

NUMERIKUS MÓDSZEREK

BEVEZETÉS A NUMERIKUS MÓDSZEREKBE

ELŐADÁS JEGYZET – 2020. NOVEMBER 10.

KÉSZÍTETTE: DR. NAGY NOÉMI

Newton módszer (folytatás)

Tétel (A Newton módszer konvergenciája): Tegyük fel, hogy teljesülnek az alábbiak:

- (1) $f \in C^2[a, b]$, azaz f kétszer folytonosan differenciálható $[a, b]$ -n.
- (2) $f'(x) \neq 0$ és $f''(x) \neq 0$, ha $x \in [a, b]$, ugyanis
ha $f'(x) = 0$ lenne, akkor x -ben az érintő párhuzamos lenne az x -tengellyel és
ha $f''(x) = 0$ lenne, akkor x -ben inflexió pont lenne, így eze esetekben megakadna az iteráció.
- (3) $f(x) = 0$ -nak van megoldása $[a, b]$ -n, azaz $f(a) \cdot f(b) < 0$.
- (4) $x_0 \in [a, b]$ kezdőpont választása: olyan pontot kell választanunk, mely $[a, b]$ -beli és $f(x_0)$ és $f''(x_0)$ előjele azonos, azaz $f(x_0) \cdot f''(x_0) > 0$.

Ha az (1)-(4) feltételek teljesülnek, akkor az x_0 pontból indított

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}$$

sorozat az $f(x) = 0$ egyetlen $[a, b]$ -beli x^* megoldásához konvergál és érvényes az alábbi hibabecslés:

$$|x_k - x^*| \leq \frac{M}{2m}(x_{k+1} - x_k)^2,$$

ahol $M \geq |f''(x)|$ és $0 < m \leq f'(x)$ minden $x \in [a, b]$ esetén.

Bizonyítás: Ha $f'(x) \neq 0$ ($x \in [a, b]$) teljesül, abból az következik, hogy az f függvény szigorúan monoton, ezért az $f(x) = 0$ egyenletnek egyetlen megoldása van.

f' és f'' előjelei alapján négy esetet különböztethetünk meg:

- f szigorúan monoton növekvő és konvex
- f szigorúan monoton növekvő és konkáv
- f szigorúan monoton csökkenő és konvex
- f szigorúan monoton csökkenő és konkáv

Ezek hasonlóan tárgyalhatók, ezért csak az első esetet vizsgáljuk (itt az f függvény első és második deriváltja is pozitív):

- x_0 -t a (4) feltétel miatt úgy kell megválasztanunk, hogy $x_0 > x^*$
- a konvexitás miatt (azaz hogy az érintő a görbe alatt van): $x_k \geq x^*$, hiszen az x_k -k az érintők zérushelyei az x tengelyen

- a sorozat képzési szabálya miatt (monotonitási tulajdonság) $x_k \leq x_{k-1}$
- x_k sorozat csökkenő és alulról korlátos, vagyis létezik a határértéke és korlátos.

Ahhoz, hogy az utolsó pontot igazoljuk, jelölje t az (x_k) sorozat határértékét. Ekkor az

$$x_k = x_{k-1} - \frac{f(x_{k-1})}{f'(x_{k-1})}$$

iterációban ha vesszük minden x_k és x_{k-1} határértékét, ezek t -nek adódnak, azaz

$$t = t - \frac{f(t)}{f'(t)}$$

Némiképp átrendezve azt kapjuk, hogy

$$\frac{f(t)}{f'(t)}$$

0-hoz tart, azaz $f(t) = 0$. De mivel az adott intervallumon egyetlen megoldás van, és ez x^* , így $t = x^*$, azaz $\lim x_k = x^*$.

