

CURS 2

METODE NUMERICE PENTRU SISTEME DE ECUAȚII NELINIARE

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

0 Norma unui vector și norma unei matrici

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

Norma unui vector $\mathbf{x} \in V$ este aplicație $\|\cdot\|: V \rightarrow \mathbf{R}_+$, satisfăcând axiomele:

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

Exemple de norme ale unui vector:

$$\|\mathbf{x}\|_{\infty} = \max_{i=1,n} |x_i| \quad \dots \text{norma-}\infty \text{ (norma maximum)}$$

$$\|\mathbf{x}\|_1 = \sum_{i=1}^n |x_i| \quad \dots \text{norma-1}$$

$$\|\mathbf{x}\|_2 = \left(\sum_{i=1}^n |x_i|^2 \right)^{1/2} \quad \dots \text{norma-2 (norma euclidiană)}$$

■

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

Norma unei matrici $\mathbf{A} \in A_n$ este o aplicație $\|\cdot\|: A_n \rightarrow \mathbf{R}_+$, care satisface axiomele

1 – 3, și în plus, următoarele:

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

În axiomele 4-5, $\mathbf{B} \in A_n$, iar \mathbf{x} este un vector.

În axioma 5: Presupunem că în spațiul vectorial V , este definită o normă de vector, $\|\cdot\|_V$. Normele care satisfac 5 se zic *compatibile* cu norma vectorului.

Observație

Norma unei matrici, *indusă* de norma vectorului, se definește prin:

$$\|\mathbf{A}\| = \sup_{\mathbf{x} \neq \mathbf{0}} \frac{\|\mathbf{Ax}\|_V}{\|\mathbf{x}\|_V} = \max_{\|\mathbf{u}\|=1} \|\mathbf{Au}\|_V$$

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

Exemple de norme ale unei matrici:

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

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

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

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*.

- Pentru o matrice reală avem $\mathbf{A}^* = \mathbf{A}^T$, și norma euclidiană devine $\|\mathbf{A}\|_2 = \left(\rho(\mathbf{A}^T \mathbf{A}) \right)^{1/2}$.

- Dacă \mathbf{A} este *hermitiană*, $\mathbf{A}^* = \mathbf{A}$, (în particular, *reală și simetrică*):

Avem $\mathbf{A}^* \mathbf{A} = \mathbf{A}^2$ și $\lambda(\mathbf{A}^2) = (\lambda(\mathbf{A}))^2$, unde $\lambda(\mathbf{A})$ este o valoare proprie a lui \mathbf{A} .

Notând $|\lambda_A|_{\max} = \max_i |\lambda_i(\mathbf{A})|$, rezultă

$$\|\mathbf{A}\|_2 = |\lambda_A|_{\max}.$$

1 Definiții

Fie sistemul de ecuații neliniare

$$f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0$$

.....

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

Acesta se scrie vectorial

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

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

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

O soluție 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:

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

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

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

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

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

Ordin de convergență

Considerăm un șir-vector $\mathbf{x}^{(k)}$, $k \geq 0$, unde $\mathbf{x}^{(k)} = \{x_1^{(k)} \quad x_2^{(k)} \quad \dots \quad x_n^{(k)}\}$. Ordinul de convergență se definește ca pentru un șir scalar, înlocuind modulul cu norma. Anume:

Definiția 1

Fie șirul de iterate $(\mathbf{x}^{(k)})_{k \geq 0}$, și presupunem că $\mathbf{x}^{(k)} \rightarrow \boldsymbol{\alpha}$.

Dacă:

$\exists p$ real, $p \geq 1$ și

$$\exists c > 0, \forall n \geq 0 \quad \|\boldsymbol{\alpha} - \mathbf{x}^{(k+1)}\| \leq c \|\boldsymbol{\alpha} - \mathbf{x}^{(k)}\|^p \quad (1)$$

atunci se zice că șirul converge către $\boldsymbol{\alpha}$, cu ordinul 'p'. Constanta c se numește *rata* convergenței ■

Cazul $p = 1$. Convergența liniară.

Teoremă

Dacă

$$\exists c \quad 0 < c < 1, \quad \forall n \geq 0 \quad \|\boldsymbol{\alpha} - \mathbf{x}^{(k+1)}\| \leq c \|\boldsymbol{\alpha} - \mathbf{x}^{(k)}\| \quad (2)$$

atunci $\mathbf{x}^{(k)}$ converge către $\boldsymbol{\alpha}$ (liniar). Constanta c se numește *rata* convergenței liniare.

