PA081: Programování numerických výpočtů

3. Nelineární rovnice o jedné neznámé

Aleš Křenek

jaro 2012

Obecná formulace problému

- hledáme řešení rovnice

$$F(x) = G(x)$$

  kde alespoň jedna z funkcí F, G není lineární
- víceméně všechny numerické metody jsou iterační
  - začínáme s odhadem řešení x_0
  - v každém kroku odhad postupně zpřesňujeme
- výpočet končí dosažením kritéria zastavení
  - dosáhli jsme dostatečně přesné aproximace řešení

Obecná formulace problému

- hledáme řešení rovnice

$$F(x) = G(x)$$

  kde alespoň jedna z funkcí F, G není lineární
- víceméně všechny numerické metody jsou iterační
  - začínáme s odhadem řešení x_0
  - v každém kroku odhad postupně zpřesňujeme
- výpočet končí dosažením kritéria zastavení
  - dosáhli jsme dostatečně přesné aproximace řešení
- anebo
  - rovnice nemá řešení
  - použitá metoda pro danou rovnici nefunguje
  - špatně jsme odhadli x_0
  - dosáhli jsme falešného řešení
- žádná metoda není dokonale univerzální
- bez jisté analýzy vlastností rovnice se neobejdeme

Železniční příklad

Kolejnice délky $2d$ je ohnutá do oblouku tak, že její konce jsou ve vzálenosti $2a$. Jaká je vzdálenost středu kolejnice od spojnice krajních bodů?

- označíme R poloměr oblouku, α úhel poloviny úseče, r hledanou vzdálenost
- platí rovnice

$$d = R\alpha \qquad R\sin\alpha = a \qquad r = R(1-\cos\alpha)$$

- dosazením a jednoduchou úpravou

$$\frac{d}{a}\sin\alpha = \alpha$$

- hledáme pevný bod funkce
- kandidát na metodu prosté iterace

Metoda prosté iterace

- rovnice ve tvaru $x = f(x)$
- řešením je pevný bod funkce f
- počítáme opakovaně $x_{i+1} = f(x_i)$
  - až k dosažení kritéria konvergence

Metoda prosté iterace

- rovnice ve tvaru $x = f(x)$
- řešením je pevný bod funkce f
- počítáme opakovaně $x_{i+1} = f(x_i)$
  - až k dosažení kritéria konvergence
- kdy a proč to funguje? – věta o pevném bodě

  Je-li pro $K \subseteq \mathbb{R}$ funkce $f\colon K \to K$ kontrakce, tj. existuje $q \in (0,1)$ tak, že $\forall x, y \in K\colon |f(x) - f(y)| \leq q|x - y|$, potom existuje $x^* \in K$ takové, že pro libovolné $x_0 \in K$ je x^* limitou posloupnosti $x_{i+1} = f(x_i)$.
- idea důkazu

$$|x_{i+1} - x^*| = |f(x_i) - f(x^*)| < |x_i - x^*|$$

Metoda prosté iterace

Pro železniční příklad

- je zobrazení $\alpha \mapsto \frac{d}{a} \sin \alpha$ kontrakce?
- postačující podmínka

$$\forall x \in K\colon f'(x) < 1 \quad \text{tedy} \quad \cos \alpha < \frac{a}{d}$$

- $\frac{d}{a} \sin \alpha = \alpha$ bude mít řešení v $(\arccos \frac{a}{d}, \frac{\pi}{2})$

Metoda prosté iterace

Pro železniční příklad

- je zobrazení $\alpha \mapsto \frac{d}{a} \sin \alpha$ kontrakce?
- postačující podmínka

$$\forall x \in K \colon f'(x) < 1 \quad \text{tedy} \quad \cos \alpha < \frac{a}{d}$$

- $\frac{d}{a} \sin \alpha = \alpha$ bude mít řešení v $(\arccos \frac{a}{d}, \frac{\pi}{2})$
- implementačně velmi jednoduchá metoda
- zdánlivě velmi speciální případ
  - řešený problém lze často transformovat, aby splňoval podmínku kontrakce
- rychlost konvergence záleží na vlastnostech $f(x)$

