

Közelítő és szimbolikus számítások haladóknak

8. előadás

Nemlineáris egyenletrendszerek megoldása, fixpontiteráció és a Newton-módszer változatai

Nemlineáris egyenletrendszerek

Nemlineáris egyenletrendszer

$$F_1(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0$$

$$F_2(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0$$

⋮

$$F_n(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0$$

$$F_i : R^n \rightarrow R \quad (1 \leq i \leq n)$$

Nemlineáris egyenletrendszer

- Tömörebb írásmód

$$F(x) = 0$$

$$F : R^n \rightarrow R^n$$

$$F(x) = (F_1(x), F_2(x), \dots, F_n(x))$$

Hány megoldása lehet egy egyenletrendszernek?

- Lineáris egyenletrendszer esetén 0,1 vagy végtelen sok.
- Nemlineáris esetben **akármennyi**.

Példa. Az alábbi egyenletrendszernek a paraméterek alkalmas megválasztásával bármennyi gyöke lehet (0,1,2,3,4,...végtelen sok).

$$\alpha x_1 + \beta x_2 + \gamma = 0$$

$$\sin x_1 - x_2 = 0$$

Nemlineáris egyenletek gyökeinek közelítése

- Newton-módszer (érintő-módszer)

$$f(x) = 0$$
$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$$

- A Newton-módszer iterációs formulája **nemlineáris egyenletrendszerek** megoldására is használható. Ehhez azonban szükségünk van a derivált fogalmának egy általánosításához.

Derivált

Definíció. Az $F : R^n \rightarrow R^m$ leképezés (Fréchet-) differenciálható az x^* helyen, ha létezik olyan $A \in R^{m \times n}$ mátrix, amellyel

$$\lim_{h \rightarrow 0} \frac{\| F(x^* + h) - F(x^*) - Ah \|}{\| h \|} = 0$$

Az A mátrixot az F függvény x^* -beli deriváltjának nevezzük és $F'(x^*)$ -gal jelöljük.

Derivált függvény

Definíció. Az F függvény differenciálható az $D \subseteq R^n$ halmazon, ha bármely $x^* \in D$ helyen létezik $F'(x^*)$. Ekkor az

$$F'(x) : D \subseteq R^n \rightarrow R^{m \times n}$$

az (első) derivált függvény.

Megjegyzés

- Az $m=n=1$ **speciális esetben** a differenciálhatóság szokásos definíciójával ekvivalens fogalomhoz jutunk.

$$\lim_{h \rightarrow 0} \frac{|F(x^* + h) - F(x^*) - F'(x^*)h|}{|h|} = 0$$

- A bevezetett derivált szorosan kapcsolódik a **parciális differenciálhatósághoz**.

Megjegyzés

- Ha $F'(x^*)$ létezik, akkor egyértelmű, és megegyezik a parciális deriváltak helyettesítési értékeiből álló **Jacobi-mátrixszal** ($m=n$ esetén):

$$a_{ij} = \frac{\partial F_i(x^*)}{\partial x_j}$$

$$1 \leq i, j \leq n$$

Példa

Határozzuk meg az alábbi függvény deriváltját.

$$F : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^2 \quad F(x) = \begin{pmatrix} x_1^2 + x_2 \\ x_2 + x_3 \end{pmatrix}$$

A derivált függvény:

$$F'(x) = \begin{pmatrix} 2x_1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

Fixponttétel, fixpontiteráció

Fixpont

Az $F(x) = 0$ egyenletrendszer hozzuk ekvivalens módon a következő alakra:

$$x = G(x).$$

A fenti egyenletrendszer megoldásai a G függvény **fixpontjai**.

Az eredeti egyenletrendszer megoldásának problémáját **fixpontok meghatározására** vezethetjük vissza.

