \overline{1, n}, \tag{44}$$

Metode quasi-Newton IV

unde $e_i \in \mathbb{R}^n$ este al i-lea vector al bazei canonice și $h_i = h_i(x)$ este mărimea pasului de discretizare. O alegere posibilă a pasului este de exemplu

$$h_i := \begin{cases} \varepsilon|x_i|, & \text{dacă } x_i \neq 0; \\ \varepsilon, & \text{altfel,} \end{cases}$$

cu $\varepsilon := \sqrt{\text{eps}}$, unde eps este epsilon-ul mașinii.

Interpolare liniară I

- La interpolare fiecare dintre planele tangente se înlocuiește cu un (hiper)plan care interpolează funcțiile componente F_i ale lui F în $n+1$ puncte date $x^{k,j}$, $j=\overline{0,n}$, într-o vecinătate a lui $x^{(k)}$, adică se determina vectorii $a^{(i)}$ și scalarii α_i, astfel încât pentru

$$L_i(x) = \alpha_i + a^{(i)\,T} x, \qquad i=\overline{1,n} \tag{45}$$

are loc

$$L_i(x^{k,j}) = F_i(x^{k,j}), \qquad i=\overline{1,n}, \quad j=\overline{0,n}.$$

- Următoarea aproximație $x^{(k+1)}$ se obține ca punct de intersecție între cele n hiperplane (45) din $\mathbb{R}^{n+1}$ cu hiperplanul $y=0$. $x^{(k+1)}$ rezultă ca soluție a sistemului de ecuații liniare

$$L_i(x) = 0, \qquad i=\overline{1,n}. \tag{46}$$

Interpolare liniară II

- În funcție de alegerea punctelor de interpolare se obțin diferite metode, dintre care cele mai cunoscute sunt metoda lui Brown și metoda lui Brent.
- Metoda lui Brown combină aproximarea lui F' și rezolvarea sistemului prin eliminare gaussiană.
- În metoda lui Brent se întrebuințează la rezolvarea sistemului metoda QR. Ambele metode aparțin unei clase de metode, care, la fel ca metoda lui Newton, converg pătratic, dar au nevoie doar de $(n^2 + 3n)/2$ evaluări de funcții pe iterație.
- Într-un studiu comparativ, Moré și Cosnard [7] au ajuns la concluzia că metoda Brent este adeseori de preferat metodei lui Brown și că pentru sisteme de ecuații neliniare, la care evaluarea lui f necesită un efort mai mic, metoda lui Newton discretizată este cea mai eficientă metodă de rezolvare.

Metode de modificare I

- Din punct de vedere al efortului de calcul, sunt deosebit de convenabile metodele în care la fiecare pas se întrebuințează o aproximare A_k a lui $F'(x^{(k)})$, care se obține din A_{k-1} printr-o modificare de rang 1, adică prin adăugarea unei matrice de rang 1:

$$A_{k+1} := A_k + u^{(k)} \left[v^{(k)}\right]^T, \; u^{(k)}, v^{(k)} \in \mathbb{R}^n, \; k = 0, 1, 2, \ldots$$

- Pe baza formulei Sherman-Morrison (vezi [4])

$$\left(A + uv^T\right)^{-1} = A^{-1} - \frac{1}{1 + v^T A^{-1} u} A^{-1} uv^T A^{-1} \tag{47}$$

pentru $B_{k+1} := A_{k+1}^{-1}$ are loc relația de recurență

$$B_{k+1} = B_k - \frac{B_k u^{(k)} \left[v^{(k)}\right]^T B_k}{1 + \left[v^{(k)}\right]^T B_k u^{(k)}}, \qquad k = 0, 1, 2, \ldots,$$

Metode de modificare II

atât timp cât $1 + \left[v^{(k)}\right]^T B_k u^{(k)} \neq 0$.

