

# Metody numeryczne

## 8. Rozwiązywanie równań algebraicznych

P. F. Góra

[https://zfs.fais.uj.edu.pl/pawel\\_gora](https://zfs.fais.uj.edu.pl/pawel_gora)

13 grudnia 2022

## Co to znaczy rozwiązać równanie?

Przypuśmy, że postawiono przed nami problem rozwiązania równania

$$f(x) = 0. \tag{1}$$

Przed wszystkim musimy ustalić co oznacza słowo “rozwiązać”. Można bowiem mieć na myśli dwie rzeczy

- I. Znaleźć *wszystkie* rozwiązania (1).
- II. Znaleźć *jakieś* rozwiązanie (1).

Pierwszy przypadek zachodzi wtedy, gdy o równaniu możemy dużo powiedzieć od strony analitycznej — na przykład gdy jest to równanie trygonometryczne lub wielomianowe. W przypadku ogólnym na ogół nie wiemy nawet czy jakiegolwiek rozwiązanie (1) istnieje, a jeśli tak, to ile ich jest. **Dlatego w przypadku ogólnym zadowolamy się znalezieniem *jakiegoś, pojedynczego rozwiązania*** (o ile warunki zadania nie stanowią inaczej).

O funkcji  $f(x)$  zakładamy, że jest ciągła i — na ogół — różniczkowalna odpowiednią ilość razy.

## Krotność miejsca zerowego

Mówimy, że  $x_0$  jest **miejscem zerowym** funkcji  $f(x)$  o **krotności**  $k$ , jeżeli w tym punkcie zeruje się funkcja wraz ze swoimi pochodnymi do rzędu  $k-1$ :  $f(x_0) = f'(x_0) = f''(x_0) = \dots = f^{(k-1)}(x_0) = 0$ . Na przykład wielomian  $P(x) = x^4 - x^3 - x^2 + x$  ma jednokrotne miejsce zerowe w  $x = -1$ , jednokrotne miejsce zerowe w  $x = 0$  i dwukrotne miejsce zerowe w  $x = 1$ . Natomiast funkcja  $f(x) = (x^2 - 1)\sinh^3 x$  ma jednokrotne miejsca zerowe w  $x = \pm 1$  i trzykrotne miejsce zerowe w  $x = 0$ .

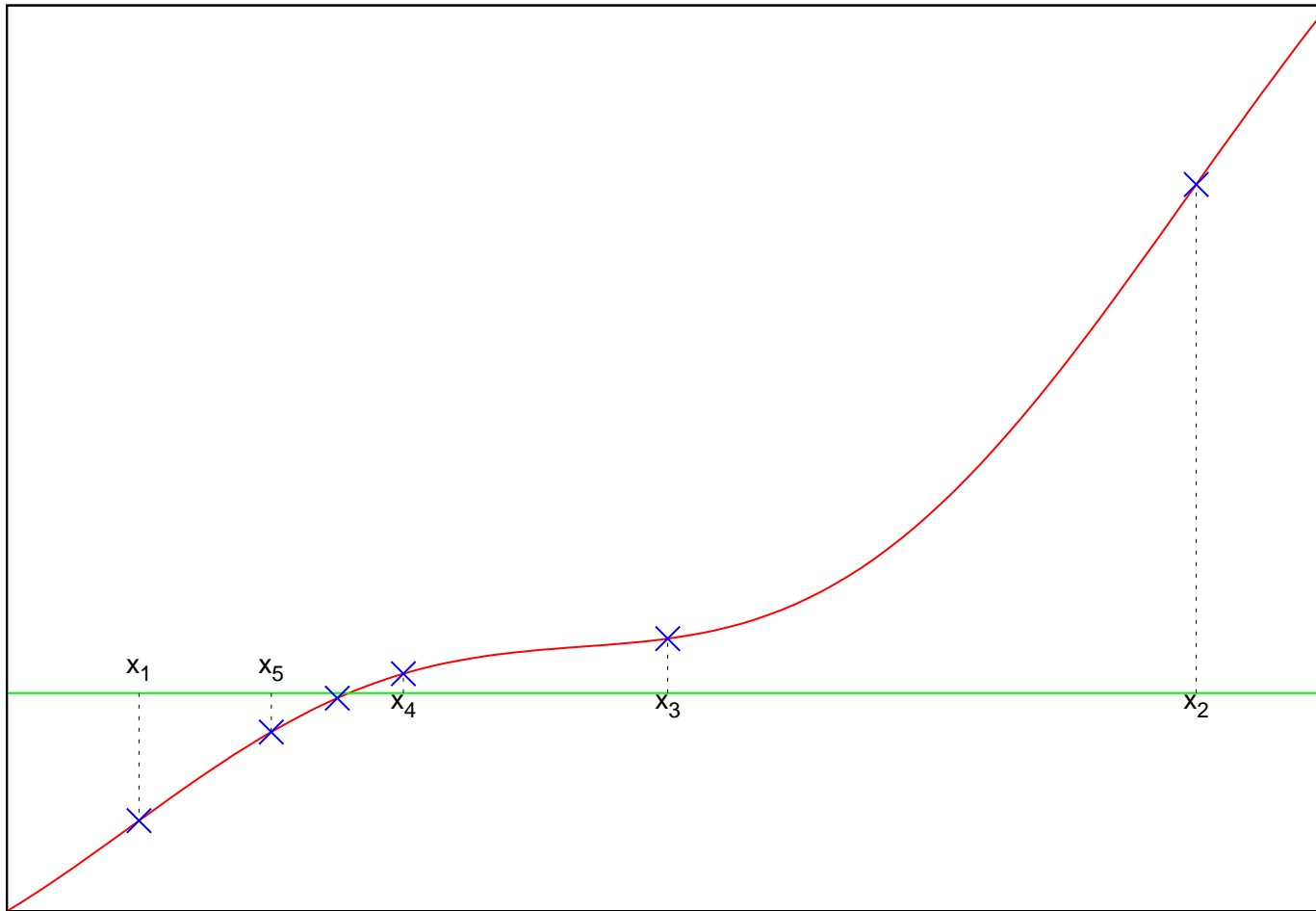
Funkcja zmienia znak w otoczeniu miejsca zerowego o krotności nieparzystej i *nie zmienia znaku* w otoczeniu miejsca zerowego o krotności parzystej.

## Metoda bisekcji

Jeżeli funkcja  $f(x)$  jest ciągła i jeżeli znajdziemy dwa punkty, w których znak funkcji jest przeciwny,  $f(x_1) \cdot f(x_2) < 0$ , jako przybliżenie miejsca zerowego bierzemy środkowy punkt przedziału  $[x_1, x_2]$ ,  $x_3 = (x_1 + x_2)/2$ . Ustalamy, w którym z przedziałów  $[x_1, x_3]$ ,  $[x_3, x_2]$  funkcja zmienia znak, po czym powtarzamy całą procedurę dla tego przedziału. Procedurę kończymy, gdy znajdziemy  $x_n$  takie, że  $|f(x_n)| \leq \varepsilon$ , gdzie  $\varepsilon$  jest zadaną dokładnością poszukiwania rozwiązania równania (1).

Zbieżność metody bisekcji jest liniowa, to znaczy, że na ustalenie każdego kolejnego miejsca dziesiętnego w rozwinięciu miejsca zerowego potrzeba takiej samej liczby iteracji.

Metoda bisekcji działa dla miejsc zerowych o nieparzystej krotności i nie działa dla miejsc zerowych o krotności parzystej.