Kontrakció

Definíció. Legyen $D \subseteq \mathbb{R}^n$ nem üres halmaz. A $G: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ leképezés kontrakció D -ben, ha létezik olyan $0 \leq \kappa < 1$ kontrakciós konstans, hogy bármely $u, v \in D$ -re

$$\|G(u) - G(v)\| \leq \kappa \|u - v\|.$$

- A kontrakciós konstans választása nem egyértelmű és függhet a normától is.
- A kontrakcióból következik a folytonosság₁₄

Kontrakció és fixpont

- Ha G kontrakció D -ben, $x_0 \in D$ és az

$$x_{n+1} = G(x_n)$$

képlettel definiált $\{x_n\}$ sorozat minden tagja D -ben van, akkor $\{x_n\}$ **Cauchy-sorozat**.

- Legyen $D \subseteq \mathbb{R}^n$ nem üres zárt halmaz és a $G : D \rightarrow D$ függvény kontrakció D -ben. Ekkor G -nek **pontosan egy** x^* fixpontja van D -ben.

(Banach-féle fixponttétel véges dimenziós vektorterekre vonatkozó speciális esete.)

Brouwer-féle fixponttétel

- Legyen $D \subseteq \mathbb{R}^n$ nem üres korlátos zárt halmaz és a $G : D \rightarrow D$ függvény folytonos D -ben. Ekkor G -nek van x^* fixpontja D -ben.
- Az egyértelműség még az egydimenziós esetben sem áll fenn. Pl. a $[0,1] \rightarrow [0,1]$ identikus leképezésre minden $[0,1]$ pont fixpont.

Egyenletrendszer megoldása fixpontiterációval

Feladat: Az $F(x)=0$ x^* gyökének közelítése.

Eljárás: Hozzuk ekvivalens átalakításokkal az egyenletrendszert $x=G(x)$ alakra, válasszunk alkalmas x_0 **kezdőértéket** és képezzük az $x_{n+1} = G(x_n)$ **iterációs sorozat** tagjait.

A G függvényt **iterációs függvénynek** nevezzük.

Globális és lokális konvergencia

- Az iteráció **globálisan konvergens**, ha tetszőleges kezdőértéket választva a megoldáshoz tart az iteráció sorozat.
- Az iteráció **lokálisan konvergens**, ha a gyöknek van olyan környezete, hogy abból tetszőleges kezdőelemet választva, az iteráció sorozat nem lép ki és tart a megoldáshoz.

Ostrowski-tétel

Legyen $G : R^n \rightarrow R^n$ leképezés, x^* a G fixpontja. Ha G differenciálható x^* -ban és a $G'(x^*)$ derivált mátrix spektrálsugara kisebb mint 1, akkor az iteráció lokálisan konvergens.

- A tétel kétféle értelemben is lokális: 1) lokális konvergenciát mond ki, 2) csak lokális differenciálhatóságot követel meg.

A Newton-módszer és változatai

Newton-módszer

- Tekinhető úgy, mint a fixpont-iteráció speciális esete, amikor a G iterációs függvényt így definiáljuk:

$$G(x) = x - (F'(x))^{-1} F(x)$$

- A Newton-módszer iterációs formulája:

$$x_{n+1} = x_n - (F'(x_n))^{-1} F(x_n)$$

- A módszer akkor alkalmazható, ha

$$F'(x_n)$$

nem szinguláris.

Példa

- Közelítsük a Newton-módszerrel az alábbi egyenletrendszer egyik megoldását a $(-0.6, 0.6)$ pontból kiindulva.

$$x^3 - 3xy^2 = 1$$

$$3x^2y - y^3 = 0$$

Megoldás

A Jacobi-mátrix és inverze: $J(x_n, y_n) = 3 \begin{pmatrix} x_n^2 - y_n^2 & -2x_n y_n \\ 2x_n y_n & x_n^2 - y_n^2 \end{pmatrix}$

$$J^{-1}(x_n, y_n) = \frac{1}{3(x_n^2 + y_n^2)^2} \begin{pmatrix} x_n^2 - y_n^2 & 2x_n y_n \\ -2x_n y_n & x_n^2 - y_n^2 \end{pmatrix}$$

(-0.6000, 0.6000)

(-0.4000, 0.8629)

(-0.4998, 0.8660)

(-0.5000, 0.8660)

(-0.4999, 0.8660)

...

