

PA081: Programování numerických výpočtů

5. Systémy nelineárních rovnic

Aleš Křenek

jaro 2011

Řešený problém

- ▶ formulace problému

$$F_i(x_1, \dots, x_N) = 0 \quad \text{pro } i = 1, \dots, N$$

Řešený problém

- ▶ formulace problému

$$F_i(x_1, \dots, x_N) = 0 \quad \text{pro } i = 1, \dots, N$$

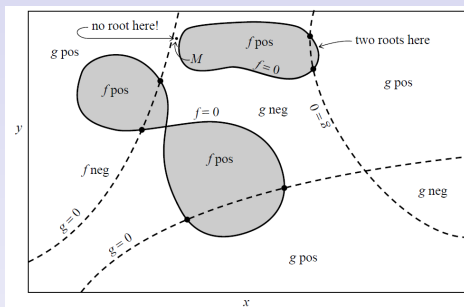
- ▶ není to jednoduché, neexistuje univerzální řešení

Řešený problém

- ▶ formulace problému

$$F_i(x_1, \dots, x_N) = 0 \quad \text{pro } i = 1, \dots, N$$

- ▶ není to jednoduché, neexistuje univerzální řešení
- ▶ pro dvě dimenze, funkce $f(x, y), g(x, y)$



Metoda prosté
iterace

Newtonova
metoda

Hledání po
přímce

Metoda sečen

- ▶ funkce nemají obecně nic společného
- ▶ řešení celého systému se objevují v podstatě náhodně
- ▶ v obecném případě hledáme společné body hyperpovrchů dimenze $N - 1$
 - ▶ oblasti, kde je konkrétní F_i nulová
- ▶ konkrétní F_i jich může vygenerovat několik
 - ▶ ani nevíme kolik jich je
- ▶ bez podrobnější znalosti konkrétního problému se neobejdeme

- ▶ zobecnění metody pro jednu proměnnou
- ▶ problém přeformulujeme do podoby

$$x_1 = G_1(\mathbf{x})$$

$$x_2 = G_2(\mathbf{x})$$

$$\vdots$$

$$x_N = G_N(\mathbf{x})$$

- ▶ potřebujeme nějakou metriku na \mathbb{R}^N
- ▶ je-li $\mathbf{G}(\mathbf{x})$ kontrakce na nějaké uzavřené omezené podmnožině \mathbb{R}^N , pak v ní existuje pevný bod $\mathbf{G}(\xi) = \xi$
- ▶ posloupnost $\mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{G}(\mathbf{x}_i)$ konverguje k ξ

- ▶ praktické kritérium konvergence

$$\left| \frac{\partial G_i(\mathbf{x})}{\partial x_j} \right| \leq \frac{q}{N} \quad \text{pro všechna } i, j = 1, \dots, N \text{ a } 0 \leq q < 1$$

- ▶ resp. slabší

$$\sum_{j=1}^N \left| \frac{\partial G_i(\mathbf{x})}{\partial x_j} \right| \leq q < 1 \quad \text{pro všechna } i = 1, \dots, N$$

- ▶ důkaz uvažuje metriku $\rho(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \max_{1 \leq i \leq N} |x_i - y_i|$
- ▶ základem je Taylorův rozvoj $\mathbf{G}(\mathbf{x} + \Delta \mathbf{x})$
 - ▶ ve více dimenzích vede právě na sumu parciálních derivací

Metoda prosté iterace – příklad

- ▶ řešte systém rovnic

$$(x - 1)^2 - y - \frac{1}{2} = 0$$
$$\frac{1}{4}x^2 + y^2 - 1 = 0$$

- ▶ v grafu
 - ▶ parabola s vrcholem $(1, -\frac{1}{2})$
 - ▶ elipsa se středem v 0 a poloosami 2 a 1

Metoda prosté iterace – příklad

- ▶ rovnice vyjádříme jako

$$x = G_1(x, y) = \frac{1}{2}(x^2 - y + \frac{1}{2})$$

$$y = G_2(x, y) = \frac{1}{8}(-x^2 - 4y^2 + 8y + 4)$$

- ▶ parciální derivace

$$\begin{aligned} \frac{\partial G_1}{\partial x} &= x & \frac{\partial G_1}{\partial y} &= \frac{1}{2} \\ \frac{\partial G_2}{\partial x} &= -\frac{1}{4}x & \frac{\partial G_2}{\partial y} &= -y + 1 \end{aligned}$$