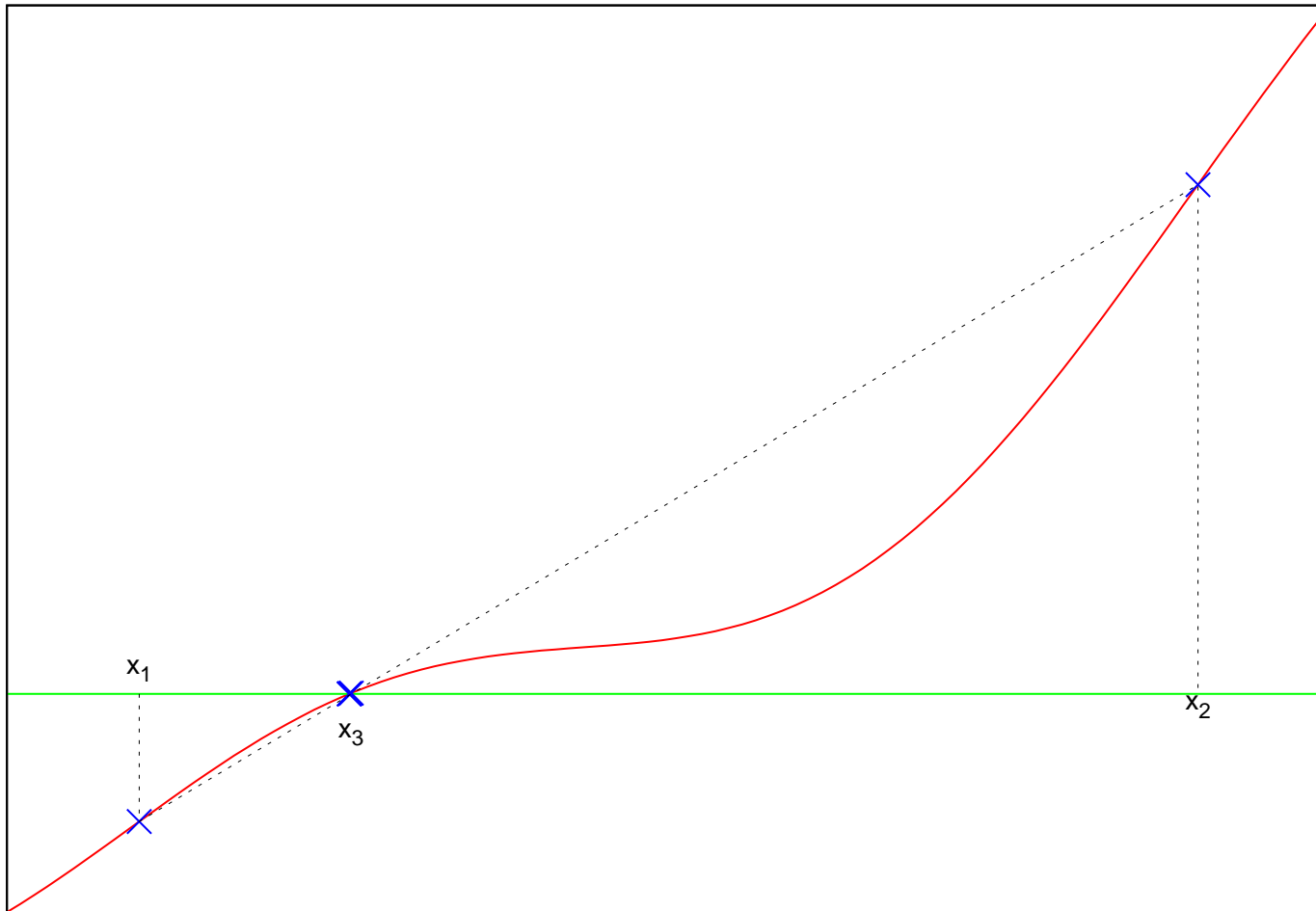


## Metoda *regula falsi*

Metoda *regula falsi*, czyli “metoda fałszywego położenia”, jest jedną z najczęściej stosowanych metod poszukiwania rozwiązań równania (1). Punkt wyjścia jest **podobny** do metody bisekcji: Jeżeli funkcja  $f(x)$  jest ciągła i jeżeli znajdziemy dwa punkty, w których znak funkcji jest przeciwny,  $f(x_1) \cdot f(x_2) < 0$ , jako przybliżenie miejsca zerowego bierzemy punkt przecięcia stycznej przechodzącej przez punkty  $(x_1, f(x_1))$ ,  $(x_2, f(x_2))$  z osią  $OX$ :

$$x_3 = \frac{f(x_1)x_2 - f(x_2)x_1}{f(x_1) - f(x_2)}. \quad (2)$$

Jeżeli  $|f(x_3)| \leq \varepsilon$  ( $\varepsilon$  jak poprzednio), kończymy procedurę. Jeżeli nie, wybieramy ten z przedziałów  $[x_1, x_3]$ ,  $[x_3, x_2]$ , **w którym funkcja zmienia znak** i postępujemy analogicznie.



## Metoda siecznych

Metoda siecznych jest nągminnie mylona z metodą *regula falsi*. Punktem wyjścia są dowolne dwa punkty, dla których  $f(x_1) \neq f(x_2)$ . Prowadzimy sieczną przez te punkty (bez względu na znak  $f(x_1) \cdot f(x_2)$ ), i jako  $x_3$  bierzemy miejsce zerowe tej siecznej, dane *także* wzorem (2). W kolejnych krokach bierzemy **zawsze dwa ostatnie punkty**, bez względu na to, czy funkcja zmienia znak.

**Metoda siecznych i metoda *regula falsi* to są inne metody!** Metoda siecznych może być zbieżna **szybciej** niż metoda *regula falsi*, ale — w odróżnieniu od *regula falsi* i metody bisekcji — w niektórych przypadkach zawodzi (nie jest zbieżna do miejsca zerowego).



## Porównanie

Dla funkcji  $f(x) = \frac{1}{8}x^4 + x^3 - x + \frac{1}{8}\sin(16x)$  z punktami startowymi  $x_1 = 0.8$ ,  $x_2 = 1.2$ , metody zbiegały się do  $|f(0.879312)| \leq 10^{-6}$ , przy czym liczba kroków wyniosła odpowiednio

metoda	kroków
bisekcji	17
<i>regula falsi</i>	8
siecznych	4

## Interpolacja odwrotna

Przypuśćmy, że mamy stabelaryzowane wartości funkcji w węzłach:

$$\begin{array}{c|c|c|c|c|c} x_i & x_1 & x_2 & x_3 & \dots & x_n \\ \hline f_i = f(x_i) & f_1 & f_2 & f_3 & \dots & f_n \end{array} \quad (3)$$

przy czym — ważne! — stabelaryzowane wartości są **ściśle monotoniczne**,  $f_1 > f_2 > \dots > f_n$  (lub  $f_1 < f_2 < \dots < f_n$ ). Skoro funkcja jest monotoniczna, jest odwracalna, przy czym “węzły” i “wartości” zamieniają się miejscami:

$$\begin{array}{c|c|c|c|c|c} f_i & f_1 & f_2 & f_3 & \dots & f_n \\ \hline x_i = f^{-1}(f_i) & x_1 & x_2 & x_3 & \dots & x_n \end{array} \quad (4)$$

