CURS 2

METODE NUMERICE PENTRU SISTEME DE ECUAŢII NELINIARE

----

0. Preliminarii: Norma unui vector si norma unei matrici (rapel).
1. Sisteme de ecuaţii neliniare. Definiţii.
2. Metoda punctului fix.
3. Metoda Newton; metode cvasi-Newton.

0 Norma unui vector şi norma unei matrici

Fie V un spaţiu vectorial: în cazul de faţă, V este $\mathbf{R}^n$ sau $\mathbf{C}^n$.

Norma unui vector $\mathbf{x} \in V$ este aplicaţie $\|.\|: V \to \mathbf{R}_+$, satisfăcând axiomele:

1. $\|\mathbf{x}\| \geq 0$, şi $\|\mathbf{x}\| = 0 \Leftrightarrow \mathbf{x} = \mathbf{0}$.
2. $\|\lambda \cdot \mathbf{x}\| = |\lambda| \cdot \|\mathbf{x}\|, \quad \forall \lambda =$ scalar ($\lambda \in \mathbf{R}$ sau $\lambda \in \mathbf{C}$).
3. $\|\mathbf{x} + \mathbf{y}\| \leq \|\mathbf{x}\| + \|\mathbf{y}\|$

Exemple de norme ale unui vector:

$\|\mathbf{x}\|_\infty = \max\limits_{i=1,n} |x_i|$ … norma-∞ (norma maximum)

$\|\mathbf{x}\|_1 = \sum\limits_{i=1}^{n} |x_i|$ … norma-1

$\|\mathbf{x}\|_2 = \left(\sum\limits_{i=1}^{n} |x_i|^2 \right)^{1/2}$ … norma-2 (norma euclidiană)

■

Fie A_n este mulţimea matricilor $n \times n$ cu elemente scalare (reale, complexe).

Norma unei matrici $\mathbf{A} \in A_n$ este o aplicaţie $\|.\|: A_n \to \mathbf{R}_+$, care satisface axiomele 1 – 3, şi în plus, următoarele:

4. $\|\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}\| \leq \|\mathbf{A}\| \cdot \|\mathbf{B}\|$
5. $\|\mathbf{A} \cdot \mathbf{x}\| \leq \|\mathbf{A}\| \cdot \|\mathbf{x}\|$

În axiomele 4-5, $\mathbf{B} \in A_n$, iar $\mathbf{x}$ este un vector. Normele care satisfac 5 se zic *compatibile* cu norma vectorului.

Observaţie

Definiţia normei unei matrici, *indusă* de norma vectorului, este:

$$\|\mathbf{A}\| = \sup_{x\neq 0} \frac{\|\mathbf{A}\cdot\mathbf{x}\|}{\|\mathbf{x}\|}$$

Pentru detalii privind norma unui vector şi norma unei matrici, vezi Capitolul 4-I ■

Exemple de norme ale unei matrici:

$\|\mathbf{A}\|_\infty = \max_i \sum_j |a_{ij}|$ - norma liniilor

$\|\mathbf{A}\|_1 = \max_j \sum_i |a_{ij}|$ - norma coloanelor

$\|\mathbf{A}\|_2 = \left[\rho(\mathbf{A}^*\cdot\mathbf{A})\right]^{1/2}$ - norma euclidiană,

în care: $\mathbf{A}^* = \overline{\mathbf{A}}^T$ ($\mathbf{A}$ – conjugat transpus); $\rho = \max_j |\lambda_j|$, unde $\lambda_j,\ j=\overline{1,n}$ sunt valorile proprii ale matricii $\mathbf{A}$. ρ se zice *rază spectrală*.

1 Definiţii

Fie sistemul de ecuaţii neliniare

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

Acesta se scrie vectorial

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

unde $\mathbf{f}:\mathbf{I}\to\mathbf{R}^n$, $\mathbf{I}\subset\mathbf{R}^n$. Explicit:

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ . \\ . \\ x_n \end{bmatrix},\ \mathbf{0} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ . \\ . \\ 0 \end{bmatrix},\ \mathbf{f}(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} f_1(\mathbf{x}) \\ f_2(\mathbf{x}) \\ . \\ . \\ f_n(\mathbf{x}) \end{bmatrix},$$

O soluţie a sistemului (1) se va nota cu $\boldsymbol{\alpha}$, adică: $\mathbf{f}(\boldsymbol{\alpha}) = \mathbf{0}$.

Pentru rezolvarea prin metoda punctului fix, sistemul (1) se va considera pus sub forma:

$$\mathbf{x} = \mathbf{g}(\mathbf{x}) \tag{2}$$

în care $\mathbf{g} : \mathbf{I} \to \mathbf{R}^n$, $\mathbf{I} \subset \mathbf{R}^n$,

O soluţie a lui (2) se va nota $\boldsymbol{\alpha}$, adică: $\boldsymbol{\alpha} = \mathbf{g}(\boldsymbol{\alpha})$.