A hibabecslésre vonatkozó képlet igazolásához Taylor polinomokat fogunk felírni x_k -kal (elsőfokú) az x^* középponttal:

$$\text{I.} \quad f(x_k) = f(x^*) + f'(c)(x_k - x^*), \quad c \in [a, b]$$

x_k -ban másodfokú Taylor polinom x_{k-1} körül:

$$\text{II.} \quad f(x_k) = f(x_{k-1}) + f'(x_{k-1})(x_k - x_{k-1}) + \frac{f''(d)}{2}(x_k - x_{k-1})^2, \quad d \in [a, b]$$

Az I. egyenletben nyilván $f(x^*) = 0$, a II. egyenlet jobb oldalán az első két tag összege szintén 0, hiszen az

$$x_k = x_{k-1} - \frac{f(x_{k-1})}{f'(x_{k-1})}$$

mindkét oldalát megszorozva $f'(x_{k-1})$ -gyel

$$f'(x_{k-1}) \cdot x_k = f'(x_{k-1}) \cdot x_{k-1} - f(x_{k-1})$$

adódik, melyet átrendezve és $f'(x_{k-1})$ -et kiemelve az

$$f(x_{k-1}) = -f'(x_{k-1}) \cdot (x_k - x_{k-1})$$

egyenletet kapjuk. Tehát

$$f(x_{k-1}) + f'(x_{k-1}) \cdot (x_k - x_{k-1}) = 0.$$

Ebből adódóan az I. és II. egyenletek a következő alakra redukálódnak:

$$\text{I.} \quad f(x_k) = f'(c)(x_k - x^*), \quad c \in [a, b]$$

$$\text{II.} \quad f(x_k) = \frac{f''(d)}{2}(x_k - x_{k-1})^2, \quad d \in [a, b]$$

Ezeket összevetve azt látjuk, hogy

$$f'(c)(x_k - x^*) = \frac{f''(d)}{2}(x_k - x_{k-1})^2.$$

Ha a kapott egyenletet $f'(c)$ -vel osztjuk és vesszük mindkét oldal abszolút értékét:

$$|x_k - x^*| \leq \frac{|f''(d)|}{2|f'(c)|}(x_k - x_{k-1})^2 \leq \frac{M}{2m}(x_k - x_{k-1})^2.$$

Megjegyzés: A módszer a leggyakrabban használt módszer egyenletek megoldásának közelítésére,

tekintettel a hibabecslésből adódó négyzetes konvergenciára, aminek köszönhetően általában gyorsan a keresett gyök közelébe jut az iterációs sorozat.

Fixpont iteráció

Itt $f(x) = 0$ helyett x -et kifejezzük: $x = g(x)$ alakban vizsgáljuk az egyenletet. Például ilyen a Jacobi- és a Seidel iteráció is.

Legyen x_0 a kezdőpont. Ekkor $x_1 = g(x_0)$, $x_2 = g(x_1)$, stb. Általánosan: $x_k = g(x_{k-1})$.

Tétel: Tegyük fel, hogy $g(x)$ folytonos $[a, b]$ -n és a függvény értékei $[a, b]$ között vannak: $a \leq g(x) \leq b$, ha $x \in [a, b]$. Ekkor $x = g(x)$ -nek van legalább egy megoldása.

Definíció: Legyen $g(x)$ folytonos $[a, b]$ -n ($g \in C[a, b]$). Azt mondjuk, hogy g kontrakció (összehúzás) az $[a, b]$ intervallumon, ha létezik olyan $0 \leq q < 1$ szám, hogy

$$|g(x_1) - g(x_2)| \leq q|x_1 - x_2|$$

minden $x_1, x_2 \in [a, b]$ esetén.

A definíció szerint ez azt jelenti, hogy a pontok képei közelebb vannak egymáshoz, mint maguk a pontok.

Tétel (Banach-féle fixpont tétel): Ha $g(x) \in C[a, b]$, $a \leq g(x) \leq b$ ($x \in [a, b]$) és $g(x)$ kontrakció $[a, b]$ -n, akkor pontosan egy fixpont létezik $[a, b]$ -ben.