■

2 Metoda punctului fix

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

Metoda

Metoda constă în construirea șirului:

$$\mathbf{x}^{(0)} = [x_1^{(0)} \quad x_2^{(0)} \quad \dots \quad x_n^{(0)}]^T \quad - \text{aproximația inițială, dată;}$$

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

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

Convergența procesului iterativ este asigurată de următoarele condiții:

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

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

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

Observație

Dacă $\mathbf{g} : \mathbf{C} \rightarrow \mathbf{C}$ și $\mathbf{C} \subset \mathbf{R}^n$ 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 și are derivate parțiale de ordinul 1 continue, pe \mathbf{I} definit de:

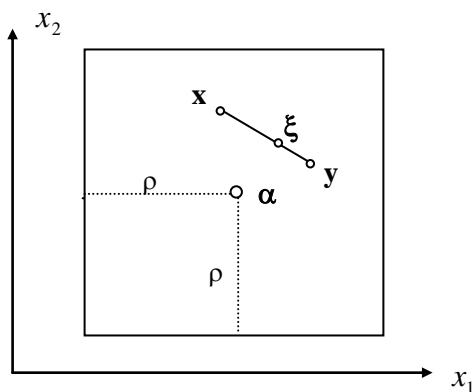
$$\|\mathbf{x} - \boldsymbol{\alpha}\|_{\infty} \leq \rho.$$

3. Derivatele satisfac condiția:

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

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

- (a) Iteratele $\mathbf{x}^{(n)} \in \mathbf{I}$.
- (b) Șirul $\mathbf{x}^{(n)} \rightarrow \boldsymbol{\alpha}$.
- (c) $\boldsymbol{\alpha}$ este unica rădăcină în \mathbf{I} ■



Intervalul \mathbf{I} din Condiția (2).

Sumarul demonstrației:

Fie $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbf{I}$: $\|\mathbf{x} - \mathbf{a}\|_\infty \leq \rho$, $\|\mathbf{y} - \mathbf{a}\|_\infty \leq \rho$. Din dezvoltarea Taylor, se arată că avem:

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

Rezultă:

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

și prin inducție:

$$\|\mathbf{x}^{(n)} - \mathbf{a}\|_\infty \leq \lambda^n \cdot \rho$$

Cum $\lambda < 1$, rezultă $\lambda^n \rightarrow 0$, sau $\mathbf{x}^{(n)} \rightarrow \mathbf{a}$.

Concluzia (c) se demonstrează prin contradicție ■

Observații

1) **Matricea jacobian** a funcției \mathbf{g} :

Introducem jacobianul \mathbf{G} a lui \mathbf{g} , prin:

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

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

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

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

2) **Convergența liniară:**

În condițiile din Teorema 1, cu $\lambda > 0$, convergența este liniară, conform relației:

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

3) Convergența de ordinul 2 (pătratică)

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

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

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

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

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

atunci din formula Taylor rezultă:

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

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

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

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

care arată că convergența este de ordinul 2

■

2.2 Procedură explicită de punct fix

Considerăm sistemul dat sub forma $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ și 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, \mathbf{A} fiind nesingulară, avem:

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

Exemplu – 1: ‘Iterare cu matrice constantă’

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

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

Se verifică imediat că, jacobianul lui \mathbf{g} este dat de:

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

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

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

Explicit:

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

Conform Teoremei 2, iterația va converge dacă elementele matricii $\mathbf{G}(\mathbf{x})$ sunt suficient de mici, și $\mathbf{x}^{(0)}$ este suficient de apropiat de $\boldsymbol{\alpha}$.

Pentru o convergență mai rapidă, să cerem – v. Observația 3:

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

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

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

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

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

Iterația va fi definită de

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

unde \mathbf{A} este definită de (4).

Procedura se zice *iterare cu matricea constantă* \mathbf{A} , și este analoagă cu metoda coardei pentru o funcție scalară ■

2.3 Schema practică de iterare

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

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

și rezultă – pentru $n \geq 0$:

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

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

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

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

$$n + 1 \leq l_{nit} \quad (7b)$$

unde toleranța *eps* și numărul limită de iterații *lnit*, sunt alese dinainte. Procedeul este util mai ales dacă actualizăm \mathbf{A} după un număr de pași, conform Observației 1.