Hledání kořenů

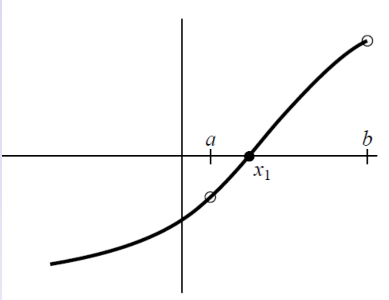
- pro rovnici $F(x) = G(x)$ uvažujeme $f(x) = F(x) - G(x)$
- provedeme separaci kořenů $f(x)$
  - definiční obor $f(x)$ rozdělíme na intervaly $[a_i, b_i]$
  - v každém $[a_i, b_i]$ má funkce právě jeden kořen
  - $f(a_i)f(b_i) < 0$
  - f je na $[a_i, b_i]$ spojitá
- nepovede-li se separace dokonale, musíme být připraveni na následky
- vybereme vhodnou metodu hledání kořene na $[a_i, b_i]$
- stanovíme konkrétní podmínku ukončení

Separace kořenů

Spojitá funkce

- máme štěstí a f je spojitá, platí varianta věty o střední hodnotě

  Je-li f na $[a, b]$ spojitá a $f(a)f(b) < 0$, existuje $x \in [a, b]$ tak, že $f(x) = 0$



Separace kořenů

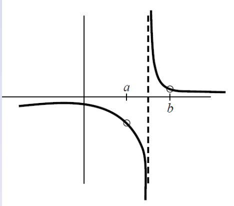
Nespojitá funkce

- není-li f spojitá, ale je ohraničená
  - „kříží“ osu x v bodě nespojitosti
  - numericky nerozlišitelné od kořene

Separace kořenů

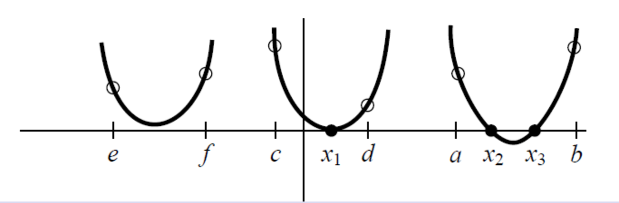
Nespojitá funkce

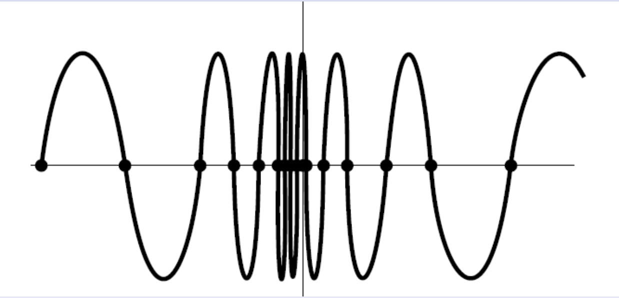
- není-li f spojitá, ale je ohraničená
  - „kříží“ osu x v bodě nespojitosti
  - numericky nerozlišitelné od kořene
- není-li ani ohraničená
  - např. $\frac{1}{x-c}$
  - některé metody najdou „kořen“ v c
  - snadno identifikovatelný problém



Separace kořenů

Patologické případy





Separace kořenů

Praktický postup

- základní analýza vlastností f je nezastupitelná
  - netušíme-li vůbec, zdali má kořeny, kde jsou, kolik jich je atd., je problém zpravidla někde jinde

Separace kořenů

Praktický postup

- základní analýza vlastností f je nezastupitelná
  - netušíme-li vůbec, zdali má kořeny, kde jsou, kolik jich je atd., je problém zpravidla někde jinde
- algoritmus „look inward“ (NRC)
  - alespoň nahrubo známe interval, kde by kořen měl být
  - rozdělíme na n menších a postupně prohledáváme
  - v případě neúspěchu můžeme opakovat s větším n

Separace kořenů

Praktický postup

- základní analýza vlastností f je nezastupitelná
  - netušíme-li vůbec, zdali má kořeny, kde jsou, kolik jich je atd., je problém zpravidla někde jinde
- algoritmus „look inward“ (NRC)
  - alespoň nahrubo známe interval, kde by kořen měl být
  - rozdělíme na n menších a postupně prohledáváme
  - v případě neúspěchu můžeme opakovat s větším n
- algoritmus „look outward“ (NRC)
  - poslední zoufalý pokus
  - počáteční interval expandujeme exponenciálně na tu stranu, kde se funkce blíží k ose x
  - zpravidla funguje pro funkce, které mají pro $x \to \pm\infty$ opačné zneménko

Separace kořenů

Algoritmus „look inward“

```
void zbrak(float (*fx)(float), float x1, float x2, int n,
   float xb1[], float xb2[], int *nb)
{
   int nbb,i;
   float x,fp,fc,dx;
   nbb=0;
   dx=(x2-x1)/n;
   fp=(*fx)(x=x1);
   for (i=1;i<=n;i++) {
      fc=(*fx)(x += dx);
      if (fc*fp <= 0.0) {
         xb1[++nbb]=x-dx;
         xb2[nbb]=x;
         if(*nb == nbb) return;
      }
      fp=fc;
   }
   *nb = nbb;
}
```