În ceea ce urmează, se presupun cunoscute noţiunile de normă a unui vector $\| \mathbf{x} \|$, şi normă a unei matrici pătratice $\| \mathbf{A} \|$. În particular, norma-∞ este:

$$\| \mathbf{x} \|_\infty = \max_i | x_i |; \qquad \| \mathbf{A} \|_\infty = \max_i \sum_j | a_{ij} |.$$

2 Metoda punctului fix

Ecuaţii de forma $\mathbf{x} = \mathbf{g}(\mathbf{x})$.

Metoda

Metoda constă în construirea şirului:

$\mathbf{x}^{(0)} = [x_1^{(0)} \; x_2^{(0)} \; \ldots \; x_n^{(0)}]^T$ - aproximaţia iniţială, dată;

$\mathbf{x}^{(n+1)} = \mathbf{g}(\mathbf{x}^{(n)}), \quad n \geq 0$

A nu se confunda indicele superior (*n*) (indicele iteratei) cu ordinul *n* al sistemului (indice inferior al coordonatei $x_n^{(k)}$).

Convergenţa procesului iterativ este asigurată de următoarele condiţii:

(1) **g** este contractantă – pe o vecinătate **I** a rădăcinii: pentru $\forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbf{I}$

$\| \mathbf{g}(\mathbf{x}) - \mathbf{g}(\mathbf{y}) \| \leq M \cdot \| \mathbf{x} - \mathbf{y} \|, \qquad M < 1.$

(2) Aproximaţia iniţială $\mathbf{x}^{(0)} \in \mathbf{I}$ este suficient de apropiată de rădăcina $\boldsymbol{\alpha}$.

Observaţie

Dacă $\mathbf{g} : \mathbf{C} \to \mathbf{C}$ şi $\mathbf{C} \subset \mathbf{R}^n$ este un compact (mulțime mărginită și închisă), atunci procesul converge pentru $\forall \mathbf{x}^{(0)} \in \mathbf{C}$.

■

Teorema 1

Presupunem:

1. $\mathbf{x} = \mathbf{g}(\mathbf{x})$ are o rădăcină $\boldsymbol{\alpha}$.

2. $\mathbf{g}$ este continuă şi are derivate parţiale de ordinul 1 continue, pe **I** definit de:

   $\| \mathbf{x} - \boldsymbol{\alpha} \|_\infty \le \rho$.

3. Derivatele satisfac condiţia:

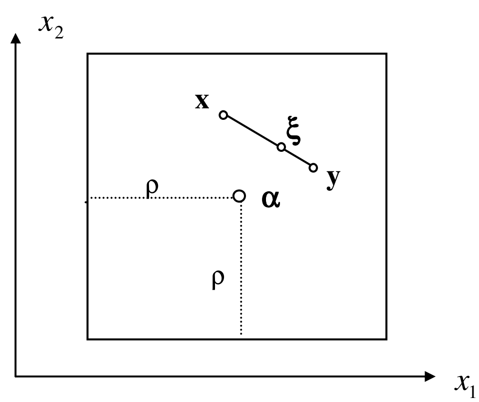
$$\max_i \sum_j \left| \frac{\partial g_i(\mathbf{x})}{\partial x_j} \right| \le \lambda < 1, \quad \forall \mathbf{x} \in \mathbf{I} .$$

Atunci, $\forall \mathbf{x}^{(0)} \in \mathbf{I}$:

(a) Iteratele $\mathbf{x}^{(n)} \in \mathbf{I}$.

(b) Şirul $\mathbf{x}^{(n)} \to \boldsymbol{\alpha}$.

(c) $\boldsymbol{\alpha}$ este unica rădăcină în **I** ■



Intervalul **I** din Condiția (2).

Sumarul demonstraţiei:

Fie $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbf{I}$: $\| \mathbf{x} - \boldsymbol{\alpha} \|_\infty \le \rho$, $\| \mathbf{y} - \boldsymbol{\alpha} \|_\infty \le \rho$. Din desvoltarea Taylor, se arată că avem:

$\| \mathbf{g}(\mathbf{x}) - \mathbf{g}(\mathbf{y}) \|_\infty \le \lambda \cdot \| \mathbf{x} - \mathbf{y} \|_\infty$

Rezultă:

$\| \mathbf{x}^{(n+1)} - \boldsymbol{\alpha} \|_\infty = \| \mathbf{g}(\mathbf{x}^{(n)}) - \mathbf{g}(\boldsymbol{\alpha}) \|_\infty \le \lambda \cdot \| \mathbf{x}^{(n)} - \boldsymbol{\alpha} \|_\infty \le \lambda \cdot \rho < \rho$

şi prin inducţie:

$\| \mathbf{x}^{(n)} - \boldsymbol{\alpha} \|_\infty \le \lambda^n \cdot \rho$

Cum $\lambda < 1$, rezultă $\lambda^n \to 0$, sau $\mathbf{x}^{(n)} \to \boldsymbol{\alpha}$.