Példa: $g(x) = x^2$ kontrakció $[1, \frac{1}{4}]$ -en:

$$|x_1^2 - x_2^2| = |(x_1 - x_2)(x_1 + x_2)| \leq |x_1 - x_2| |x_1 + x_2| \leq \frac{1}{2} |x_1 - x_2|$$

mivel $x_1 + x_2 \leq \frac{1}{2}$.

Azonban a $[0, 1]$ intervallumon ez a leképezés már nem lenne kontrakció, tehát az intervallum fontos.

Tétel: A $g(x) \in C[a, b]$ kontrakció az $[a, b]$ intervallumon, ha $\max_{x \in [a, b]} |g'(x)| = q < 1$.

Tétel: Tegyük fel, hogy $g(x)$ folytonos függvény az $[a, b]$ intervallumon, azaz $g(x) \in C[a, b]$. Továbbá g értékei a és b közöttiek ($a \leq g(x) \leq b$) minden $x \in [a, b]$ esetén és g kontrakció $[a, b]$ -n ($0 \leq q < 1$). Ekkor minden $x_0 \in [a, b]$ esetén az

$$x_k = g(x_{k-1}), \quad k = 1, 2, \dots$$

sorozat az $x = g(x)$ egyenlet $[a, b]$ -beli x^* megoldásához konvergál.

Hibabecslés:

$$|x_k - x^*| \leq \frac{q}{1-q} |x_k - x_{k-1}| \leq \frac{q^k}{1-q} |x_1 - x_0|.$$

Utóbbi képletet ritkábban használjuk. Egyúttal észrevehetjük, hogy a Jacobi-iteráció hibaképlete ugyanez. A két módszer hasonló elven működik.

Megjegyzés: Amit keresünk, az az $x \mapsto g(x)$ leképezés fixpontja (x^*), azaz az $x = g(x)$ egyenlet megoldása.

De honnan tudjuk, hogy g kontrakció?

Tétel (a kontrakció eldöntésére): Tegyük fel, hogy $g \in C^1[a, b]$. Ha $q = |g'(x)| < 1$ minden $x \in [a, b]$ esetén, akkor g kontrakció $[a, b]$ -n, q kontrakciós tényezővel.

Példa: $x^2 - x - 2 = 0$ megoldása fixpont iterációval.

Elsőként számítsuk ki a pontos megoldásokat:

$$x_{1,2} = \frac{1 \pm \sqrt{1+8}}{2} = \frac{1 \pm 3}{2}$$

Tehát a megoldásaink: 2 és -1. Ezek közül keressük a 2-t.

Első lépésként fejezzük ki x -et: $x = x^2 - 2 = g_1(x)$. Ennek deriváltja: $g'_1(x) = (x^2 - 2)' = 2x \neq 1$, tehát ez nem kontrakció.

Ha x -et másképpen fejezzük ki: $x = \sqrt{x+2} = g_2(x)$ ($x > 0$).

Tehát most $g(x) = \sqrt{x+2}$, ami $x \in [0, +\infty[$ esetén szintén a $[0, +\infty[$ intervallumba esik.

$g'(x) = \frac{1}{2\sqrt{x+2}} \leq \frac{1}{2\sqrt{2}} < 1$, ha $x \geq 0$. Így $\max |g'(x)| = \frac{1}{2\sqrt{2}} < 1$ kontrakció.

Maga az iteráció, például az $x_0 = 7$ pontból indulva:

$$x_1 = \sqrt{7+2} = 3$$

$$x_2 = \sqrt{3+2} = 2.236$$

$$x_3 = \sqrt{2.236+2} = 2.058$$

$$x_4 = \sqrt{2.058+2} = 2.0144$$

Ha a -1-et keresnénk, vizsgálhatnánk az $x = -\sqrt{x+2}$ alakot az $x \in]-\infty, 0]$ intervallumon.