- Necesitatea rezolvării unui sistem liniar la fiecare pas dispare; aceasta se înlocuiește cu înmulțiri matrice-vector, ceea ce corespunde unei reduceri a efortului de calcul de la $O(n^3)$ la $O(n^2)$.
- Acest avantaj va fi plătit prin aceea că nu vom mai avea o convergentă pătratică ca la metoda lui Newton, ci doar una superliniară:

$$\lim_{k\to\infty} \frac{\left\|x^{(k+1)} - \alpha\right\|}{\left\|x^{(k)} - \alpha\right\|} = 0. \tag{48}$$

- În *metoda lui Broyden* alegerea vectorilor $u^{(k)}$ și $v^{(k)}$ are loc după principiul aproximației secantei. În cazul scalar aproximarea $a_k \approx f'\left(x^{(k)}\right)$ se face unic prin

$$a_{k+1}(x^{(k+1)} - x^{(k)}) = f(x^{(k+1)}) - f(x^{(k)}).$$

Metode de modificare III

- Pentru $n > 1$, din contră, aproximarea

$$A_{k+1}(x^{(k+1)} - x^{(k)}) = F(x^{(k+1)}) - F(x^{(k)}) \qquad (49)$$

(așa numita ecuație quasi-Newton) nu mai este unic determinată; orice altă matrice de forma

$$\bar{A}_{k+1} := A_{k+1} + pq^T$$

cu $p, q \in \mathbb{R}^n$ și $q^T(x^{(k+1)} - x^{(k)}) = 0$ verifică de asemenea ecuația (49).

- Pe de altă parte,

$$y_k := F(x^{(k)}) - F(x^{(k-1)}) \text{ și } s_k := x^{(k)} - x^{(k-1)}$$

conțin numai informații despre variația lui F în direcția s_k, dar nici o informație în direcții ortogonale pe s_k.

Metode de modificare IV

- Pe aceste direcții trebuie ca efectul lui A_{k+1} și A_k să coincidă

$$A_{k+1}q = A_k q, \qquad \forall q \in \{v : v \neq 0, v^T s_k = 0\}. \quad (50)$$

- Pornind de la prima aproximare $A_0 \approx F'^{(0)})$, se generează șirul A_1, A_2, ... utilizând formulele (49) și (50) (Broyden [2], Dennis și Moré [4]).
- Pentru șirul $B_0 = A_0^{-1} \approx [F(x^{(0)})]^{-1}$, B_1, B_2, ... cu ajutorul formulei Sherman-Morisson (47) se obține relația de recurență

$$B_{k+1} := B_k + \frac{(s_{k+1} - B_k y_{k+1}) s_{k+1}^T B_k}{s_{k+1}^T B_k y_{k+1}}, \qquad k = 0, 1, 2, \ldots$$

care conține doar înmulțiri matrice vector și a cărei complexitate este doar $O(n^2)$.

Metode de modificare V

- Cu ajutorul matricelor B_k se poate defini metoda lui Broyden prin

$$x^{(k+1)} := x^{(k)} - B_k F(x^{(k)}), \qquad k = 0, 1, 2, \ldots$$

- Această metodă converge superliniar în sensul lui (48), dacă pașii s_k se apropie asimptotic (când $k \to \infty$) de pașii metodei lui Newton.
- Se poate recunoaște în aceasta semnificația centrală a principiului linearizării locale la rezolvarea ecuațiilor neliniare.

Metoda lui Broyden

Intrare: F, vectorul $x^{(0)}$, $Nmax$, toleranța tol
Ieșire: O aproximație a rădăcinii sau un mesaj de eroare

$B_0 := F'(x^{(0)})$; $v := F(x)$; $B := B_0^{-1}$;
$s := -Bv$; $x := x + s$;
for $k := 1$ **to** $Nmax$ **do**
  $w := v$; $v := F(x)$; $y := v - w$;
  $z := -By$; $\{z = -B_{k-1}y_k\}$
  $p := -s^T z$; $\{p = s_k^T B_{k-1} y_k\}$
  $C := pI + (s + z)s^T$;
  $\{C = s_k^T B_{k-1}^{-1} y_k I + (s_k + B_{k-1}y_k)s_k^T\}$
  $B := (1/p)CB$; $\{B = B_k\}$
  $s := -Bv$; $\{s = -B_k F(x^{(k)})\}$
  $x := x + s$;
  if $crit\_oprire(tol)$ **then**
    return x; {succes}
  end if
end for
$error$("S-a depășit numărul maxim de iterații")