Concluzia (c) se demonstrează prin contradicţie ■

Observaţii

1) **Matricea jacobian** a funcţiei **g**:

Introducem jacobianul **G** a lui **g**, prin:

$$\mathbf{G}(\mathbf{x}) = \left[\frac{\partial g_i}{\partial x_j} \right]_{\mathbf{x}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial g_1}{\partial x_1} & \frac{\partial g_1}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial g_1}{\partial x_n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \frac{\partial g_n}{\partial x_1} & \frac{\partial g_n}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial g_n}{\partial x_n} \end{bmatrix}_{\mathbf{x}}$$

Cu definiţia normei $\| \mathbf{A} \|_\infty = \max_i \sum_j | a_{ij} |$, condiţia 3 se scrie:

3'. $\| \mathbf{G}(\mathbf{x}) \|_\infty \le \lambda < 1$, $\quad \forall \mathbf{x} \in \mathbf{I}$

$\mathbf{G}(\mathbf{x})$ joacă rolul lui $g'(x)$ pentru o funcţie scalară.

2) **Convergenţa liniară:**

În condiţiile din Teorema 1, cu $\lambda > 0$, convergenţa este liniară, conform relaţiei:

$\| \mathbf{x}^{(n+1)} - \boldsymbol{\alpha} \|_\infty \le \lambda \cdot \| \mathbf{x}^{(n)} - \boldsymbol{\alpha} \|_\infty$.

3) **Convergenţa de ordinul 2** (pătratică)

Să presupunem că în rădăcina $\boldsymbol{\alpha}$, avem:

$$\mathbf{G}(\boldsymbol{\alpha}) = \mathbf{O} \quad \Leftrightarrow \quad \left.\frac{\partial g_i}{\partial x_j}\right|_{\boldsymbol{\alpha}} = 0; \qquad i, j = 1, 2, \ldots, n$$

unde **O** este matricea nulă, şi că $\partial g_i / \partial x_j$ sunt continue pe o vecinătate a lui $\boldsymbol{\alpha}$.

Atunci, $\exists \rho > 0$ astfel încât condiţia 3 sau 3' este satisfăcută. Dacă, în plus, derivatele de ordinul 2 există şi sunt mărginite pe $\| \mathbf{x} - \boldsymbol{\alpha} \|_\infty \le \rho$, adică:

$$\max_{i,j,k} \left| \frac{\partial^2 g_i}{\partial x_j \partial x_k} \right| \le M_1,$$

atunci din formula Taylor rezultă:

$$\| \mathbf{g}(\mathbf{x}) - \mathbf{g}(\boldsymbol{\alpha}) \|_\infty \le M \cdot \| \mathbf{x} - \boldsymbol{\alpha} \|_\infty^2,$$

unde $M = \dfrac{1}{2} \cdot n^2 \cdot M_1$,

Cu $\mathbf{x} = \mathbf{x}^{(n)}$, $\mathbf{g}(\mathbf{x}^{(n)}) = \mathbf{x}^{(n+1)}$, rezultă:

$$\| \mathbf{x}^{(n+1)} - \boldsymbol{\alpha} \|_\infty \le M \cdot \| \mathbf{x}^{(n)} - \boldsymbol{\alpha} \|_\infty^2$$

care arată că convergenţa este de ordinul 2

■

2.2 Procedură explicită de punct fix

Considerăm sistemul dat sub forma $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ şi vrem să-l transformăm într-un sistem echivalent de forma $\mathbf{x} = \mathbf{g}(\mathbf{x})$.

Fie $\mathbf{A}(\mathbf{x}) = [a_{ij}(\mathbf{x})]$ o matrice $n \times n$, **nesingulară** pe o vecinătate a lui $\boldsymbol{\alpha}$. Definim:

$$\mathbf{g}(\mathbf{x}) = \mathbf{x} - \mathbf{A}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{f}(\mathbf{x})$$

Este evident că, **A** fiind nesingulară, avem:

$$\mathbf{x} = \mathbf{g}(\mathbf{x}) \quad \Leftrightarrow \quad \mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}.$$

Exemplu – 1: 'Iterare cu matrice constantă'

$\mathbf{A}(\mathbf{x}) = \mathbf{A}$, unde $\mathbf{A}$ = matrice constantă (a_{ij} = constant) şi nesingulară.