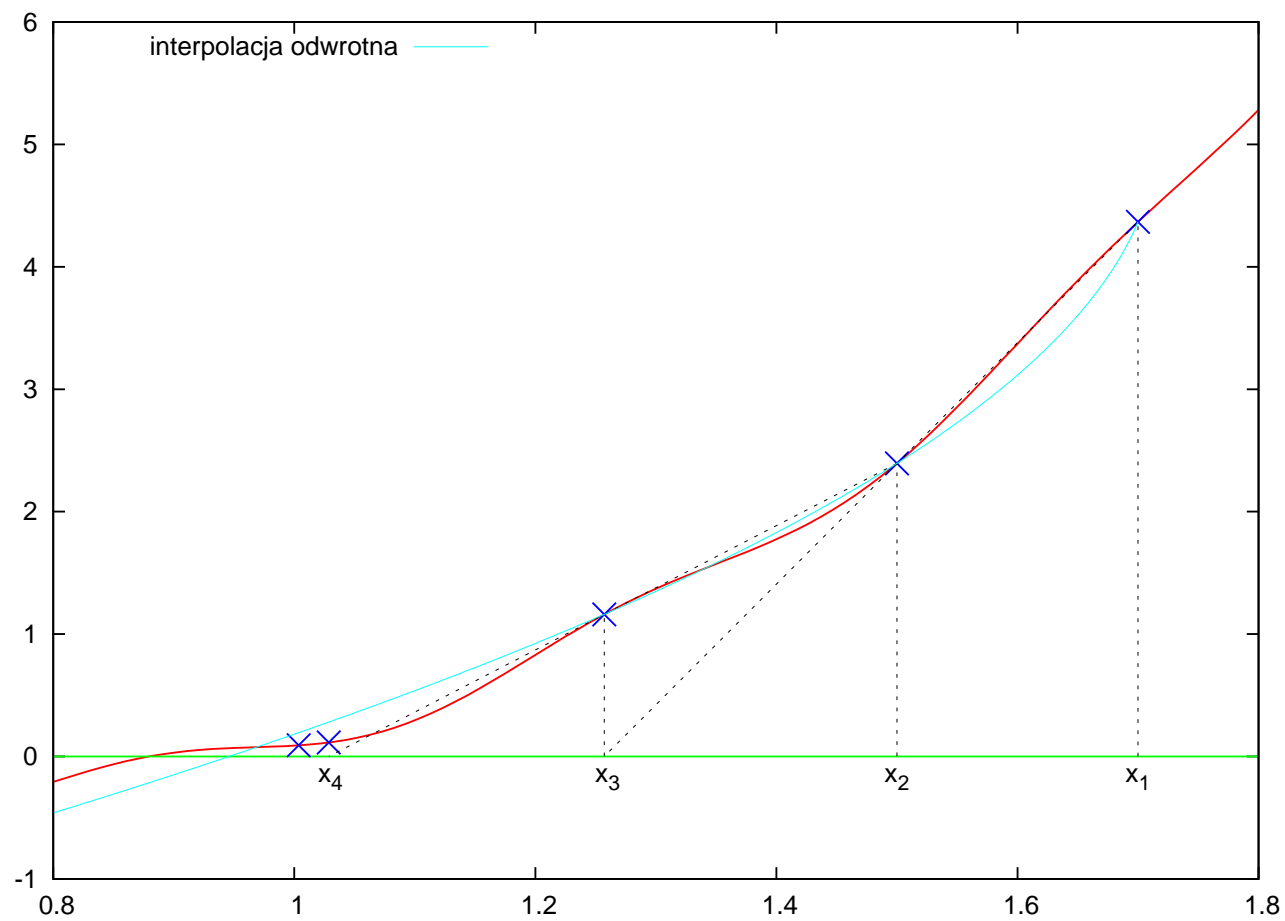
Wartość funkcji odwrotnej w zerze oznacza punkt, w którym funkcja ma **miejsce zerowe!** Aby znaleźć przybliżone miejsce zerowe funkcji  $f(x)$ ,

tworzymy wielomian interpolacyjny według tabeli (4) i obliczamy wartość tego wielomianu, czyli przybliżenia funkcji odwrotnej, w zerze.

Ze względów praktycznych interpolację odwrotną stosuje się dla niewielkiej liczby węzłów.

Metoda siecznych jest dwupunktową interpolacją odwrotną 😊

## Metoda siecznych i interpolacja odwrotna



## Kryterium stopu

Wszystkie cztery przedstawione wyżej metody — metoda bisekcji, *regula falsi*, metoda siecznych i interpolacja odwrotna — są metodami iteracyjnymi, Kiedy więc należy zatrzymać iterację uznając, że osiągnęliśmy już wystarczającą dokładność w lokalizacji miejsca zerowego?

- Rozwiązując równanie  $f(x) = 0$  możemy przyjąć, że jeśli znajdziemy  $\tilde{x}$  takie, że  $|f(\tilde{x})| < \varepsilon \ll 1$ , gdzie  $\varepsilon$  jest z góry ustaloną dokładnością, to  $\tilde{x}$  jest dostatecznie dobrym przybliżeniem miejsca zerowego. Jest to kryterium *naiwne*, ale najczęściej stosowane.
- Zauważmy, że wszystkie te metody sprowadzają się do iteracyjnego pomniejszania przedziału, w którym znajduje się poszukiwane miejsce zerowe, różniąc się jedynie *sposobem* pomniejszania tego przedziału. Wobec tego iterację uznajemy za zakończoną, **gdy przedział zawierający miejsce zerowe stanie się dostatecznie mały**,  $|x_n - x_{n-1}| < \varepsilon \ll 1$ , gdzie  $x_{n-1}, x_n$  są kolejnymi iteratami.

- Dodatkowo, dla metody siecznych i interpolacji odwrotnej, które nie muszą być zbieżne, zakładamy największą dopuszczalną liczbę iteracji. Po przekroczeniu tej liczby przyjmujemy, że metoda nie osiągnęła zbieżności. Nie należy się natomiast martwić, gdy długości przedziałów chwilowo nam wzrosną:  $|x_n - x_{n-1}| > |x_{n-1} - x_{n-2}|$ . Tak się w tej metodzie może zdarzyć i *nie musi* to świadczyć o rozbieżności metody.
- Dodatkowo, dla interpolacji odwrotnej, jeśli uzyskany ciąg wartości funkcji przestaje być monotoniczny, przerywamy iteracje, gdyż niespełnione są założenia analityczne leżące u podstaw metody.

## Metoda Newtona

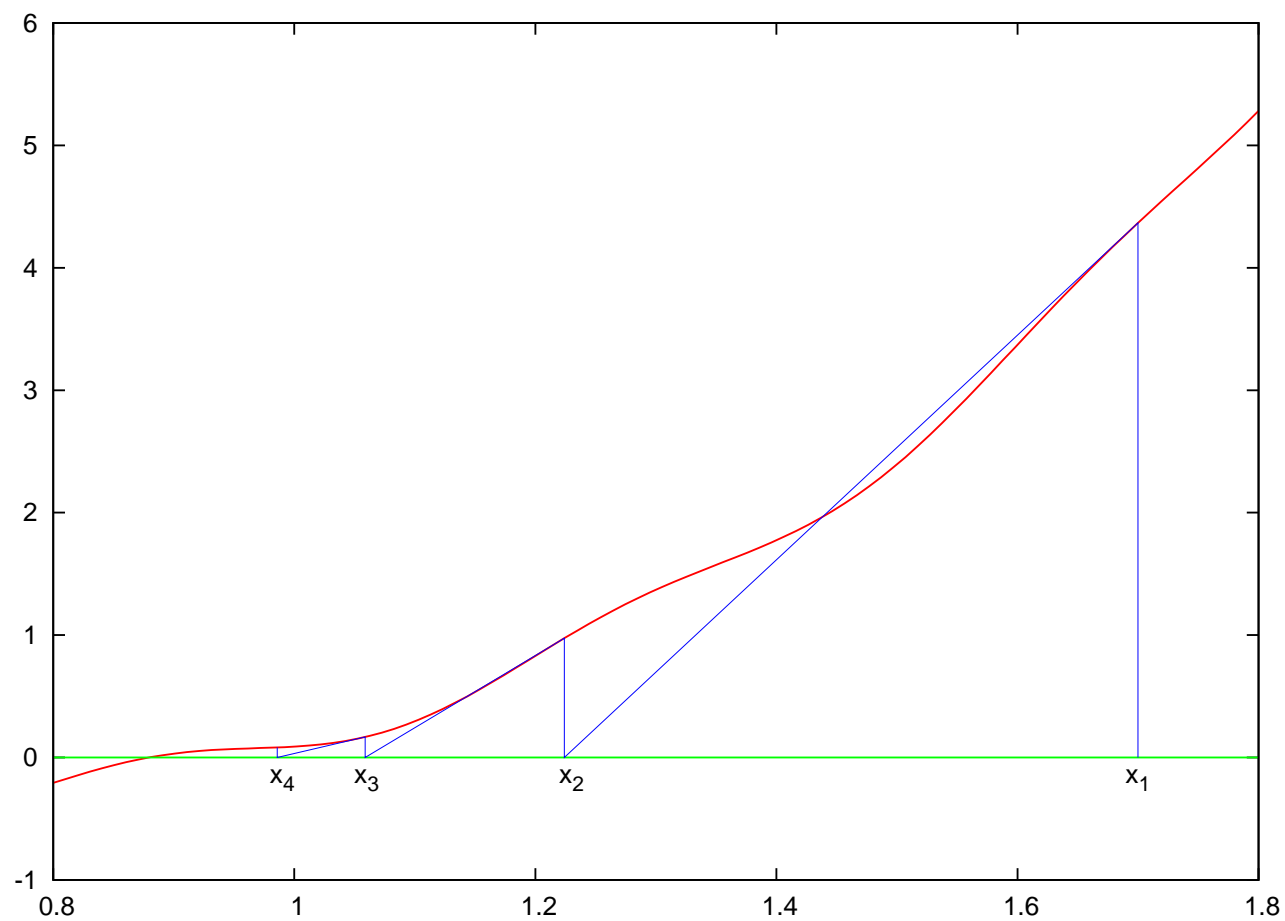
Przypuśćmy, że prawa strona równania (1) jest różniczkowalna. Rozwijamy tę funkcję w szereg Taylora wokół pewnego punktu

$$f(x_0 + \delta) \simeq f(x_0) + \delta \cdot f'(x_0) \quad (5)$$

a następnie **żądamy, aby lewa strona rozwinięcia (5) zniknęła**. Jak duży krok  $\delta$  powinniśmy wykonać?  $\delta = -f(x_0)/f'(x_0)$ . Przyjmujemy, że przesuwamy się do punktu  $x_1 = x_0 + \delta$  i powtarzamy całą procedurę. Przesuwamy się do kolejnego punktu — i tak dalej. Prowadzi to do iteracji