A kezdőértéktől függően az eljárással közelíthetők az egyenletrendszer megoldásai:

$$\left(-\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2} \right), \left(-\frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2} \right), (1, 0)$$

Megjegyzés

- A gyakorlatban az invertálást elkerülik az alábbi módon:

$$s_n := x_{n+1} - x_n$$

$$F'(x_n)s_n = -F(x_n) \quad (\text{lin. egyenletrend.})$$

$$x_{n+1} = x_n + s_n$$

Vesd össze a fentieket az iterációs képlettel:

$$x_{n+1} = x_n - (F'(x_n))^{-1} F(x_n)$$

Lokális konvergencia tétel (Baluev tétele)

Legyen $F : R^n \rightarrow R^n$ leképezés és x^* az

$F(x) = 0$ egyenletrendszer megoldása.

Tegyük fel, hogy megadhatók olyan $\beta, \gamma, \delta, \sigma > 0$

konstansok, hogy $\sigma = \beta\gamma/2$, $\delta\sigma < 1$, F

folytonosan differenciálható $S_\delta(x^*)$ -ban,
továbbá

a) $\| (F'(x))^{-1} \| \leq \beta$, bármely $x \in S_\delta(x^*)$ -ra

b) $\| F'(u) - F'(v) \| \leq \gamma \| u - v \|$ bármely

$u, v \in S_\delta(x^*)$ -ra.

Lokális konvergencia tétel (folytatás)

Ekkor tetszőleges $x_0 \in S_\delta(x^*)$ kezdőértéket választva képezhető az

$$x_{n+1} = x_n - (F'(x_n))^{-1} F(x_n)$$

képlettel definiált iterációs sorozat, és a következőket teljesíti bármely $n \geq 1$ -re:

az iteráció lokálisan konvergens, azaz

(i) $x_n \in S_\delta(x^*)$

(ii) $x_n \rightarrow x^*$ és x^* az $F(x) = 0$ egyetlen megoldása az $S_\delta(x^*)$ környezetben,

Lokális konvergencia tétel (vége)

továbbá érvényesek az alábbi
hibabecslések ($e_n = x_n - x^*$ a hibavektor):

$$(iii) \quad \|e_n\| \leq \sigma \|e_{n-1}\|^2$$

$$(iv) \quad \|e_n\| \leq \frac{1}{\sigma} (\sigma \|e_0\|)^{2^n}$$

Megjegyzések

- A konvergencia rendje legalább 2.
- A Newton-módszer intervallumos változata (intervallum aritmetikán alapuló kiterjesztése), használható matematikai állítások **számítógépes bizonyítására**, ahogyan más fixpontiterációs módszerek is.
- Számítógépes bizonyítások (négyszín tétel, Kepler-probléma, körpakolási feladatok)

Globális konvergencia tétel

Legyen az $F : R^n \rightarrow R^n$ függvény folytonosan differenciálható és konvex R^n -ben. Tegyük fel, hogy az $F(x) = 0$ egyenletrendszernek létezik $x^* \in R^n$ megoldása, $F'(x)$ reguláris és

$$(F'(x))^{-1} \geq O$$

R^n -ben mindenütt.

Globális konvergencia tétel (folytatás)

Ekkor az x^* megoldás egyértelmű, és tetszőleges $x_0 \in R^n$ kezdőértéket választva a Newton-módszerrel számolt

$$x_{n+1} = x_n - (F'(x_n))^{-1} F(x_n)$$

iterációs sorozat x^* -hoz konvergál.