$\mathbf{g}(\mathbf{x}) = \mathbf{x} - \mathbf{A} \cdot \mathbf{f}(\mathbf{x})$

Se verifică imediat că, jacobianul lui **g** este dat de:

$\mathbf{G}(\mathbf{x}) = \mathbf{I} - \mathbf{A} \cdot \mathbf{F}(\mathbf{x})$,

unde **I** este matricea unitate, iar $\mathbf{F}(\mathbf{x})$ este jacobianul lui **f**,

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}) = \left[\frac{\partial f_j}{\partial x_k} \right]_{\mathbf{x}} .$$

Explicit:

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}) = \left[\frac{\partial f_i}{\partial x_j} \right]_{\mathbf{x}} = \begin{bmatrix} \dfrac{\partial f_1}{\partial x_1} & \dfrac{\partial f_1}{\partial x_2} & \cdots & \dfrac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \dfrac{\partial f_n}{\partial x_1} & \dfrac{\partial f_n}{\partial x_2} & \cdots & \dfrac{\partial f_n}{\partial x_n} \end{bmatrix}_{\mathbf{x}}$$

Conform Teoremei 2, iteraţia va converge dacă elementele matricii $\mathbf{G}(\mathbf{x})$ sunt suficient de mici, şi $\mathbf{x}^{(0)}$ este suficient de apropiat de α.

Pentru o convergenţă mai rapidă, să cerem – v. Observaţia 3:

$\mathbf{G}(\boldsymbol{\alpha}) = \mathbf{O}$.

Rezultă $\mathbf{A} \cdot \mathbf{F}(\boldsymbol{\alpha}) = \mathbf{I}$, sau

$$\mathbf{A} = [\mathbf{F}(\boldsymbol{\alpha})]^{-1} . \qquad (3)$$

Cum α nu este cunoscut, luăm de exemplu, $\boldsymbol{\alpha} \approx \mathbf{x}^{(0)}$, rezultă:

$$\mathbf{A} = [\mathbf{F}(\mathbf{x}^{(0)})]^{-1} . \qquad (4)$$

Iteraţia va fi definită de

$$\mathbf{x}^{(n+1)} = \mathbf{x}^{(n)} - \mathbf{A} \cdot \mathbf{f}(\mathbf{x}^{(n)}), \tag{5}$$

unde **A** este definită de (4).

Procedura se zice *iterare cu matricea constantă* **A**, şi este analoagă cu metoda coardei pentru o funcţie scalară ■

2.3 Schema practică de iterare

Procedeul practic, care evită inversarea matricii $\mathbf{F}(\mathbf{x}^{(0)})$, este următorul. Punem:

$$\delta\mathbf{x}^{(n+1)} = \mathbf{x}^{(n+1)} - \mathbf{x}^{(n)},$$

şi rezultă – pentru $n \geq 0$:

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}^{(0)}) \cdot \delta\mathbf{x}^{(n+1)} = -\mathbf{f}(\mathbf{x}^{(n)}) \tag{6a}$$

$$\mathbf{x}^{(n+1)} = \mathbf{x}^{(n)} + \delta\mathbf{x}^{(n+1)} \tag{6b}$$

Procedeul revine la determinarea corecţiei $\delta\mathbf{x}^{(n+1)}$ prin rezolvarea sistemului liniar (6a). Iteraţia se opreşte prin testele

$$\| \delta\mathbf{x}^{(n+1)} \| \leq eps, \tag{7a}$$

$$n+1 \leq lnit \tag{7b}$$

unde toleranţa *eps* şi numărul limită de iteraţii *lnit*, sunt alese dinainte. Procedeul este util mai ales dacă actualizăm **A** după un număr de paşi, conform Observaţiei 1.

Codul Fortran care implementează această schemă, cu actualizarea matricii **A** *după 3 paşi*, este dat în ANA – Fix_Sys.

Exemplu – 2: 'Metoda Newton'

Să presupunem că, pentru a avea $\mathbf{A} = [\mathbf{F}(\boldsymbol{\alpha})]^{-1}$, actualizăm matricea **A** din (4,5), *la fiecare pas*. Iteraţia (5) devine:

$$\mathbf{x}^{(n+1)} = \mathbf{x}^{(n)} - [\mathbf{F}(\mathbf{x}^{(n)})]^{-1} \cdot \mathbf{f}(\mathbf{x}^{(n)}).$$

Aceasta reprezintă metoda Newton pentru sistemul **f**(**x**) = **0** – v. în continuare ■

3 Metoda Newton

Ecuaţii de forma $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$.

Metoda

Considerăm ecuaţia echivalentă $\mathbf{x} = \mathbf{g}(\mathbf{x})$, unde $\mathbf{g}(\mathbf{x}) = \mathbf{x} - \mathbf{A}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{f}(\mathbf{x})$.