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}. \quad (6)$$

## Interpretacja geometryczna metody Newtona — metoda stycznych





## Kryterium zbieżności

Zauważmy, że punkt stały iteracji (6) jest rozwiązaniem równania  $f(x) = 0$ . Formalnie, jeżeli funkcja

$$g(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)} \quad (7)$$

(i) jest ciągła oraz (ii) przeprowadza pewien przedział domknięty  $[a, b]$  w ten sam przedział domknięty  $[a, b]$ , to na mocy twierdzenia Brouwera iteracja (6) ma w tym przedziale punkt stały, będący rozwiązaniem równania (1).

Problem leży w spełnieniu warunku (ii)

## Zbieżność kwadratowa

Niech funkcja  $f(x)$  ma *jednokrotne* miejsce zerowe w  $x = a$ , to znaczy

$$f(x) = (x - a)g(x), \quad g(a) \neq 0 \quad (8)$$

i  $g(x)$  jest różniczkowalna w otoczeniu  $x = a$ . Przyjmijmy, że  $x_n = a + \varepsilon$ ,  $|\varepsilon| \ll 1$ . Wówczas metoda Newtona (6) prowadzi do

$$\begin{aligned} x_{n+1} &= x_n - \frac{(x_n - a)g(x_n)}{g(x_n) + (x_n - a)g'(x_n)} \\ &= a + \varepsilon - \frac{\varepsilon}{1 + \frac{g'(a+\varepsilon)}{g(a+\varepsilon)}\varepsilon} \\ &\simeq a + \varepsilon - \varepsilon \left( 1 - \frac{g'(a+\varepsilon)}{g(a+\varepsilon)}\varepsilon \right) \simeq a + \frac{g'(a)}{g(a)}\varepsilon^2 \end{aligned} \quad (9)$$

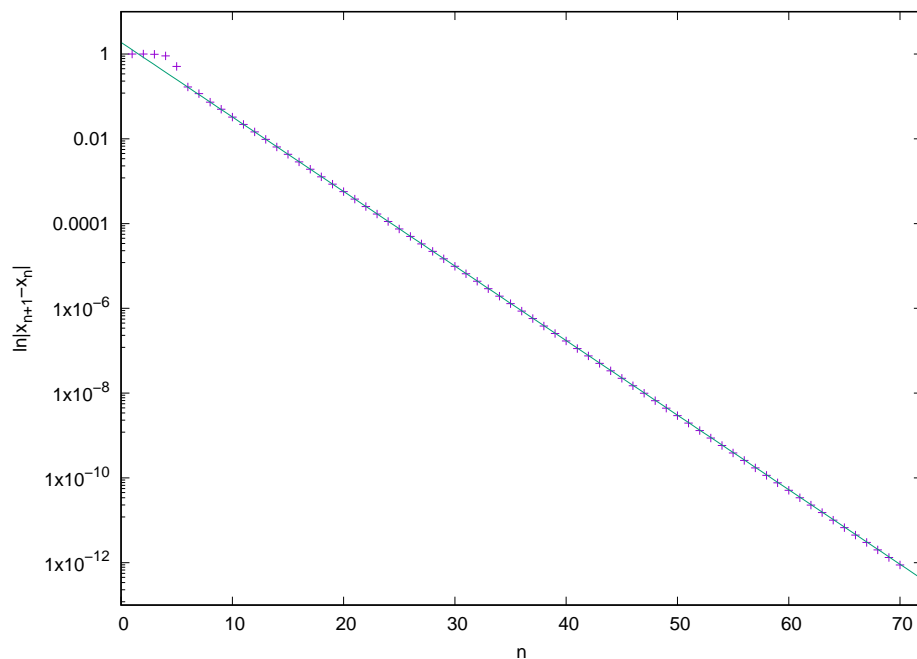
Widzimy, że dla *jednokrotnego* miejsca zerowego, jeśli w metodzie Newtona  $|x_n - a| = |\varepsilon| \ll 1$ , gdzie  $a$  jest miejscem zerowym, to  $|x_{n+1} - a| \sim \varepsilon^2$ , przy czym  $\varepsilon^2 \ll |\varepsilon| \ll 1$ . Zbieżność tego typu nazywamy **zbieżnością kwadratową**. Podkreślam, że zbieżność kwadratowa (9) zachodzi tylko dla punktów, które są dostatecznie blisko miejsca zerowego. Początkowe kroki mogą się wręcz **oddalać** od poszukiwanego miejsca zerowego, co *na ogół* nie szkodzi, gdyż największy wysiłek numeryczny wkłada się w precyzyjną lokalizację rozwiązania, nie w początkowe kroki.

## Przykład

Za pomocą metody Newtona rozwiąż z dokładnością do  $10^{-12}$  równanie

$$e^{2x} + e^x - 6 = 0 \quad (10)$$

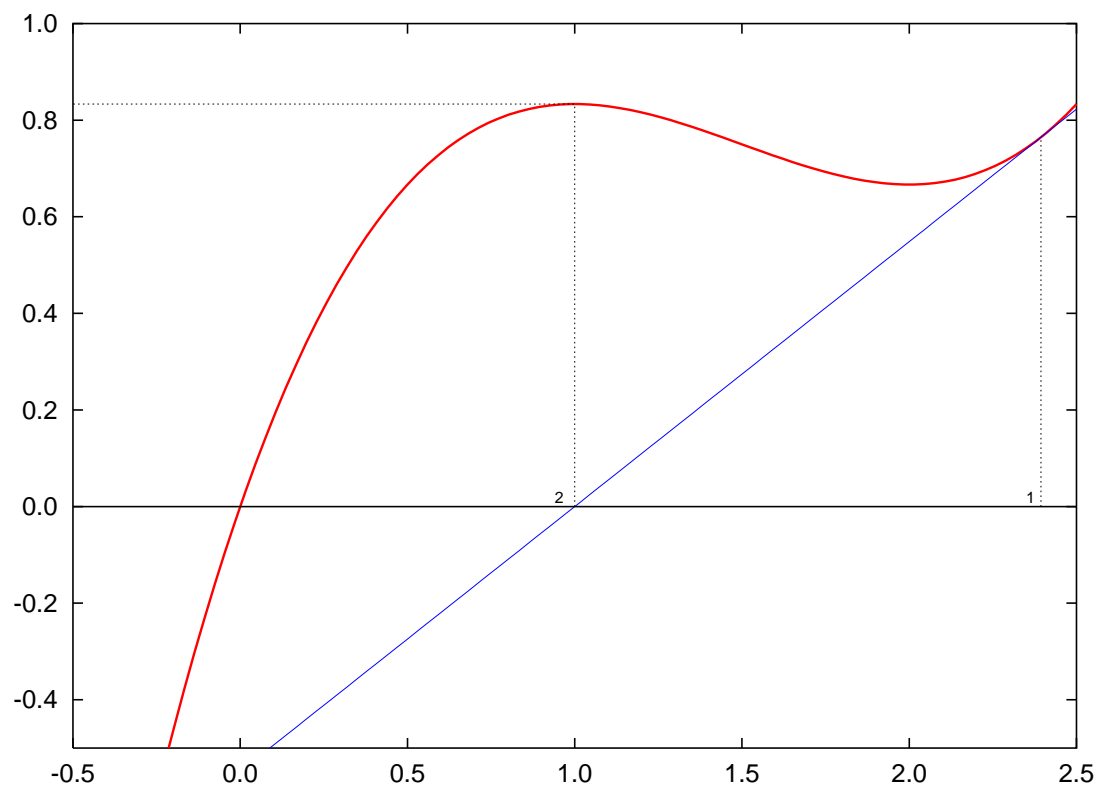
Po 70 iteracjach iteracja zatrzymuje się na  $x = 0.693147180560$ , gdyż  $|x_{70} - x_{69}| < 10^{-12}$ . Oznacza to, że numeryczne rozwiązanie leży gdzieś w przedziale  $(0.6931471805595, 0.6931471805605)$ . Analitycznym rozwiązaniem równania (10) jest  $\ln 2 \simeq 0.693147180559945$ .