A konvergencia monoton:

$$x^* \leq x_{n+1} \leq x_n \quad (n \geq 1)$$

A Newton-módszer változatai

- **Egyszerűsített Newton-módszer.** A Jacobi-mátrix minden elemének minden lépésben szükséges újraszámolását kerülhetjük el vele, mivel csak az induláskor számítjuk ki a parciális deriváltakat. Az egyszerűsített Newton-módszer konvergencia tétele alapján a konvergencia rendje legalább lineáris.

$$x_{n+1} = x_n - (F'(x_0))^{-1} F(x_n)$$

- **Kvázi-Newton módszerek.** Felfogathatók úgy is, mint a nemlineáris egyenletek gyökének a szelő-módszerrel történő közelítésének egyfajta általánosításai.

Deriválás számítógéppel

- Deriválás „kézzel”, vagy szimbolikus számításokat segítő programmal (pl. Maple, Mathematica, Matlab)
- Numerikus deriválás (δ kicsi)

$$f'(x) \approx \frac{f(x + \delta) - f(x)}{\delta}$$

- Automatikus deriválás

Automatikus deriválás

- **Együtt számoljuk** az adott függvényre ismert kiszámítási eljárást az egyes műveletekhez tartozó **deriválási szabályokkal**.
- A változóhoz egy **elempárt** rendelünk, amelynek első komponense a függvényértéknek, a második a derivált értékének felel meg.

Példa

$$f(x) = (x-1)^2 \quad f'(2) = ?$$

Az x változóhoz hozzárendeljük a $(2, 1)$ számpárt. Itt 2 a helyettesítési érték, 1 az x -nek x szerinti deriváltja.

$$(2, 1) - (1, 0) = (1, 1) \quad (\text{Az } (1, 0) \text{ az } 1\text{-es értékhez tartozik.})$$

$$(1, 1) \times (1, 1) = \mathbf{(1, 2)} \text{ az eredmény.}$$

(Itt a második komponens kiszámításánál használtuk az $(fg)' = f'g + fg'$ összefüggést.)

Függvényminimalizálás

- Többváltozós f függvény stacionárius pontjainak meghatározásához nemlineáris egyenletrendszer kell megoldanunk.

Stacionárius egyenletrendszer:

$$F(x) = \nabla f(x) = 0$$

A Newton-módszerben szereplő F deriváltja, f Hesse-mátrixával egyezik meg:

$$F'(x) = \nabla_{xx}^2 f(x) = \left[\frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_i \partial x_j} \right]_{i,j=1}^n$$

Gyakorló feladatok

Gyakorló feladatok

- Mutassa meg, hogy az alábbi leképezés kontrakció a megadott halmazon.

$$G(x_1, x_2) = \begin{pmatrix} \frac{1}{6} e^{-(x_1^2 + x_2^2)} \\ \frac{1}{6} (x_1^2 - x_2^2) \end{pmatrix}$$

$$D = \{(x_1, x_2) \mid 0 \leq x_1, x_2 \leq 1\}$$

Gyakorló feladatok

- Közelítse Newton-módszerrel az alábbi nemlineáris egyenletrendszer megoldását.

$$\sin(x_1 + x_2) - \frac{3}{2}x_1 = 0$$

$$x_1^2 + x_2^2 - 1 = 0$$

Gyakorló feladatok

- Határozza meg optimalizálással az alábbi nemlineáris egyenletrendszer megoldását.

$$x_1^2 + x_2 - 5 = 0$$

$$x_1 + x_2^2 + 2 = 0$$

Irodalomjegyzék

- John H. Mathews, *Numerical Methods for Mathematics, Science, and Engineering*, Second Edition, Prentice Hall, Englewood Cliffs, 1992.
- Mihálykó Csaba – Virágh János, *Közelítő és szimbolikus számítások. Feladatgyűjtemény*, Typotex, 2011.
- Virágh János, *Numerikus matematika*, JATEPress, Szeged, 1997.