Separace kořenů

Algoritmus „look outward“

```
int zbrac(float (*func)(float), float *x1, float *x2)
{
   int j;
   float f1,f2;
   f1=(*func)(*x1);
   f2=(*func)(*x2);
   for (j=1;j<=NTRY;j++) {
      if (f1*f2 < 0.0) return 1;
      if (fabs(f1) < fabs(f2))
      f1=(*func)(*x1 += FACTOR*(*x1-*x2));
      else
      f2=(*func)(*x2 += FACTOR*(*x2-*x1));
   }
   return 0;
}
```

Metoda půlení intervalů

Princip

- začínáme se separovaným kořenem
  - pro daný interval $[a, b]$ platí $f(a)f(b) < 0$
- není-li $\frac{b-a}{2}$ přesně kořen, platí právě jedna nerovnost

$$f\left(\frac{b-a}{2}\right) f(a) < 0 \qquad f\left(\frac{b-a}{2}\right) f(b) < 0$$

- interval rozpůlíme a pokračujeme rekurzivně
- metoda vždy dokonverguje ke kořeni nebo k singularitě
- je-li jich více, odhalí jen jeden

Metoda půlení intervalů

Konvergence

- je-li požadovaná přesnost ϵ, je třeba
$$n = \log_2 \frac{b-a}{\epsilon}$$
iteračních kroků
- lineární rychlost konvergence
  - v každém kroku přibývá konstatně platných číslic přesnosti
- kritéria ukončení
  - jsou-li a, b řádově srovnatelná, nemá smysl více iterací než než počet bitů mantisy
  - v opačném případě opět musíme vědět, co chceme
  - standardně se používá zastavení při velikosti intervalu
  $$\epsilon \frac{|a| + |b|}{2}$$
  kde ϵ je přesnost daného datového typu
- metoda je robustní ale relativně pomalá

Metoda půlení intervalů

```
float rtbis(float (*func)(float), float x1, float x2,
     float xacc,int *iter)
{
    int j;
    float dx,f,fmid,xmid,rtb;
    f=(*func)(x1);
    fmid=(*func)(x2);
    rtb = f < 0.0 ? (dx=x2-x1,x1) : (dx=x1-x2,x2);
    for (j=1;j<=JMAX;j++) {
        fmid=(*func)(xmid=rtb+(dx *= 0.5));
        if (fmid <= 0.0) rtb=xmid;
        if (fabs(dx) < xacc || fmid == 0.0) {
            *iter = j;
            return rtb;
        }
    }
}
```

Newtonova metoda

- také Newton-Raphsonova metoda
- odvozena z Taylorova rozvoje $x^* = x_i + \delta_i$

$$f(x_i + \delta_i) = f(x_i) + f'(x_i)\delta_i + \frac{f''(x_i)\delta_i^2}{2!} + \ldots$$

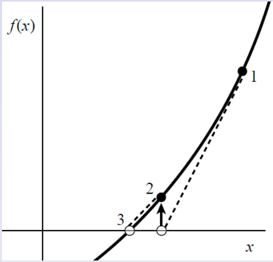
- zanedbáme vyšší derivace

$$\delta_i \doteq -\frac{f(x_i)}{f'(x_i)}$$

- opakujeme iterační krok

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

- nutno spočítat i derivaci



Newtonova metoda

Konvergence

- označíme x^* kořen, a ϵ_i odchylky $x_i - x^*$

$$x^* + \epsilon_{i+1} = x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)} = x^* + \epsilon_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)}$$

  tedy $\epsilon_{i+1} = \epsilon_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)}$
- Taylorův rozvoj

$$0 = f(x^*) = f(x_i) - \epsilon_i f'(x_i) + \frac{\epsilon_i^2 f''(\xi_i)}{2!}$$

  kde $\xi_i \in [0, \epsilon_i]$
- podělením $f'(x_i)$ a dosazením dostaneme

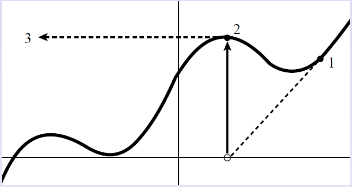
$$\epsilon_{i+1} = -\epsilon_i^2 \frac{f''(\xi_i)}{2f'(x_i)}$$