Zwróćmy uwagę, że poza kilkoma początkowymi punktami, definiująca kryterium zbieżności wielkość  $\ln|x_{n+1} - x_n|$  układa się niemalże idealnie liniowo wraz z  $n$ .

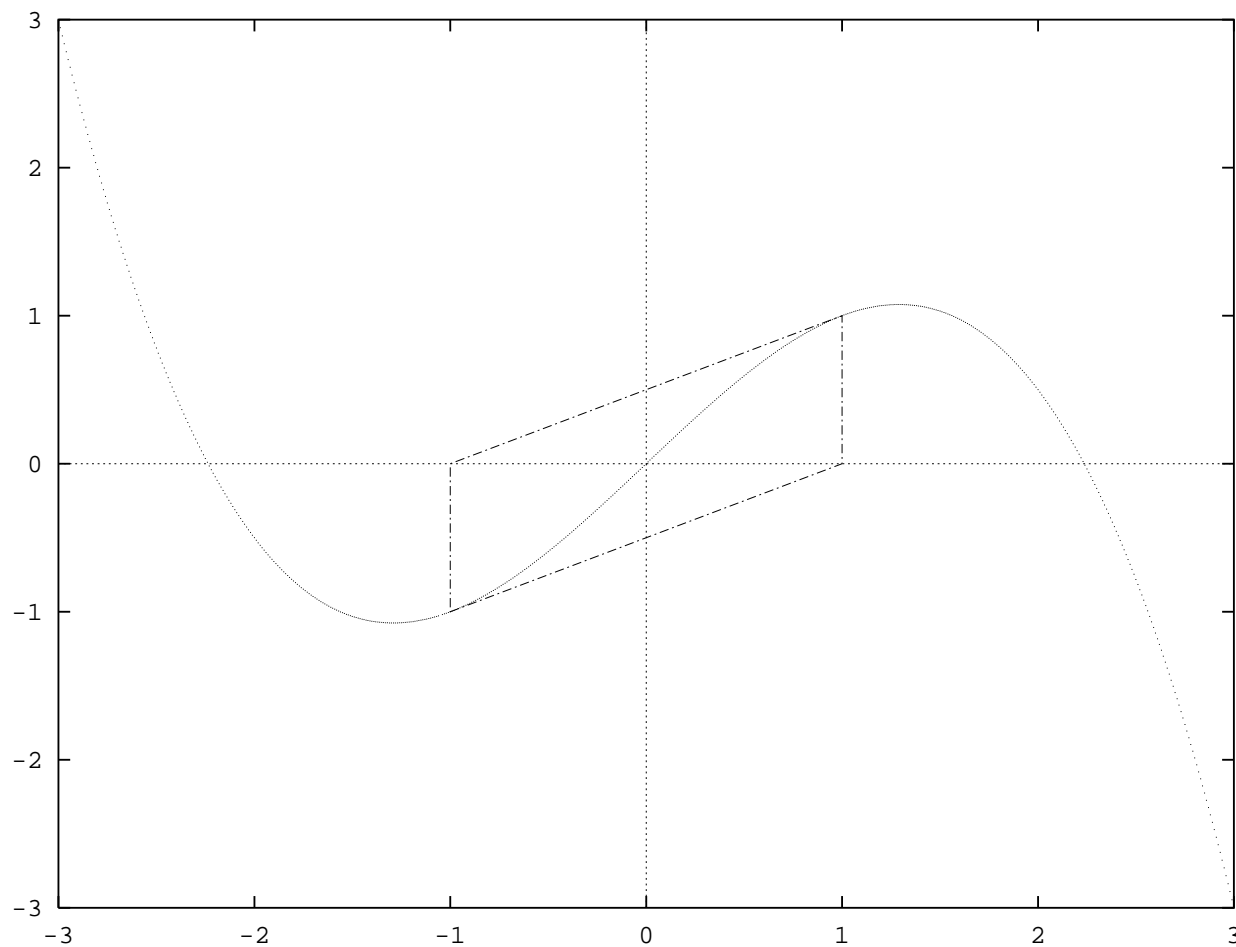
Niestety...

**Metoda Newtona może być rozbieżna!**

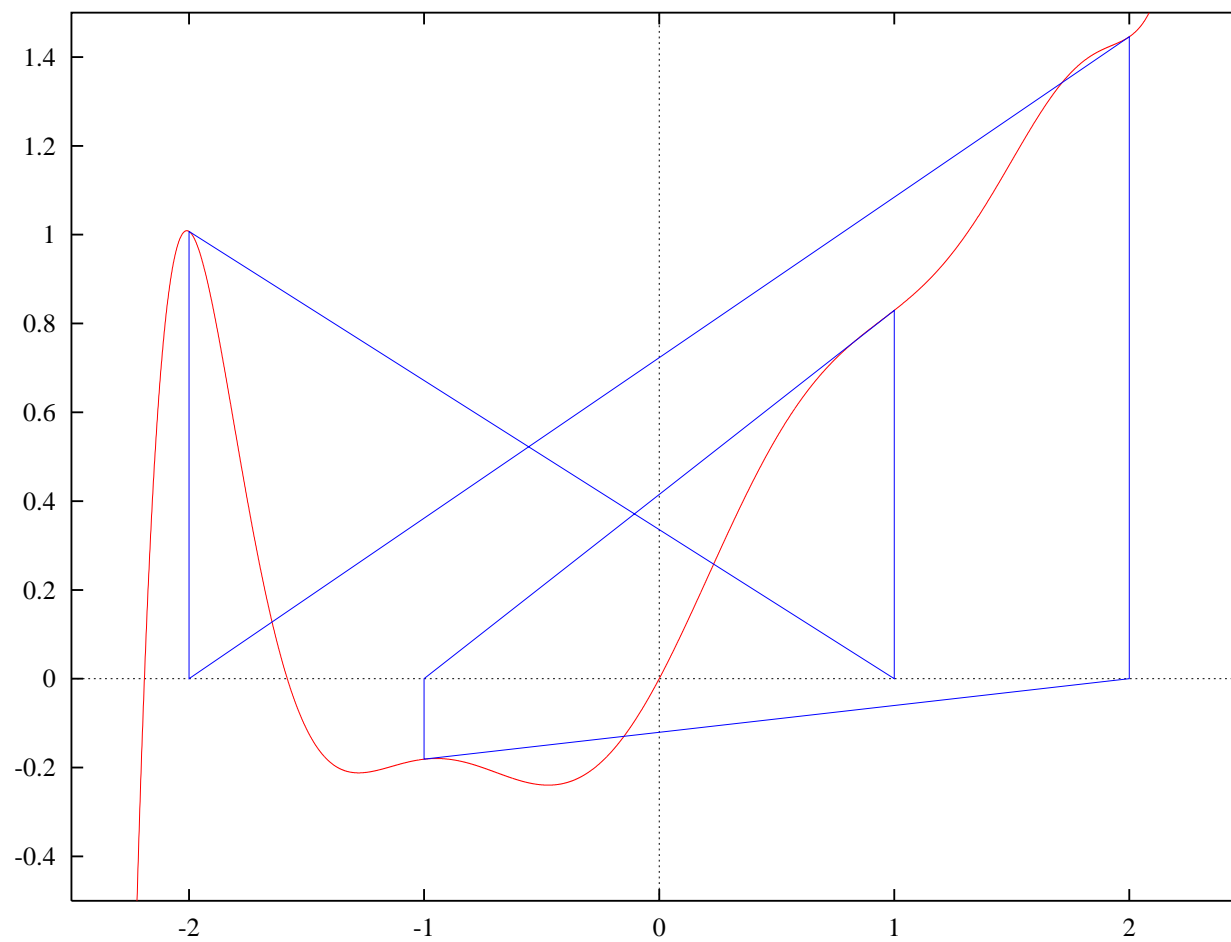


Metoda Newtona zawodzi w punktach, w których pochodna znika!