Interpolare inversă I

- Dacă f este inversabilă pe o vecinătate V a lui α și g este inversa sa ($g = f^{-1}$), atunci
$$f(\alpha) = 0 \Longrightarrow \alpha = g(0).$$
- Interpolarea inversă constă în aproximarea lui $g(0)$ prin valoarea unui polinom de interpolare de grad mic.
- Dacă aproximăm g prin polinomul său Taylor de grad 1, avem
$$g(y) \approx (T_1 g)(y) = g(y_n) + (y - y_n)g'(y_n).$$
- Dacă $y_n = f(x_n)$, ținând cont că $g'(y_n) = \frac{1}{f'(x_n)}$, se obține
$$g(0) \approx x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)} =: x_{n+1},$$
adică metoda lui Newton! Încercați să obțineți metoda corespunzătoare pentru $T_2 g$.

Interpolare inversă II

- Dacă luăm $g \approx L_1 g$, avem

$$g(y) \approx (L_1 g)(y) = g(y_n) + g[y_n, y_{n-1}](y - y_n).$$

- Ținând cont că

$$g[y_n, y_{n-1}] = \frac{g(y_n) - g(y_{n-1})}{y_n - y_{n-1}} = \frac{x_n - x_{n-1}}{f(x_n) - f(x_{n-1})},$$

se obține

$$g(0) \approx x_n - \frac{x_n - x_{n-1}}{f(x_n) - f(x_{n-1})} f(x_n),$$

adică metoda secantei.

Metode hibride

- Aceste metode combină metodele cu convergență globală, dar mai lente, cu metode cu convergență locală (de exemplu, Newton sau secantă).
- De asemenea, se utilizează scheme adaptive de monitorizare a iterațiilor și de testare a condițiilor de oprire.
- Una dintre cele mai cunoscute metode de acest tip este algoritmul lui Dekker, în varianta lui Brent, cunoscut și sub numele de *algoritmul Dekker-Brent* sau *zeroin* [6],[8].
- El combină metoda înjumătățirii cu metoda secantei și cu metoda interpolării inverse pătratice (IQI).
- Funcția MATLAB `fzero` se bazează pe acest algoritm.

Descrierea algoritmului

- Se începe cu a și b astfel încât $f(a)$ și $f(b)$ au semne opuse.
- Se utilizează un pas al metodei secantei pentru a obține c între a și b.
- Se repetă pașii următori până când $|b - a| < \varepsilon|b|$ sau $f(b) = 0$
  - Se permută a, b, c astfel încât
    - $f(b)$ și $f(a)$ au semne opuse
    - $|f(b)| \leq |f(a)|$
    - c este valoarea precedentă a lui b.
  - Dacă $c \neq a$ se realizează un pas IQI, altfel un pas al metodei secantei.
  - Dacă rezultatul pasului IQI sau secantei este în $[a, b]$, se acceptă
  - Dacă nu, înjumătățire.

Bibliografie I

- Octavian Agratini, Ioana Chiorean, Gheorghe Coman, Trîmbiţaş Radu, *Analiză numerică şi teoria aproximării*, vol. **III**, Presa Universitară Clujeană, 2002, coordonatori D. D. Stancu şi Gh. Coman.
- C. G. Broyden, A Class of Methods for Solving Nonlinear Simultaneous Equations, *Math. Comp.* **19** (1965), 577–593.
- Gheorghe Coman, *Analiză numerică*, Editura Libris, Cluj-Napoca, 1995.
- J. E. Dennis, J. J. Moré, Quasi-Newton Metods, Motivation and Theory, *SIAM Review* **19** (1977), 46–89.
- W. Gautschi, *Numerical Analysis. An Introduction*, Birkhäuser, Basel, 1997.

Bibliografie II

- C. Moler, *Numerical Computing in MATLAB*, SIAM, 2004
- J. J. Moré, M. Y. Cosnard, Numerical Solutions of Nonlinear Equations, *ACM Trans. Math. Softw.* **5** (1979), 64–85.
- W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, B. P. Flannery, *Numerical Recipes in C*, Cambridge University Press, Cambridge, New York, Port Chester, Melbourne, Sidney, 1996, disponibila prin www, `http://www.nr.com/`.
- J. Stoer, R. Bulirsch, *Introduction to Numerical Analysis*, 2nd ed., Springer Verlag, 1992.