Codul Fortran care implementează această schemă, cu actualizarea matricii \mathbf{A} după 3 pași, 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 \mathbf{A} din (4,5), la fiecare pas. Iterația (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 $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ – v. în continuare ■

3 Metoda Newton

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

Metoda

Considerăm ecuația 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 \mathbf{g} să aibă ordinul doi. Condiția este – v. mai sus, $\mathbf{G}(\boldsymbol{\alpha}) = \mathbf{O}$, sau

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

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

Atunci, presupunem că:

- \mathbf{f} este continuă și cu derivate parțiale de ordinul 1 continue, pe o vecinătate a lui rădăcinii $\boldsymbol{\alpha}$.
- Jacobianul lui \mathbf{f} este nesingular în $\boldsymbol{\alpha}$:

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

Determinantul fiind funcție 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

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

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:

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

Conform Teoremei 1 și Observației 3, rezultă următoarea

Propoziție

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

În propoziția de mai sus, și în relațiile anterioare, $\|\cdot\|$ este $\|\cdot\|_\infty$.

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 și în cazul $\det(\mathbf{F}(\boldsymbol{\alpha})) = 0$. În acest caz, convergența este liniară. ■

3.2 Schema practică de iterare

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

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

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

Corecția $\delta \mathbf{x}^{(n+1)}$ se calculează prin rezolvarea sistemului liniar (13a). Iterația se oprește prin testul

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

unde toleranța eps este aleasă dinainte. Obișnuit, se adaugă și testul:

$$Num\bar{a}r\ de\ itera\c{t}ii \leq linit, \quad (8b)$$

unde $linit$ este numărul limită prescris de iterații.

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

3.3 Calculul numeric al derivatelor parțiale

Evaluarea jacobianului $\mathbf{F}(\mathbf{x}^{(k)})$, la pasul k , cere evaluarea a n^2 funcții $\partial f_i / \partial x_k$. 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 diferențe divizate:

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

unde $|h|$ este ‘mic’. Creșterea 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 arată că, pentru a menține convergența pătratică, h trebuie să satisfacă condiția (la pasul k):

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

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 aproximație 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 aproximație 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 pași:

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

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

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

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

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

■

Nota 1: Metoda Newton prin liniarizarea ecuațiilor

Fie ecuația 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 dezvoltarea 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 nescrise sunt de ordin mai mare sau egal cu doi în $(x_j - x_j^{(0)})$.

Presupunem că aceștia sunt neglijabili în raport cu termenii de ordinul întâi, și 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 $F_j^i = \left. \frac{\partial f_i}{\partial x_j} \right|_{\mathbf{x}^{(0)}}$ 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,

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

Ecuțiile scrise pentru $i = 1, 2, \dots, n$, 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 relației precedente; punem semnul \approx în loc de \approx).

Rezultă:

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

unde s-a pus

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

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

Soluția $\mathbf{x}^{(1)} = \mathbf{x}^{(0)} + \delta\mathbf{x}$ este o aproximație a rădăcinii (este soluția sistemului liniarizat).

Presupunând că aproximația $\mathbf{x}^{(1)}$ 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:

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

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

Problema constă acum, în a proba că șirul $\mathbf{x}^{(k)} \rightarrow \mathbf{a}$.

■

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

Să punem $z = f_1(x, y)$, $z = f_2(x, y)$. Acestea sunt ecuațiile a două suprafețe, fie acestea S_1 și S_2 .

Ecuția $f_1(x, y) = 0$, revine la $z = 0$, adică la intersecția suprafeței S_1 cu planul x - y : aceasta este o curbă C_1 . Soluția sistemului $f_1(x, y) = 0$, $f_2(x, y) = 0$, revine la intersecția curbelor C_1 și C_2 .

Funcția 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 *ecuația planului tangent* în $(x^{(0)}, y^{(0)})$, la suprafața S_i .

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

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

Intersecțiile planelor tangente cu planul x - y vor fi două drepte – care aproximează curbele C_1 și C_2 . Intersecția dreptelor este aproximația rădăcinii.