## Metoda Newtona może prowadzić do cykli

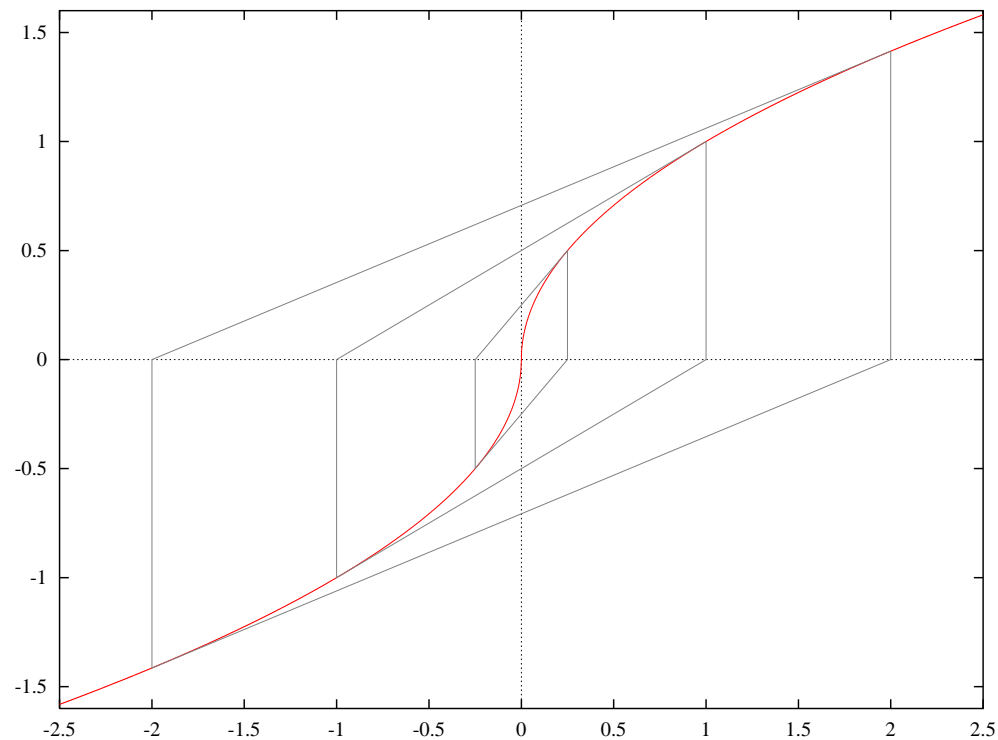


## Przykład czterocyklu





## Inny przykład cyklu



Metoda Newtona zastosowana do funkcji  $f(x) = \begin{cases} \sqrt{x} & x \geq 0 \\ -\sqrt{-x} & x < 0 \end{cases}$ .

- Metoda Newtona jest zbieżna *kwadratowo* do jednokrotnych miejsc zerowych (liczba iteracji potrzebnych do ustalenia każdego kolejnego miejsca dziesiętnego zmniejsza się o połowę).
- Jako kryterium zbieżności, jak poprzednio, możemy *naiwnie* przyjąć warunek  $|f(x_n)| < \varepsilon \ll 1$  lub — lepiej — że przedział, w którym znajduje się miejsce zerowe, jest już dostatecznie mały:  $|x_n - x_{n-1}| < \varepsilon \ll 1$ . Dodatkowo, ponieważ metoda może być rozbieżna, należy przyjąć maksymalną dopuszczalną liczbę iteracji.
- *Metoda Newtona jest tym szybciej zbieżna, im bliżej poszukiwanego miejsca zerowego leży początkowe przybliżenie.* Jeżeli początkowe przybliżenie jest “niedobre”, metoda Newtona może zawieść.
- Metoda Newtona jest zbieżna *liniowo* do wielokrotnych miejsc zerowych.

- Metodę Newtona można łatwo uogólnić na przypadek zespolony, aczkolwiek iteracja (6) zstartowana z rzeczywistego punktu początkowego dla rzeczywistej funkcji  $f(x)$  pozostaje rzeczywista.
- Istnienie wielocykli jest **bardzo ciekawe**, ale w praktyce nie stanowią one “numerycznego niebezpieczeństwa”: zdecydowana większość wielocykli jest niestabilna i szanse na trafienie na taki wielocykl są równe zeru. Z drugiej strony można udowodnić\*, że jeśli badaną funkcją jest wielomian o  $n_d$  różnych miejscach zerowych, a  $k$  jest liczbą pierwszą, metoda Newtona prowadzi do

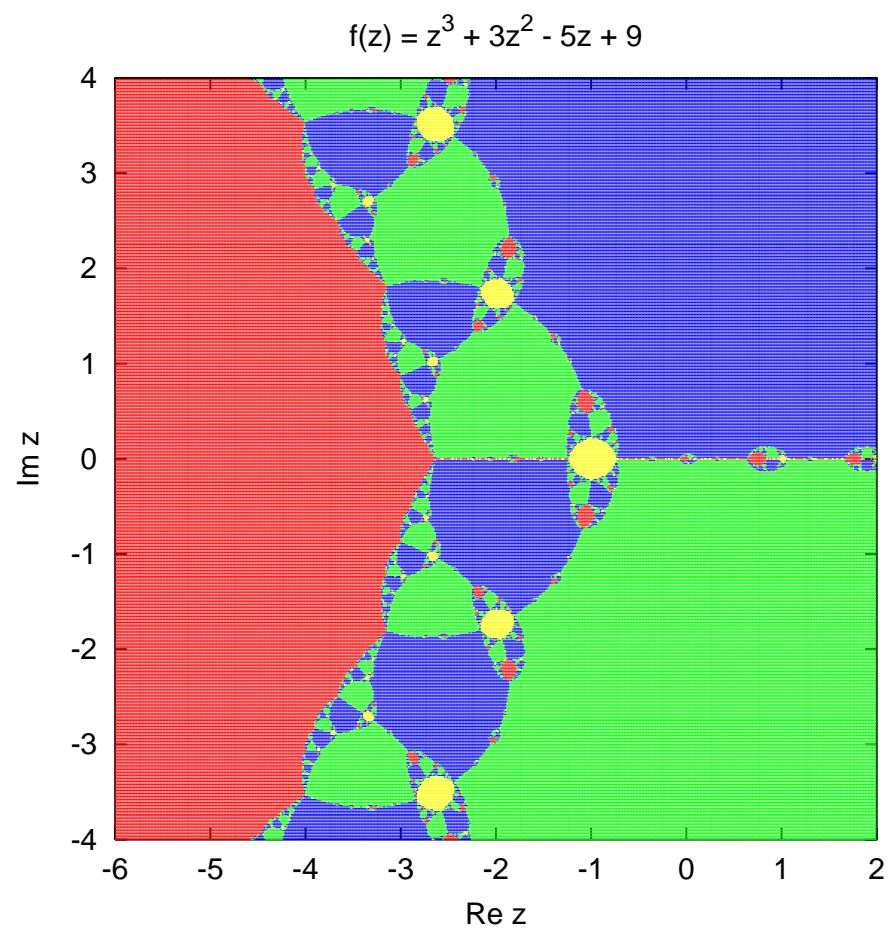
$$N_k = \frac{1}{k} (n_d^k - n_d) \quad (11)$$

różnych  $k$ -cykli.