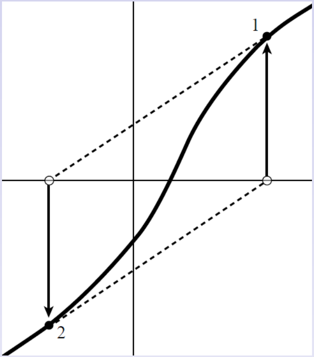
- kvadratická konvergence
  - v každém kroku se zdvojnásobí počet platných číslic

Newtonova metoda

Nešvary

- špatná globální konvergence
  - velká citlivost na lokální vlastnosti f mimo kořen





- prakticky nepoužitelná sama o sobě
  - nutno kombinovat s jinými metodami
  - vhodná k „vyleštění“ nahrubo nalezeného kořene

Newtonova metoda

```
float rtnewt(void (*funcd)(float, float *, float *),
             float x1, float x2, float xacc)
{
   int j;
   float df,dx,f,rtn;
   rtn=0.5*(x1+x2);
   for (j=1;j<=JMAX;j++) {
      (*funcd)(rtn,&f,&df);
      dx=f/df;
      rtn -= dx;
      if ((x1-rtn)*(rtn-x2) < 0.0) {
        /* chyba, utekli jsme */
         return 0;
      }
      if (fabs(dx) < xacc) return rtn;
   }
   /* Příliš mnoho iterací */
   return 0;
}
```

Seminewtonovské metody

- výpočet derivace nemusí být možný nebo žádoucí
- aproximace

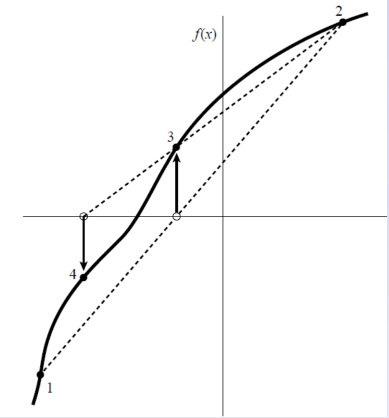
$$f'(x) = \frac{f(x+\delta) - f(x)}{\delta}$$

  není vhodná
  - potřebuji 2× vyhodnocení f, tj. rychost konvergence jen $\sqrt{2}$
  - malé δ – numerická nestabilita
  - velké δ – nepřesnost
- seminewtonovské metody – aproximace derivace „uvnitř“
  - metoda sečen
  - metoda regula falsi

Seminewtonovské metody

Metoda sečen

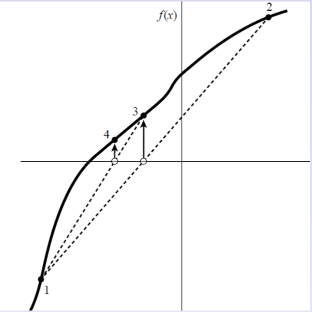
- derivace je aproximována směrnicí spojnice dvou odhadů
- vždy počítá s posledními dvěma odhady
- konverguje obecně rychleji
  - zlatý řez (1.618...)
- může porušit separaci kořene



Seminewtonovské metody

Regula falsi

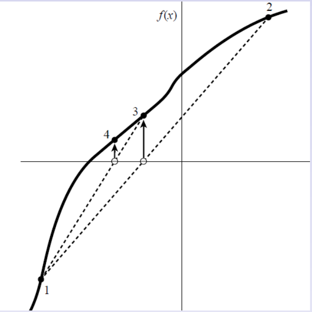
- důsledně zachovává separaci kořene
- v případě potřeby použije starší odhad

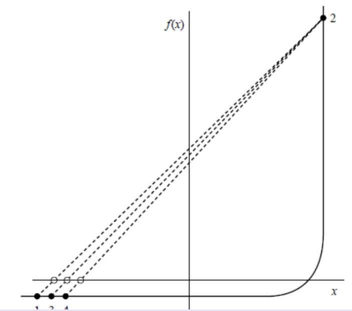


Seminewtonovské metody

Regula falsi

- důsledně zachovává separaci kořene
- v případě potřeby použije starší odhad





- v patologických případech pomalá konvergence

Riddersova metoda

- patologické chování předchozích metod
  - jedním z důvodů je proložení přímkou
- idea Riddersovy metody – proložit exponenciálou

$$p(x) = a + be^{cx}$$

- potřebné 3 body x_0, x_1, x_2, omezené na $x_1 - x_0 = x_2 - x_1 = d$
- $p(x) = 0$ v bodě

$$x_4 = x_0 + d\frac{\ln b}{\ln a} \qquad \text{kde} \qquad a = \frac{f(x_0) - f(x_1)}{f(x_1) - f(x_2)}$$

$$b = \frac{f(x_0) - f(x_1)}{f(x_0) - af(x_1)}$$

Riddersova metoda

- vyžaduje výpočet dvou logaritmů, příliš náročné
- nahrazeno aproximací

$$x_3 = x_0 + d\frac{u(3+u^2)}{v(3+v^2)} \qquad \text{kde} \qquad u = \frac{b-1}{b+1} \quad v = \frac{a-1}{a+1}$$