Căutăm $\mathbf{A}(\mathbf{x})$, astfel ca metoda punctului fix pentru **g** să aibă ordinul doi. Condiţia este – v. mai sus, $\mathbf{G}(\boldsymbol{\alpha}) = \mathbf{O}$, sau

$$\left.\frac{\partial g_i}{\partial x_k}\right|_{\mathbf{x}=\boldsymbol{\alpha}} = 0, \qquad i, k = 1, 2, .., n .$$

Se verifică faptul că aceasta conduce la condiţia $\mathbf{A}(\boldsymbol{\alpha}) = [\mathbf{F}(\boldsymbol{\alpha})]^{-1}$.

Atunci, presupunem că:

- **f** este continuă şi cu derivate parţiale de ordinul 1 continue, pe o vecinătate a lui rădăcinii α.
- Jacobianul lui **f** este nesingular în α:

  $$\det(\mathbf{F}(\boldsymbol{\alpha})) \neq 0 .$$

Determinantul fiind funcţie continuă de elementele jacobianului, $\exists \rho > 0$ astfel că pentru $\| \mathbf{x} - \boldsymbol{\alpha} \| \leq \rho$ să avem

$$\det(\mathbf{F}(\mathbf{x})) \neq 0 .$$

Alegem atunci

$$\mathbf{A}(\mathbf{x}) = [\mathbf{F}(\mathbf{x})]^{-1}, \qquad \| \mathbf{x} - \boldsymbol{\alpha} \| \leq \rho ,$$

care asigură $\mathbf{A}(\boldsymbol{\alpha}) = [\mathbf{F}(\boldsymbol{\alpha})]^{-1}$. Rezultă:

$$\mathbf{g}(\mathbf{x}) = \mathbf{x} - [\mathbf{F}(\mathbf{x})]^{-1} \cdot \mathbf{f}(\mathbf{x})$$

Metoda Newton este atunci:

$$\mathbf{x}^{(n+1)} = \mathbf{x}^{(n)} - \left[\mathbf{F}(\mathbf{x}^{(n)})\right]^{-1} \cdot \mathbf{f}(\mathbf{x}^{(n)}) \tag{6}$$

Conform Teoremei 1 şi Observaţiei 3, rezultă următoarea

Propoziţie

Dacă **f** are derivate parţiale de ordinul 2, mărginite pe $\| \mathbf{x} - \boldsymbol{\alpha} \| \leq \rho$, şi $\mathbf{x}^{(0)}$ este suficient de apropiat de $\boldsymbol{\alpha}$, atunci metoda Newton are convergenţă pătratică ■

În propoziţia de mai sus, şi în relaţiile anterioare, $\| . \|$ este $\| . \|_{\infty}$.

Notă

Ipotezele de mai sus, în particular $\det(\mathbf{F}(\boldsymbol{\alpha})) \neq 0$, se poate înlocui cu altele – v . Cap. 3-IV, 3.1, Teorema 3. Astfel, metoda se poate aplica şi în cazul $\det(\mathbf{F}(\boldsymbol{\alpha})) = 0$. În acest caz, convergenţa este liniară. ■

3.2 Schema practică de iterare

Schema practică de iterare este cea de la 2.3, evitându-se inversarea matricii $\mathbf{F}(\mathbf{x}^{(n)})$, şi anume (pentru $n \geq 0$):

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}^{(n)}) \cdot \delta\mathbf{x}^{(n+1)} = -\mathbf{f}(\mathbf{x}^{(n)}) \tag{7a}$$

$$\mathbf{x}^{(n+1)} = \mathbf{x}^{(n)} + \delta\mathbf{x}^{(n+1)} \tag{7b}$$

Corecţia $\delta\mathbf{x}^{(n+1)}$ se calculează prin rezolvarea sistemului liniar (13a). Iteraţia se opreşte prin testul

$$\| \delta\mathbf{x}^{(n+1)} \| \leq eps\,, \tag{8a}$$

unde toleranţa *eps* este aleasă dinainte. Obişnuit, se adaugă şi testul:

Număr de iteraţii ≤ *lnit*, (8b)

unde *lnit* este numărul limită prescris de iteraţii.

Codul Fortran care implementează această schemă se dă în ANA – Newton_Sys.