\*Ł. Skowronek, P. F. Góra, *Acta Phys. Pol.* B38, 1909 (2007)

- **Basenem atrakcji** jakiegoś miejsca zerowego nazywam zbiór punktów o tej własności, że metoda Newtona zstartowana z takiego punktu, prowadzi do wskazanego miejsca zerowego. Granice basenów atrakcji poszczególnych miejsc zerowych w metodzie Newtona na płaszczyźnie zespolonej bardzo często są *fraktalne*. Na tych właśnie granicach leżą te wszystkie niestabilne wielocykle, o których była mowa wyżej. Jeżeli natomiast jakiś wielocykl jest stabilny, numeryczne odkrycie go może być równie ważne, co znalezienie miejsca zerowego.

## Wielomian ze stabilnym dwucyklem



## Tłumiona metoda Newtona

W pewnych przypadkach — na przykład aby uciec ze stabilnego wielocyklu — zamiast metody Newtona (6) stosuje się *tłumioną metodę Newtona* (ang. *damped Newton method*)

$$x_{n_1} = x_n - \alpha \frac{f(x_n)}{f'(x_n)} \quad (12)$$

gdzie  $\alpha \in (0, 1]$ . Aby uciec z wielocyklu, na 2-3 kroki metodę Newtona zastępuje się metodą tłumioną.

## Metody wykorzystujące drugą pochodną

Metoda Newtona opiera się na rozwinięciu Taylora (5) do pierwszego rzędu. Możemy to uogólnić na rozwinięcie do rzędu drugiego:

$$f(x_0 + \delta) \simeq f(x_0) + \delta \cdot f'(x_0) + \frac{1}{2}\delta^2 \cdot f''(x_0). \quad (13)$$

Jak poprzednio, żądamy, aby lewa strona zniknęła, co prowadzi do kroku

$$\delta = \frac{-f'(x_0) \pm \sqrt{[f'(x_0)]^2 - 2f(x_0)f''(x_0)}}{f''(x_0)}, \quad (14)$$

a dalej, po prostych przekształceniach, do iteracji

$$x_{n+1} = x_n - \frac{2f(x_n)}{f'(x_n) \pm \sqrt{[f'(x_n)]^2 - 2f(x_n)f''(x_n)}}. \quad (15)$$

Znak w mianowniku (15) wybieramy tak, aby moduł mianownika był **większy**. W odróżnieniu od metody Newtona, metoda (15) może prowadzić do zespolonych iteratów także dla rzeczywistych wartości początkowych.



## Metoda Halleya

Inną metodę daje zastosowanie metody Newtona do równania

$$g(x) = \frac{f(x)}{\sqrt{|f'(x)|}} = 0. \quad (16)$$

Każdy pierwiastek  $f(x)$ , który *nie* jest miejscem zerowym pochodnej, jest pierwiastkiem  $g(x)$ ; każdy pierwiastek  $g(x)$  jest pierwiastkiem  $f(x)$  (rozwiązaniem równania (1)). Po przekształceniach algebraicznych otrzymujemy iterację

$$x_{n+1} = x_n - \frac{2f(x_n)f'(x_n)}{2[f'(x_n)]^2 - f(x_n)f''(x_n)} \quad (17a)$$

lub w postaci alternatywnej

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)} \left[ 1 - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)} \cdot \frac{f''(x_n)}{2f'(x_n)} \right]^{-1}. \quad (17b)$$

## Układy równań algebraicznych

Niech  $g: \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}^N$  będzie funkcją klasy co najmniej  $C^1$ . Rozważamy równanie

$$g(\mathbf{x}) = 0, \quad (18)$$

formalnie równoważne układowi równań

$$g_1(x_1, x_2, \dots, x_N) = 0, \quad (19a)$$

$$g_2(x_1, x_2, \dots, x_N) = 0, \quad (19b)$$

...

$$g_N(x_1, x_2, \dots, x_N) = 0. \quad (19c)$$

Rozwiązywanie układów równań algebraicznych jest trudne, gdyż geometrycznie oznacza znalezienie punktu (bądź punktów) przecięcia krzywych (19). O tych funkcjach na ogół nic nie wiemy, zmiana jednej nie wpływa na zmianę innej itd.

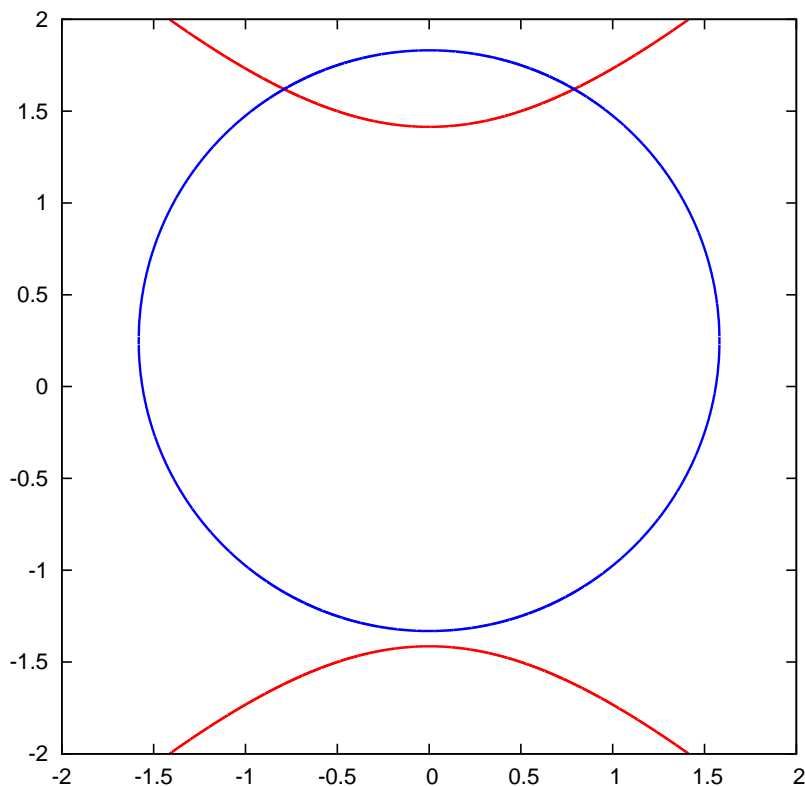
## Przykład

W zależności od parametrów, układ równań

$$(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2 - r^2 = 0 \quad (20a)$$

$$x^2 - y^2 - b^2 = 0 \quad (20b)$$

może mieć 0, 1, 2, 3 lub 4 rozwiązania, co wiemy z “zainwestowania” do analizy układu (20) naszej wiedzy z zakresu krzywych stożkowych.



Interpretacja geometryczna  
układu równań

$$\begin{cases} x^2 + \left(y - \frac{1}{4}\right)^2 = \frac{5}{2} \\ y^2 - x^2 = 2 \end{cases}$$

Punkt leżący pomiędzy  
dolną gałęzią czerwonej  
hiperboli a niebieskim  
okręgiem odpowiada  
minimum *lokalnemu* funkcji  
 $G$  (patrz niżej).

## Wielowymiarowa metoda Newtona

Rozwijając funkcję  $g$  w szereg Taylora do pierwszego rzędu otrzymamy

$$g(\mathbf{x} + \delta\mathbf{x}) \simeq g(\mathbf{x}) + \mathbf{J}\delta\mathbf{x}, \quad (21)$$

gdzie  $\mathbf{J}$  jest jakobianem funkcji  $g$ :

$$\mathbf{J}(\mathbf{x})_{ij} = \left. \frac{\partial g_i}{\partial x_j} \right|_{\mathbf{x}}. \quad (22)$$

Jaki krok  $\delta\mathbf{x}$  musimy wykonać, aby znaleźć się w punkcie spełniającym równanie (18)? **Żądamy aby  $g(\mathbf{x} + \delta\mathbf{x}) = 0$** , skąd otrzymujemy

$$\delta\mathbf{x} = -\mathbf{J}^{-1}g(\mathbf{x}). \quad (23)$$

Prowadzi to do następującej iteracji:

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \mathbf{J}^{-1}(\mathbf{x}_k)\mathbf{g}(\mathbf{x}_k). \quad (24)$$

Oczywiście zapis  $\mathbf{z} = \mathbf{J}^{-1}\mathbf{g}$  należy rozumieć w ten sposób, że  $\mathbf{z}$  spełnia równanie  $\mathbf{J}\mathbf{z} = \mathbf{g}$ . *Nie należy konstruować jawnej odwrotności jacobianu.*

Uwaga: W metodzie (24) jacobian trzeba obliczać w każdym kroku. Oznacza to, że w każdym kroku trzeba rozwiązywać *inny* układ równań liniowych, co czyni metodę dość kosztowną, zwłaszcza jeśli  $N$  (wymiar problemu) jest znaczne. Często dla przyspieszenia obliczeń macierz  $\mathbf{J}$  zmieniamy nie co krok, ale co kilka kroków — pozwala to użyć tej samej faktoryzacji  $\mathbf{J}$  do rozwiązania kilku kolejnych równań  $\mathbf{J}\mathbf{z} = \mathbf{g}(\mathbf{x}_k)$ . Jest to dodatkowe uproszczenie, ale jest ono bardzo wydajne przy  $N \gg 1$ .