- ▶ v okolí $(0, 1)$ jsou podmínky konvergence splněny
- ▶ metoda najde kořen cca. $(-0.222, 0.994)$

Metoda prosté iterace – příklad

- ▶ druhý kořen je poblíž $(2, 0)$
- ▶ metoda diverguje
 - ▶ $\partial G_1 / \partial x$ a $\partial G_2 / \partial y$ porušují podmínky konvergence

Metoda prosté iterace – příklad

- ▶ druhý kořen je poblíž $(2, 0)$
- ▶ metoda diverguje
 - ▶ $\partial G_1/\partial x$ a $\partial G_2/\partial y$ porušují podmínky konvergence
- ▶ stačí použít

$$G_1(x, y) = -\frac{1}{4}(x^2 - 6x - y + \frac{1}{2})$$

- ▶ metoda už konverguje, i když kritérium není zcela splněno
 - ▶ podmínka byla postačující, nikoli nutná
 - ▶ při jinak definované metrice už je \mathbf{G} kontrakce

Newtonova metoda pro systémy rovnic

- ▶ Taylorův rozvoj systému

$$F_i(\mathbf{x} + \Delta\mathbf{x}) = F_i(\mathbf{x}) + \sum_{j=1}^N \frac{\partial F_i}{\partial x_j} \Delta x_j + O(\Delta\mathbf{x}^2)$$

- ▶ v maticovém vyjádření s Jakobiánem $\mathbf{J} = (\partial F_i / \partial x_j)$

$$\mathbf{F}(\mathbf{x} + \Delta\mathbf{x}) = \mathbf{F}(\mathbf{x}) + \mathbf{J}\Delta\mathbf{x} + O(\Delta\mathbf{x}^2)$$

- ▶ položíme $\mathbf{F}(\mathbf{x} + \Delta\mathbf{x}) = 0$ a zanedbáním dostáváme

$$\mathbf{J}\Delta\mathbf{x} = -\mathbf{F}(\mathbf{x})$$

- ▶ $\Delta\mathbf{x}$ použijeme jako iterační krok
 - ▶ získáme řešením systému lineárních rovnic
 - ▶ metody probereme v některé z dalších přednášek

Newtonova metoda pro systémy rovnic

- ▶ vlastnosti analogické jednodimenzionální verzi
- ▶ rychlá (kvadratická) konvergence
 - ▶ začne stagnovat při dosažení strojové přesnosti v \mathbf{x} nebo \mathbf{F}
 - ▶ kritéria konvergence zpravidla

$$\sum |x_i| < \epsilon_x \quad \text{nebo} \quad \sum |F_i| < \epsilon_F$$

(které nastane dříve)

- ▶ špatné globální vlastnosti
 - ▶ při nepřesném odhadu může snadno zabloudit
 - ▶ nutná kontrola řešení
- ▶ potřebné výpočty derivací
 - ▶ není tolik jiných metod na výběr
 - ▶ v nouzi má smysl i aproximace konečnou diferencí
 - ▶ dopředný (recyklace hodnoty funkce) nebo centrální výpočet

Newtonova metoda pro systémy rovnic

- ▶ problém $f' \rightarrow 0$ „obohacen“ na singularity J
 - ▶ mnoho řešení - určitě se netrefíme
 - ▶ žádné řešení - ??

Newtonova metoda pro systémy rovnic

- ▶ problém $f' \rightarrow 0$ „obohacen“ na singularity J
 - ▶ mnoho řešení - určitě se netrefíme
 - ▶ žádné řešení - ??
- ▶ závažnější numerické potíže
 - ▶ např. opakované přičtení malé hodnoty by nasměrovalo metodu jinam
 - ▶ přetečení a podtečení při násobení
 - ▶ maskovány v maticových operacích - špatně odhalitelné