■

Exemplu

Fie sistemul de două ecuații neliniare:

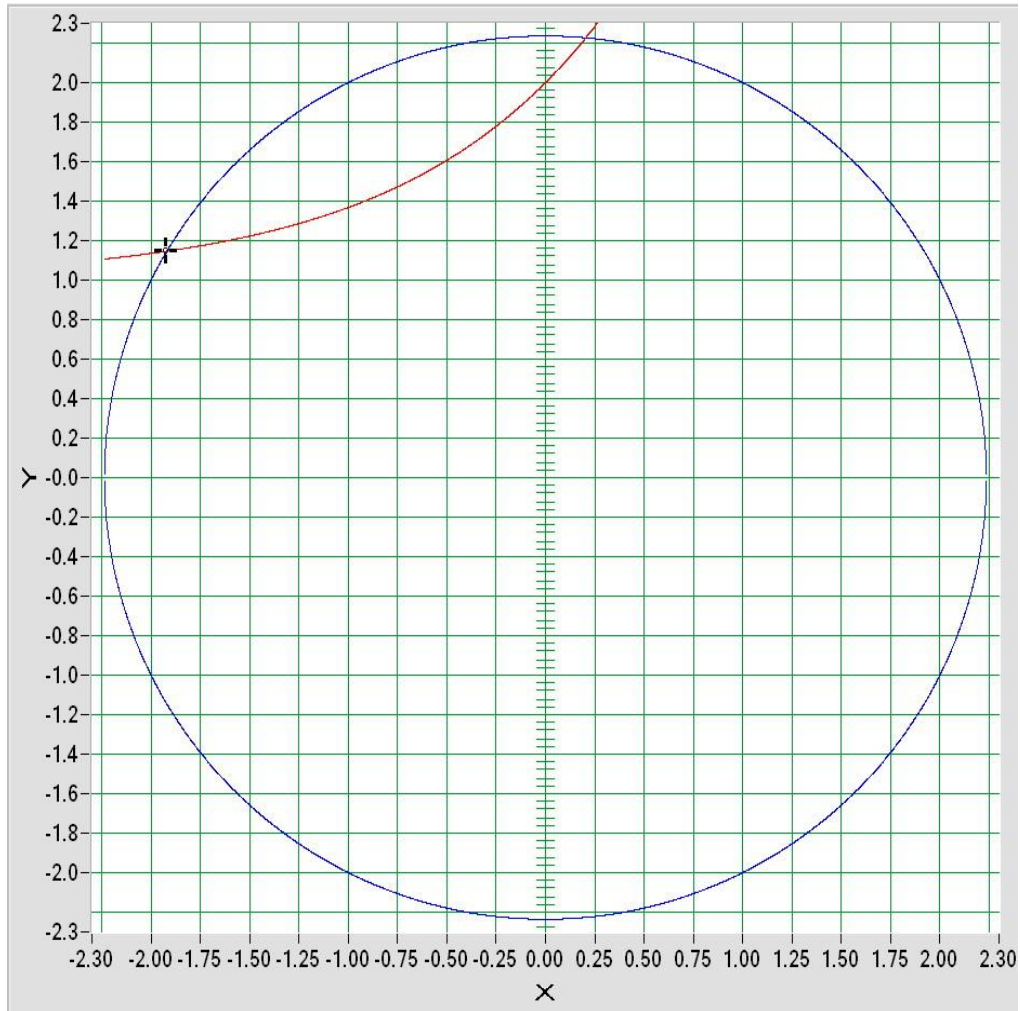
$$f_1(x, y) \equiv x^2 + y^2 - 5 = 0, \quad f_2(x, y) \equiv y - e^x - 1 = 0.$$

Aproximațiile inițiale se iau:

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

De exemplu, acestea se pot găsi analizând intersecția graficelor curbelor

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



Matricea jacobian este:

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

Luăm $\epsilon = 1\text{E-}6$. Calculul este efectuat în simplă precizie. Soluția calculată (x, y) , numărul de iterații, și valorile lui \mathbf{f} în soluție, 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 pași:

$\mathbf{x}^{(0)}$	Nr. iterații	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

Observații

Derivatele parțiale ale funcțiilor f_i sunt calculate numeric , cu $h = 0.001$. Numărul de iterații pentru a doua rădăcină este mai mare decât cel pentru prima rădăcină, întrucât aproximația inițială (0.5, 2) este mai îndepărtată de rădăcină. Cu aproximația $\mathbf{x}^{(0)} = (0.2, 2.2)$, se găsește aceeași soluție în 8 iterații.

■

2) Metoda Newton:

$\mathbf{x}^{(0)}$	Nr. iterații	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 parțiale sunt calculate cu matricea jacobian $\mathbf{F}(x, y)$

■

Exercițiu

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 $w_0 = (2, 2, -1)$ și $w_0 = (1, 1, 1)$.

■