## Rozwiązywanie równań nieliniowych a minimalizacja

Metoda Newtona czasami zawodzi ☹. Ponieważ rozwiązywanie równań algebraicznych jest “trudne”, natomiast minimalizacja jest “łatwa”, niektórzy skłonni są rozważać funkcję  $G: \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}$

$$G(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \|\mathbf{g}(\mathbf{x})\|^2 = \frac{1}{2} (\mathbf{g}(\mathbf{x}))^T \mathbf{g}(\mathbf{x}) \quad (25)$$

i szukać jej minimum zamiast rozwiązywać (18). *Globalne* minimum  $G = 0$  odpowiada co prawda rozwiązaniu (18), jednak  $G$  może mieć wiele minimumów lokalnych, *nie mamy także gwarancji*, że globalne minimum  $G = 0$  istnieje. Nie jest to więc dobry pomysł.

## Metoda globalnie zbieżna

Rozwiązaniem jest połączenie idei minimalizacji funkcji (25) i metody Newtona. Przypuśćmy, iż chcemy rozwiązywać równanie (18) metodą Newtona. Krok iteracji wynosi

$$\delta \mathbf{x} = -\mathbf{J}^{-1} \mathbf{g}. \quad (26)$$

Z drugiej strony mamy

$$\frac{\partial G}{\partial x_i} = \frac{1}{2} \sum_j \left( \frac{\partial g_j}{\partial x_i} g_j + g_j \frac{\partial g_j}{\partial x_i} \right) = \sum_j J_{ji} g_j \quad (27)$$

a zatem  $\nabla G = \mathbf{J}^T \mathbf{g}$ .



Jak zmienia się funkcja  $G$  (25) po wykonaniu kroku Newtona (26)?

$$(\nabla G)^T \delta \mathbf{x} = \mathbf{g}^T \mathbf{J} \left( -\mathbf{J}^{-1} \right) \mathbf{g} = -\mathbf{g}^T \mathbf{g} < 0, \quad (28)$$

a zatem *kierunek kroku Newtona jest lokalnym kierunkiem spadku  $G$* . Jednak przesunięcie się o pełną długość kroku Newtona nie musi prowadzić do spadku  $G$ . Postępujemy wobec tego jak następuje:

1.  $w = 1$ . Oblicz  $\delta \mathbf{x}$ .
2.  $\mathbf{x}_{\text{test}} = \mathbf{x}_i + w \delta \mathbf{x}$ .
3. Jeśli  $G(\mathbf{x}_{\text{test}}) < G(\mathbf{x}_i)$ , to
  - (a)  $\mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{x}_{\text{test}}$
  - (b) *goto* 1
4. Jeśli  $G(\mathbf{x}_{\text{test}}) > G(\mathbf{x}_i)$ , to
  - (a)  $w \rightarrow w/2$
  - (b) *goto* 2

Jest to zatem forma *tłumionej (damped) metody Newtona*.

Zamiast połowienia kroku, można używać innych strategii poszukiwania  $w$  prowadzących do zmniejszenia się wartości  $G$ .

Jeśli wartość  $w$  spadnie poniżej pewnego akceptowalnego progu, obliczenia należy przerwać, jednak (28) gwarantuje, że *istnieje* takie  $w$ , iż  $w \delta \mathbf{x}$  prowadzi do zmniejszenia się  $G$ .

Powyższa metoda jest zawsze zbieżna do *jakiegoś* minimum funkcji  $G$ , ale niekoniecznie do jej minimum globalnego, czyli do rozwiązania równania (18).

Jeżeli znajdziemy minimum lokalne  $G_{\min} > \varepsilon$ , gdzie  $\varepsilon > 0$  jest pożądaną tolerancją, należy spróbować rozpocząć z innym warunkiem początkowym. Jeżeli kilka różnych warunków początkowych nie daje rezultatu, należy się poddać.

Szansa na znalezienie numerycznego rozwiązania układu równań (18) jest tym większa, *im lepszy jest warunek początkowy*. Należy wobec tego zainvestować całą naszą wiedzę o funkcji  $g$  w znalezienie warunku początkowego; analogiczna uwaga obowiązuje w wypadku stosowania wielowymiarowej metody Newtona (24).

## Bardzo ważna uwaga

Wszystkie przedstawione tu metody wymagają znajomości  
analitycznych wzorów na pochodne odpowiednich funkcji.

Używanie powyższych metod w sytuacji, w których pochodne  
należy aproksymować numerycznie, *na ogół nie ma sensu.*

## Wielowymiarowa metoda siecznych — metoda Broydena

Niekiedy analityczne wzory na pochodne są nieznane, niekiedy samo obliczanie jacobianu, wymagające obliczenia  $N^2$  pochodnych cząstkowych, jest numerycznie zbyt kosztowne. W takich sytuacjach *czasami* używa się metody zwanej niezbyt ściśle “wielowymiarową metodą siecznych”. Podobnie jak w przypadku jednowymiarowym, gdzie pochodną zastępuje się ilorazem różnicowym

$$g'(x_{i+1}) \simeq \frac{g(x_{i+1}) - g(x_i)}{x_{i+1} - x_i}, \quad (29)$$

jakobian w kroku Newtona zastępujemy wyrażeniem przybliżonym: Zamiast  $\mathbf{J} \delta \mathbf{x} = -\mathbf{g}(\mathbf{x})$  bierzemy  $\mathbf{B} \Delta \mathbf{x} = -\Delta \mathbf{g}$ . Macierz  $\mathbf{B}$  jest przybliżeniem jacobianu, poprawianym w każdym kroku iteracji. Otrzymujemy zatem

$$\mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{x}_i - \mathbf{B}_i^{-1} \mathbf{g}(\mathbf{x}_i), \quad (30)$$

natomiast poprawki  $\mathbf{B}$  obliczamy jako

$$\mathbf{B}_{i+1} = \mathbf{B}_i + \frac{(\Delta \mathbf{g}_i - \mathbf{B}_i \Delta \mathbf{x}_i) (\Delta \mathbf{x}_i)^T}{(\Delta \mathbf{x}_i)^T \Delta \mathbf{x}_i}, \quad (31)$$

gdzie  $\Delta \mathbf{x}_i = \mathbf{x}_{i+1} - \mathbf{x}_i$ ,  $\Delta \mathbf{g}_i = \mathbf{g}(\mathbf{x}_{i+1}) - \mathbf{g}(\mathbf{x}_i)$ . Ponieważ poprawka do  $\mathbf{B}_i$  ma postać iloczynu diadycznego dwu wektorów, do obliczania<sup>†</sup>  $\mathbf{B}_{i+1}^{-1} \mathbf{g}(\mathbf{x}_{i+1})$  można skorzystać ze wzoru Shermana-Morrisona.

Metoda ta wymaga inicjalizacji poprzez podanie  $\mathbf{B}_1$  oraz wektora  $\mathbf{x}_1$ . To drugie nie jest niczym dziwnym; co do pierwszego, jeśli to tylko możliwe, można przyjąć  $\mathbf{B}_1 = \mathbf{J}(\mathbf{x}_1)$ .

<sup>†</sup>Czyli tak **naprawdę** do **rozwiązywania pewnego układu równań liniowych!**