3.3 Calculul numeric al derivatelor parţiale

Evaluarea jacobianului $\mathbf{F}(\mathbf{x}^{(k)})$, la pasul *k*, cere evaluarea a n^2 funcţii $\partial f_i / \partial x_k$. Chiar dacă acestea se pot calcula analitic, pentru *n* mare efortul de calcul este mare. Alteori,

$f_i(\mathbf{x})$ sunt date numeric. În astfel de cazuri, derivatele se calculează numeric, prin diferenţe divizate:

$$\left.\frac{\partial f_i}{\partial x_j}\right|_{\mathbf{x}^{(k)}} = \left.\frac{f_i(x_1, \ldots, x_j + h, \ldots, x_n) - f_i(x_1, \ldots, x_j, \ldots, x_n)}{h}\right|_{\mathbf{x}^{(k)}},$$

unde $|h|$ este 'mic'. Creşterea *h* poate constantă, sau poate fi variată de la un pas la altul (luând $h = h^{(k)}$). *h* nu se ia excesiv de mic, pentru a nu conduce la erori de rotunjire mari. Se arătă că, pentru a menţine convergenţa pătratică, *h* trebuie să satisfacă condiţia (la pasul *k*):

$|h| \le C \,\|\mathbf{f}(\mathbf{x}^{(k)})\|$,

unde *C* este o constantă pozitivă, fixată dinainte (Ralston & Rabinowitz (1978)).

3.4 Metode cvasi-Newton

Metoda Newton este metoda descrisă de formula de iterare (6), care utilizează jacobianul evaluat *la fiecare pas* $\mathbf{x}^{(n)}$ (analitic, sau numeric).
Dacă jacobianul $\mathbf{F}(\mathbf{x}^{(n)})$ este înlocuit cu o aproximaţie a acestuia, metodele se zic metode *Newton-modificate* sau metode *cvasi-Newton*.

Pentru a reduce efortul de calcul se procedează la înlocuirea jacobianului $\mathbf{F}(\mathbf{x}^{(k)})$ de la pasul *k*, cu o aproximaţie a acestuia, fie aceasta $\mathbf{A}^{(k)}$, după una din următoarele scheme:

- Jacobianul nu se actualizează după fiecare pas, ci după un număr *m* de paşi:

  $\mathbf{A}^{(l)} = \mathbf{F}(\mathbf{x}^{(k)})$ - pentru $l = k, \ldots, k + (m-1)$.

  Această schemă reduce viteza convergenţei, dar este economică la o rulare lungă.

- Aproximaţia jacobianului la pasul *k*+1 se generează din cea de la pasul *k*, fără evaluări suplimentare de funcţii. Această schemă este mai bună decât precedenta. Pentru modalitäti de generare a lui $\mathbf{A}^{(k+1)}$ - v. Ralston & Rabinowitz (1978).

Cu modificările precedente, formula de iterare (6) devine:

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} - [\mathbf{A}^{(k)}]^{-1} \cdot \mathbf{f}(\mathbf{x}^{(k)}) \tag{9}$$

■

Nota 1: *Metoda Newton prin liniarizarea ecuaţiilor*

Fie ecuaţia neliniară $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$, sau explicit, sistemul

$$f_i(\mathbf{x}) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n$$

Dacă $\mathbf{x}^{(0)}$ este în vecinătatea rădăcinii, considerăm desvoltarea Taylor a lui $f_i(\mathbf{x})$ în jurul lui $\mathbf{x}^{(0)}$:

$$f_i(\mathbf{x}) = f_i(\mathbf{x}^{(0)}) + \sum_{j=1}^{n} \left. \frac{\partial f_i}{\partial x_j} \right|_{\mathbf{x}^{(0)}} (x_j - x_j^{(0)}) + \dots$$

unde termenii nescrişi sunt de ordin mai mare sau egal cu doi în $(x_j - x_j^{(0)})$.

Presupunem că aceştia sunt neglijabili în raport cu termenii de orinul întâi, şi avem

$$f_i(\mathbf{x}) \approx f_i(\mathbf{x}^{(0)}) + \sum_{j=1}^{n} \left. \frac{\partial f_i}{\partial x_j} \right|_{\mathbf{x}^{(0)}} (x_j - x_j^{(0)})$$

Notăm $F_j^i = \dfrac{\partial f_i}{\partial x_j}$ elementele jacobianului $\mathbf{F}$ al lui $\mathbf{f}$, adică

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} \partial f_1 / \partial x_1 & \cdots & \partial f_1 / \partial x_n \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ \partial f_n / \partial x_1 & \cdots & \partial f_n / \partial x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} F_1^1 & \cdots & F_n^1 \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ F_1^n & \cdots & F_n^n \end{bmatrix}$$

Desvoltarea devine

$$f_i(\mathbf{x}) \approx f_i(\mathbf{x}^{(0)}) + \sum_{j=1}^{n} F_j^i(\mathbf{x}^{(0)})(x_j - x_j^{(0)}),$$

Sau, matriceal,

$$f_i(\mathbf{x}) = f_i(\mathbf{x}^{(0)}) + [F_1^i \quad F_2^i \quad \ldots \quad F_n^i]_{\mathbf{x}^{(0)}} \cdot \begin{bmatrix} x_1 - x_1^0 \\ x_2 - x_2^0 \\ \vdots \\ x_n - x_n^0 \end{bmatrix}$$

Ecuaţiile scrise pentru $i = 1,2,\ldots,n$, dau:

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) \approx \mathbf{f}(\mathbf{x}^{(0)}) + \mathbf{F}(\mathbf{x}^{(0)})(\mathbf{x} - \mathbf{x}^{(0)})$$

Rezolvăm *aproximativ* sistemul $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$, înlocuind $\mathbf{f}(\mathbf{x})$ prin expresia sa *liniarizată* (în membrul doi al relaţiei precedente; punem semnul = în loc de ≈).