Nemlineáris egyenletrendszerek megoldása

Tekintsünk egy n egyenletből álló n ismeretlenes egyenletrendszert az alábbi alakban:

$$\begin{aligned} f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) &= 0 \\ &\vdots \\ f_n(x_1, x_2, \dots, x_n) &= 0 \end{aligned}$$

Ez röviden az $F(x) = 0$ formában is felírható, ha $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ típusú függvényt, x az ismeretlenekből álló vektort, a jobboldali 0 pedig az n dimenziós zérusvektort jelöli. A továbbiakban az egyváltozós f függvénnyel felírt $f(x) = 0$ egyenlet közelítő megoldására szolgáló Newton-módszer általánosítását adjuk meg az egyenletrendszer esetére. Az egydimenziós esethez hasonlóan egy alkalmasan választott $x^{(0)} \in \mathbb{R}^n$ kezdeti vektorból indulva előállítunk egy $x^{(k)}$ sorozatot, mely reményeink szerint az egyenletrendszer megoldásához konvergál. Ehhez az egyes $f_i(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0$ skaláregyenleteket linearizáljuk az $x^{(k)} = [x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \dots, x_n^{(k)}]^T \in \mathbb{R}^n$ pontban, azaz az elsőfokú Taylor polinomokkal

helyettesítjük a baloldalon álló kifejezéseket:

$$f_i(x_1, x_2, \dots, x_n) \approx f_i(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \dots, x_n^{(k)}) + \sum_{j=1}^n \frac{\partial}{\partial x_j} f_i(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \dots, x_n^{(k)}) (x_j - x_j^{(k)}).$$

A gradiens vektor alkalmazásával a fenti közelítés tömörebben is kifejezhető:

$$\begin{aligned} f_1(x) &\approx f_1(x^{(k)}) + \nabla f_1(x^{(k)})^T (x - x^{(k)}) \\ &\vdots \\ f_n(x) &\approx f_n(x^{(k)}) + \nabla f_n(x^{(k)})^T (x - x^{(k)}) \end{aligned}$$

ahol $\nabla f_n(x^{(k)})$ jelöli az i -edik skalár függvény gradiens vektorát (azaz az f_i függvény parciális deriváltjaiból álló vektort az $x^{(k)}$ pontban. Az $F(x) = 0$ egyenletrendszer megoldása helyett keressük a linearizált egyenletrendszer

$$\begin{aligned} f_1(x^{(k)}) + \nabla f_1(x^{(k)})^T (x - x^{(k)}) &= 0 \\ &\vdots \\ f_n(x^{(k)}) + \nabla f_n(x^{(k)})^T (x - x^{(k)}) &= 0 \end{aligned}$$

megoldását. Ennek a lineáris egyenletrendszernek a megoldása szolgáltatja az $x^{(k+1)}$ vektort, azaz a következő iteráltat a megoldáshoz közelítő vektorsorozatban.

Az F függvényt és

$$J(x) = \left[\frac{\partial f_i(x)}{\partial c_j} \right]_{i,j=1}^n = \begin{bmatrix} \nabla f_1(x^{(k)})^T \\ \vdots \\ \nabla f_n(x^{(k)})^T \end{bmatrix}$$

Jacobi-mátrixát használva még tömörebben leírhatjuk a fenti linearizált egyenletrendszert:

$$F(x^{(k)}) + J(x^{(k)})(x - x^{(k)}) = 0.$$

Ennek megoldását az $x^{(k+1)}$ vektort az x változó kifejezésével kapjuk:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - [J(x^{(k)})]^{-1} F(x^{(k)}) \quad (k = 0, 1, \dots).$$

Az $\{x^{(k)}\}$ sorozat előző formulával való előállítását nevezzük Newton-módszernek. Amennyiben a skalár számmal való osztást úgy tekintjük, hogy az az inverzével (reciprokával) balról történő szorzást jelent, akkor tökéletes analógiát kapunk a képlet és az egydimenziós Newton-módszer

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}$$

iterációs formulája között. Ugyanígy az algoritmusok között is, annyi eltéréssel, hogy a gyakorlatban soha nem invertáljuk a $J(x^{(k)})$ Jacobi-mátrixot. Helyette a $F(x^{(k)}) + J(x^{(k)})(x - x^{(k)}) = 0$ lineáris egyenletrendszert oldjuk meg valamely alkalmas módszerrel.