Newtonova metoda pro systémy rovnic

- ▶ problém $f' \rightarrow 0$ „obohacen“ na singularity J
 - ▶ mnoho řešení - určitě se netrefíme
 - ▶ žádné řešení - ??
- ▶ závažnější numerické potíže
 - ▶ např. opakované přičtení malé hodnoty by nasměrovalo metodu jinam
 - ▶ přetečení a podtečení při násobení
 - ▶ maskovány v maticových operacích - špatně odhalitelné
- ▶ správné škálování
 - ▶ řádově srovnatelné hodnoty nezávislých proměnných
 - ▶ dtto. funkční hodnoty, i vůči proměnným
 - ▶ nejlépe v řádu jednotek
 - ▶ odpovídající nastavení intervalu pro difference místo derivací
 - ▶ když to nejde - řeším ten správný problém?

Převedení na optimalizaci

- ▶ optimalizační metody (hledání minima)
 - ▶ numericky a algoritmicky příjemnější
 - ▶ zdánlivě složitější problém
 - ▶ zkusíme řešení rovnic převést na optimalizaci
- ▶ definujeme funkci

$$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \sum F_i(\mathbf{x})^2$$

- ▶ pouze nezáporné hodnoty
- ▶ globální minima (0) v kořenech původního systému \mathbf{F}

Převedení na optimalizaci

- ▶ optimalizační metody (hledání minima)
 - ▶ numericky a algoritmicky příjemnější
 - ▶ zdánlivě složitější problém
 - ▶ zkusíme řešení rovnic převést na optimalizaci
- ▶ definujeme funkci

$$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \sum F_i(\mathbf{x})^2$$

- ▶ pouze nezáporné hodnoty
- ▶ globální minima (0) v kořenech původního systému \mathbf{F}
- ▶ optimalizační metody hledají **lokální** minimum
 - ▶ taková $f(\mathbf{x})$ jich má zpravidla příliš mnoho
 - ▶ nutný ještě přesnější odhad řešení
- ▶ využití v kombinovaných metodách

Newtonova metoda s hledáním po přímce

- ▶ krok Newtonovy metody pro řešení $F(\mathbf{x}) = 0$
- ▶ používá se k minimalizaci funkce $f(\mathbf{x}) = \sum F_i(\mathbf{x})^2$
- ▶ v případě potřeby se krok zkrátí
- ▶ v reálných případech úspěšnější
 - ▶ exaktní specifikace podmínek konvergence je komplikovaná a v praxi téměř neověřitelná
- ▶ metoda může uváznout v lokálním minimu f
 - ▶ lze snadno detekovat
 - ▶ je třeba zkusit jiný počáteční odhad

Newtonova metoda s hledáním po přímce

- ▶ Newtonovský krok $\Delta \mathbf{x}$ je směrem dolů vůči f

$$(\nabla f)^T \Delta \mathbf{x} = (\mathbf{F}^T \mathbf{J})(-\mathbf{J}^{-1} \mathbf{F}) = -\mathbf{F}^T \mathbf{F} < 0$$

Newtonova metoda s hledáním po přímce

- ▶ Newtonovský krok $\Delta \mathbf{x}$ je směrem dolů vůči f

$$(\nabla f)^T \Delta \mathbf{x} = (\mathbf{F}^T \mathbf{J})(-\mathbf{J}^{-1} \mathbf{F}) = -\mathbf{F}^T \mathbf{F} < 0$$

- ▶ směr $\Delta \mathbf{x}$ je správně
 - ▶ při dostatečně krátkém kroku hodnota f poklesne
- ▶ celý krok může být příliš
 - ▶ kvadratická aproximace může být nepřesná

Newtonova metoda s hledáním po přímce

- ▶ Newtonovský krok $\Delta \mathbf{x}$ je směrem dolů vůči f

$$(\nabla f)^T \Delta \mathbf{x} = (\mathbf{F}^T \mathbf{J})(-\mathbf{J}^{-1} \mathbf{F}) = -\mathbf{F}^T \mathbf{F} < 0$$

- ▶ směr $\Delta \mathbf{x}$ je správně
 - ▶ při dostatečně krátkém kroku hodnota f poklesne
- ▶ celý krok může být příliš
 - ▶ kvadratická aproximace může být nepřesná
- ▶ volíme krok $\lambda \Delta \mathbf{x}$ pro vhodné $0 < \lambda \leq 1$
 - ▶ zdánlivě nejlepší je minimalizovat $f(\mathbf{x} + \lambda \Delta \mathbf{x})$ vůči λ
 - ▶ výpočetně náročné (počet vyhodnocení \mathbf{F})
 - ▶ lze ukázat, že to není nezbytné k dosažení rychlé konvergence