Rezultă:

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}^{(0)})\delta\mathbf{x} = -\mathbf{f}(\mathbf{x}^{(0)}), \tag{10}$$

unde s-a pus

$$\delta\mathbf{x} = \mathbf{x} - \mathbf{x}^{(0)}.$$

Relaţia (10) este formula schemei de iterare în metoda Newton.

Soluţia $\mathbf{x}^{(1)} = \mathbf{x}^{(0)} + \delta\mathbf{x}$ este o aproximaţie a rădăcinii (este soluţia sistemului liniarizat).

Presupunând că aproximaţia $\mathbf{x}^{(1)}$ este *mai bună* decât $\mathbf{x}^{(0)}$, atunci metoda constă în aplicarea repetată a formulei (10), înlocuind, la pasul următor, $\mathbf{x}^{(0)}$ cu $\mathbf{x}^{(1)}$.

Astfel, în general, metoda Newton este:

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}^{(k+1)})\delta\mathbf{x}^{(k+1)} = -\mathbf{f}(\mathbf{x}^{(k)}), \quad k = 0, 1, \ldots$$

unde $\delta\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k+1)} - \mathbf{x}^{(k)}$

Problema constă acum, în a proba că şirul $\mathbf{x}^{(k)} \to \boldsymbol{\alpha}$.

■

Nota 2: *Interpretare geometrică pentru cazul n = 2*

Să punem $z = f_1(x, y)$, $z = f_2(x, y)$. Acestea sunt ecuaţiile a două suprafeţe, fie acestea S_1 şi S_2.

Ecuaţia $f_1(x, y) = 0$, revine la $z = 0$, adică la intersecţia suprafeţei S_1 cu planul *x*-*y*: aceasta este o curbă C_1. Soluţia sistemului $f_1(x, y) = 0,\ f_2(x, y) = 0$, revine la intersecţia curbelor C_1 şi C_2.

Funcţia liniarizată este:

$$z \approx f_i(x^{(0)}, y^{(0)}) + \frac{\partial f_i(x^{(0)}, y^{(0)})}{\partial x}(x_j - x_j^{(0)}) + \frac{\partial f_i(x^{(0)}, y^{(0)})}{\partial y}(y_j - y_j^{(0)})$$

Aceasta reprezintă *ecuaţia planului tangent* în $(x^{(0)}, y^{(0)})$, la suprafaţa S_i.

Deci, metoda revine la înlocuirea suprafeţei, în vecinătatea rădăcinii, prin planul tangent

(Analog, cu metoda Newton pentru o ecuaţie scalară $f(x) = 0$, unde graficul se înlocuieşte cu tangenta la grafic).

Intersecţiile planelor tangente cu planul *x*-*y* vor fi două drepte – care aproximează curbele C_1 şi C_2. Intersecţia dreptelor este aproximaţia rădăcinii.

■

Exemplu

Fie sistemul de două ecuaţii neliniare:

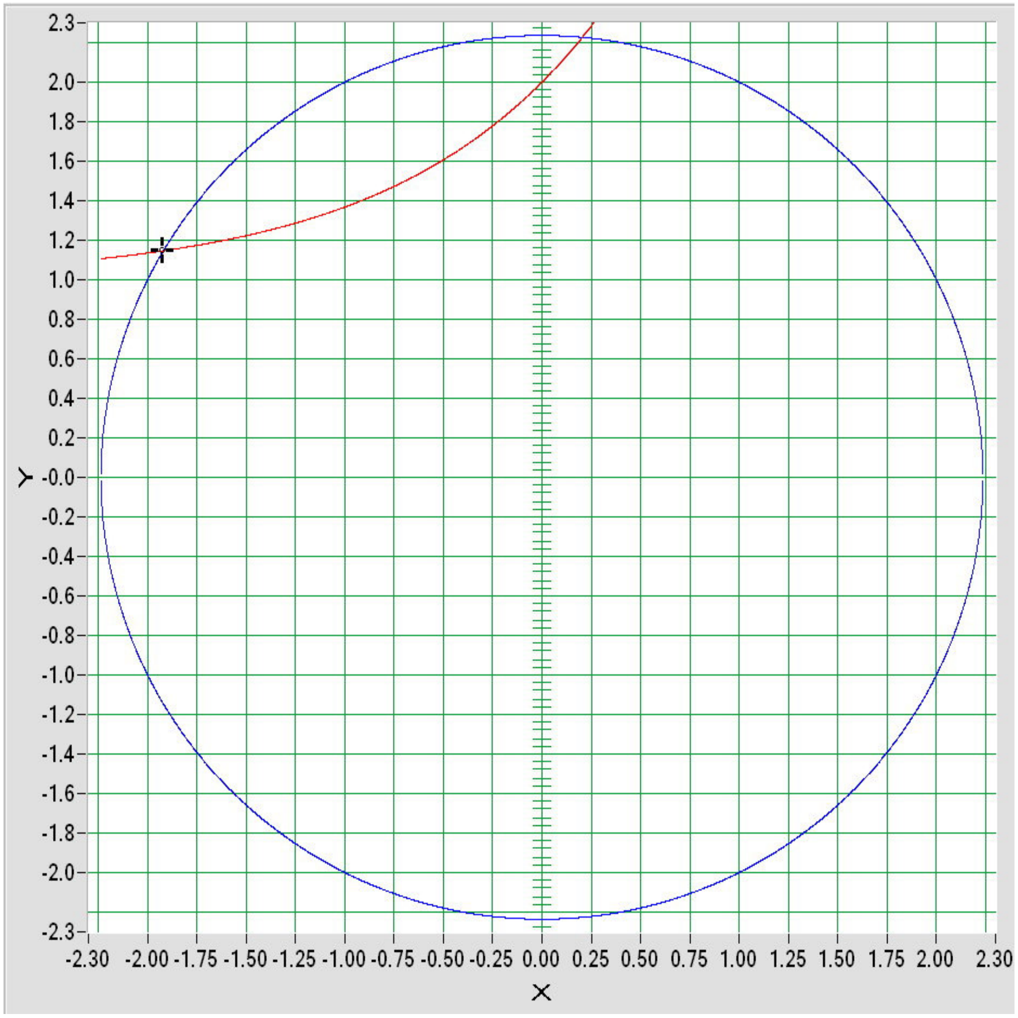
$f_1(x, y) \equiv x^2 + y^2 - 5 = 0$, $\qquad f_2(x, y) \equiv y - e^x - 1 = 0$.

Aproximaţiile iniţiale se iau:

$\mathbf{x}^{(0)} = (-2, 1)$, şi $\mathbf{x}^{(0)} = (0.5, 2)$.

De exemplu, acestea se pot găsi analizând intersecţia graficelor curbelor

$x^2 + y^2 = 5$, $\qquad y = e^x + 1$.



Matricea jacobian este:

$$\mathbf{F}(x, y) = \begin{bmatrix} 2 \cdot x & 2 \cdot y \\ -e^x & 1 \end{bmatrix}.$$

Luăm *eps* = 1E-6. Calculul este efectuat în simplă precizie. Soluţia calculată (x, y), numărul de iteraţii, şi valorile lui **f** în soluţie, sunt date în tabelele de mai jos.

1) Metoda punctului fix, iterare cu matricea constantă $\mathbf{A} = \mathbf{F}(\mathbf{x}^{(0)})$, cu actualizare după 3 paşi:

$\mathbf{x}^{(0)}$	Nr. iteraţii	x	y	$f_1(x, y)$	$f_2(x, y)$
(-2,1)	5	-1.919 684	1.146 653	-2.761 E-7	-2.995 E-8
(0.5, 2)	17	0.2043 374	2.226 712	7.210 E-8	-4.654 E-8

Observaţii

Derivatele parţiale ale funcţiilor f_i sunt calculate numeric , cu $h = 0.001$. Numărul de iteraţii pentru a doua rădăcină este mai mare decât cel pentru prima rădăcină, întrucât aproximaţia iniţială (0.5, 2) este mai îndepărtată de rădăcină. Cu aproximaţia $\mathbf{x}^{(0)}$ = (0.2, 2.2), se găseşte aceeaşi soluţie în 8 iteraţii.

■

2) Metoda Newton:

$\mathbf{x}^{(0)}$	Nr. iteraţii	x	y	$f_1(x, y)$	$f_2(x, y)$
(-2,1)	4	-1.919 684	1.146 653	-2.761 E-7	-2.995 E-8
(0.5, 2)	5	0.2043 374	2.226 712	5.384 E-8	8.289 E-9

Notă: Derivatele parţiale sunt calculate cu matricea jacobian $\mathbf{F}(x, y)$

■

Exerciţiu

Să se rezolve sistemul:

$$\begin{cases} xy - z^2 = 2 \\ -xyz - x^2 + y^2 = 4 \\ e^x - e^y - z = 7 \end{cases}$$

Să se găsească rădăcinile din vecinătatea punctelor $w_0 = (2, 2, -1)$ şi $w_0 = (1, 1, 1)$.

■