Példa: Határozzuk meg Newton-módszerrel az $x^2 + y^2 = 2$ egyenletű kör és az $x^2 - y^2 = 1$ egyenletű hiperbola első síknegyedbe eső metszéspontjának a koordinátáit.

Megoldás: A megoldandó egyenletrendszert $F(x) = 0$ alakba írva és az $x_1 = x$, $x_2 = y$ helyettesítést alkalmazva:

$$\begin{aligned}x_1^2 + x_2^2 - 2 &= 0 \\x_1^2 - x_2^2 - 1 &= 0\end{aligned}$$

Az

$$\begin{aligned}f_1(x_1, x_2) &= x_1^2 + x_2^2 - 2 \\f_2(x_1, x_2) &= x_1^2 - x_2^2 - 1\end{aligned}$$

rendszerhez tartozó Jacobi mátrix:

$$J(x_1, x_2) = \begin{bmatrix} 2x_1 & 2x_2 \\ 2x_1 & -2x_2 \end{bmatrix}$$

Mivel első síknegyedbeli megoldást keresünk, ezért a kezdővektor mindkét koordinátáját pozitívnak választjuk. Legyen

$$x^{(0)} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

Ezért a lineáris egyenletrendszer aktuális alakja:

$$F(x^{(0)}) + J(x^{(0)})(x - x^{(0)}) = 0,$$

amiből majd x -et kifejezve megkapjuk x_1 -et. Az $x^{(0)}$ vektor behelyettesítésével kapott egyenlet:

$$\begin{bmatrix} 0 \\ -1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 2 & 2 \\ 2 & -2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 - 1 \\ x_2 - 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

A vektor-mátrix műveleteket elvégezve az alábbi lineáris egyenletrendszer adódik:

$$\begin{aligned}2x_1 + 2x_2 &= 4 \\2x_1 - 2x_2 &= 1\end{aligned}$$

A rendszer megoldása adja az $x^{(1)}$ vektor két koordinátáját:

$$x^{(1)} = \begin{bmatrix} 1.25 \\ 0.75 \end{bmatrix}$$

Az egyenletrendszer jelenlegi alakja:

$$F(x^{(1)}) + J(x^{(1)})(x - x^{(1)}) = 0,$$

melybe behelyettesítve az $x^{(1)}$ vektort:

$$\begin{bmatrix} 0.125 \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 2.5 & 1.5 \\ 2.5 & -1.5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 - 1.25 \\ x_2 - 0.75 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Elvégezve a műveleteket az

$$\begin{aligned}2.5x_1 + 1.5x_2 &= 4.125 \\2.5x_1 - 1.5x_2 &= 2\end{aligned}$$

egyenletrendszert kapjuk, melynek megoldása

$$x^{(2)} = \begin{bmatrix} 1.225 \\ 0.7083 \end{bmatrix}$$

Ezután $x^{(2)}$ -t kell újra az egyenletrendszerbe helyettesíteni és megoldásaként megkapjuk a következő iteráltat:

$$x^{(3)} = \begin{bmatrix} 1.2247 \\ 0.7071 \end{bmatrix}$$

Ez a vektor már a 4 tizedesjegyre pontos közelítése a metszéspontnak. Erről úgy győződhetünk meg, hogy elemi úton megoldjuk az eredeti egyenletrendszert. A kör és hiperbola egyenletének összeadásával a $2x^2 = 3$, azaz $x^2 = 1.5$ egyenletre jutunk, amiből $x = \pm \sqrt{1.5}$ és visszahelyettesítéssel kapjuk, hogy $y = \pm \sqrt{0.5}$.

Az előjelek összes lehetséges kombinációjával négy megoldást kapunk, közülük az alábbi pont esik az első síknegyedbe:

$$x^* = \begin{bmatrix} \sqrt{1.5} \\ \sqrt{0.5} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1.22474487 \\ 0.70710678 \end{bmatrix}$$