Newtonova metoda s hledáním po přímce

- ▶ Newtonovský krok $\Delta \mathbf{x}$ je směrem dolů vůči f

$$(\nabla f)^T \Delta \mathbf{x} = (\mathbf{F}^T \mathbf{J})(-\mathbf{J}^{-1} \mathbf{F}) = -\mathbf{F}^T \mathbf{F} < 0$$

- ▶ směr $\Delta \mathbf{x}$ je správně
 - ▶ při dostatečně krátkém kroku hodnota f poklesne
- ▶ celý krok může být příliš
 - ▶ kvadratická aproximace může být nepřesná
- ▶ volíme krok $\lambda \Delta \mathbf{x}$ pro vhodné $0 < \lambda \leq 1$
 - ▶ zdánlivě nejlepší je minimalizovat $f(\mathbf{x} + \lambda \Delta \mathbf{x})$ vůči λ
 - ▶ výpočetně náročné (počet vyhodnocení \mathbf{F})
 - ▶ lze ukázat, že to není nezbytné k dosažení rychlé konvergence
- ▶ prosté kritérium $f(\mathbf{x} + \lambda \Delta \mathbf{x}) < f(\mathbf{x})$ nestačí
 - ▶ je třeba $f(\mathbf{x} + \lambda \Delta \mathbf{x}) \leq f(\mathbf{x}) + \alpha \lambda (\nabla f)^T \Delta \mathbf{x}$
 - ▶ stačí malé α , např. 10^{-4}

Newtonova metoda s hledáním po přímce

- ▶ první pokus - plný krok $\Delta \mathbf{x}$
- ▶ ideální by bylo minimalizovat $g(\lambda) = f(\mathbf{x} + \lambda \Delta \mathbf{x})$
- ▶ platí $g'(0) = (\nabla f)^T \Delta \mathbf{x}$

Newtonova metoda s hledáním po přímce

- ▶ první pokus - plný krok $\Delta \mathbf{x}$
- ▶ ideální by bylo minimalizovat $g(\lambda) = f(\mathbf{x} + \lambda \Delta \mathbf{x})$
- ▶ platí $g'(0) = (\nabla f)^T \Delta \mathbf{x}$
- ▶ aproximujeme $g(\lambda)$ polynomem
- ▶ nejprve kvadratický procházející $g(0)$ a $g(1)$

$$a\lambda^2 + g'(0)\lambda + g(0)$$

minimum je v $\lambda_1 = -g'(0)/2a$

Newtonova metoda s hledáním po přímce

- ▶ první pokus - plný krok $\Delta \mathbf{x}$
- ▶ ideální by bylo minimalizovat $g(\lambda) = f(\mathbf{x} + \lambda \Delta \mathbf{x})$
- ▶ platí $g'(0) = (\nabla f)^T \Delta \mathbf{x}$
- ▶ aproximujeme $g(\lambda)$ polynomem
- ▶ nejprve kvadratický procházející $g(0)$ a $g(1)$

$$a\lambda^2 + g'(0)\lambda + g(0)$$

minimum je v $\lambda_1 = -g'(0)/2a$

- ▶ další kroky kubický polynom procházející $g(0)$ a dvěma nejčerstvějšími λ_i

$$a\lambda^3 + b\lambda^2 + g'(0)\lambda + g(0)$$

- ▶ opakujeme do dosažení $g(\lambda) \leq g(0) + \alpha \lambda g'(0)$

Newtonova metoda – shrnutí

- ▶ rychlá konvergence, špatné globální vlastnosti
- ▶ vyžaduje derivace
- ▶ globální vlastnosti lze vylepšit řízeným zkrácením kroku
- ▶ i tak není metoda 100% spolehlivá
- ▶ neobejdeme se bez základní znalosti řešeného problému

Vícerozměrná metoda sečen

- ▶ jednorozměrná metoda pracuje s aproximací derivace

$$d_{i+1} = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{x_{i+1} - x_i}$$

- ▶ analogicky pro více rozměrů

$$\mathbf{B}_{i+1} \Delta \mathbf{x}_i = \Delta \mathbf{F}_i$$

- ▶ nedává jednoznačné řešení
- ▶ Broydenova metoda
 - ▶ rekurentní formule \mathbf{B}_{i+1} na základě \mathbf{B}_i
 - ▶ minimální změna, která ještě vyhoví kritériu sečny

$$\mathbf{B}_{i+1} = \mathbf{B}_i + \frac{(\Delta \mathbf{F}_i - \mathbf{B}_i \Delta \mathbf{x}_i) \otimes \Delta \mathbf{x}_i}{(\Delta \mathbf{x}_i)^T \Delta \mathbf{x}_i}$$

Vícerozměrná metoda sečen

- ▶ neexistuje jednoznačná analogie separace kořenů
 - ▶ může zabloudit stejně jako Newtonova metoda
- ▶ lze aplikovat stejný princip hledání po přímce
- ▶ **B** není přesně Jakobián
 - ▶ negarantuje, že $\Delta \mathbf{x}$ směřuje dolů vůči $f = \frac{1}{2} \mathbf{F} \mathbf{F}$
 - ▶ základní předpoklad hledání po přímce
- ▶ v případě selhání náhrada \mathbf{B}_i aproximací **J**
 - ▶ zpravidla dopředné diference

Vícerozměrná metoda sečen

- ▶ neexistuje jednoznačná analogie separace kořenů
 - ▶ může zabloudit stejně jako Newtonova metoda
- ▶ lze aplikovat stejný princip hledání po přímce
- ▶ **B** není přesně Jakobián
 - ▶ negarantuje, že $\Delta \mathbf{x}$ směřuje dolů vůči $f = \frac{1}{2} \mathbf{F} \mathbf{F}$
 - ▶ základní předpoklad hledání po přímce
- ▶ v případě selhání náhrada \mathbf{B}_i aproximací \mathbf{J}
 - ▶ zpravidla dopředné diference
- ▶ problém singularity **B** (resp. **J** v Newtonově metodě)
 - ▶ nelze určit následující krok
 - ▶ řeší se umělou modifikací **B** nebo „krokem stranou“
 - ▶ de-facto restart z jiného, bližšího bodu

Vícerozměrná metoda sečen

- ▶ neexistuje jednoznačná analogie separace kořenů
 - ▶ může zabloudit stejně jako Newtonova metoda
- ▶ lze aplikovat stejný princip hledání po přímce
- ▶ **B** není přesně Jakobián
 - ▶ negarantuje, že $\Delta \mathbf{x}$ směřuje dolů vůči $f = \frac{1}{2} \mathbf{F} \mathbf{F}$
 - ▶ základní předpoklad hledání po přímce
- ▶ v případě selhání náhrada \mathbf{B}_i aproximací **J**
 - ▶ zpravidla dopředné diference
- ▶ problém singularity **B** (resp. **J** v Newtonově metodě)
 - ▶ nelze určit následující krok
 - ▶ řeší se umělou modifikací **B** nebo „krokem stranou“
 - ▶ de-facto restart z jiného, bližšího bodu
- ▶ existují i komplikovanější metody
 - ▶ neomezují se jen na hledání po přímce

- ▶ řešení systémů nelineárních rovnic je jeden z nejnepříjemnějších problémů
 - ▶ řešení se vyskytují „náhodně“
 - ▶ nelze mechanicky separovat kořeny
 - ▶ vždy je třeba mít základní představu o charakteristice problému
- ▶ metoda prosté iterace
 - ▶ dokážeme-li splnit podmínky konvergence
 - ▶ rychost konvergence neurčitá
- ▶ Newtonova a Broydenova metoda
 - ▶ vylepšení globálních vlastností hledáním po přímce
 - ▶ nejsou zcela spolehlivé, mohou uváznout v lokálním minimu pomocné funkce
- ▶ detaily a implementace viz W.H.Press, *Numerical Recipes in C*
 - ▶ netřeba se učit vzorce z paměti
 - ▶ důležité je znát podstatu problémů a principy metod