- Ridders, C. *A new algorithm for computing a single root of a real continuous function*. IEEE Transactions on Circuits and Systems 26: 979-980, 1979.
- x_4 vždy spadne do $[x_0, x_2]$
- vybereme nejbližší z x_0, x_1, x_2 a dopočítáme třetí do stejné vzdálenosti
- rychlost konvergence $\sqrt{2}$
  - po krocích kvadraticky, ale vyžaduje dvojí vyhodnocení

Brentova metoda

- půlení intervalu jako bezpečný základ
- proložení inverzní kvadratickou funkcí pro urychlení konvergence
  - x jako kvadratická funkce y
- opět tři aktuální body odhadu x_1, x_2, x_3, výpočet vede na

$$x_3 = x_1 + \frac{P}{Q}$$

  kde P, Q jsou vyjádřeny z x_1, x_2, x_3 a $f(x_1), f(x_2), f(x_3)$ elementárními aritmetickými operacemi
- algoritmus hlídá zejména $|Q| \gg 0$, jinak se vrací k půlení intervalů
- prakticky zřejmě nejuniverzálnější metoda
  - nejsou-li k dispozici derivace
  - neřešíme-li speciální případ, kde jiná metoda funguje lépe a/nebo rychleji

Domácí úkol

- implementujte řešení železničního příkladu probranými základními metodami
  - prostá iterace, Newton, půlení intervalů, sečny a/nebo regula falsi
  - vstupem je i požadovaná přesnost výsledku (vzdálenost středu od spojnice)
  - testujte na více různých vstupech
- pro každou metodu nalezněte co nejlepší separaci kořene/počáteční odhad
  - bezpečně – bude konvergovat
  - co nejlepší konvergence
- odevzdejte
  - implementaci ve svém oblíbeném programovacím jazyce
  - zhodnocení konvergence metod pro tento příklad
  - přiměřené komentáře k volbě počátečních hodnot

Domácí úkol

- numericky stabilní řešení i pro velmi málo odlišná a a d v zadání
  - nápověda: důvěryhodnost metody se projeví srovnáním vypočteného poloměru zakřivení

Domácí úkol

- numericky stabilní řešení i pro velmi málo odlišná a a d v zadání
  - nápověda: důvěryhodnost metody se projeví srovnáním vypočteného poloměru zakřivení
- připravte krátkou prezentaci nejzajímavějších fenoménů
- termín: 21.3.2012

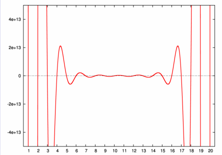
Kořeny polynomů

- speciální případ nelineární rovnice
  - lze aplikovat zjednodušená (rychlejší, přesnější) řešení
  - silnější sklony ke špatnému chování

Kořeny polynomů

- speciální případ nelineární rovnice
  - lze aplikovat zjednodušená (rychlejší, přesnější) řešení
  - silnější sklony ke špatnému chování
- špatná podmíněnost, např. Wilkinsonův polynom

$$w_n(x) = \prod_{i=1}^{n} (x - i)$$



- reálný polynom stupně n má n kořenů

Kořeny polynomů

Potenciální problémy

- násobné kořeny
  - derivace jsou nulové, selhávají Newtonova a seminewtonovské metody
  - sudě násobné kořeny nelze separovat
- kořeny mohou být komplexní, co s nimi?

Kořeny polynomů

Faktorizace kořenů

- pro reálný kořen

$$P_n(x) = (x - x_n)Q_{n-1}(x)$$

- pro dvojici komplexních kořenů

$$\begin{aligned} P_n(x) &= (x - (a + ib))(x - (a - ib))Q_{n-2}(x) \\ &= (x^2 - 2ax + a^2 + b^2)Q_{n-2}(x) \end{aligned}$$

Kořeny polynomů

Faktorizace kořenů

- pro reálný kořen

$$P_n(x) = (x - x_n)Q_{n-1}(x)$$

- pro dvojici komplexních kořenů

$$\begin{aligned} P_n(x) &= (x - (a + ib))(x - (a - ib))Q_{n-2}(x) \\ &= (x^2 - 2ax + a^2 + b^2)Q_{n-2}(x) \end{aligned}$$

- známe-li x_n, dokážeme spočítat koeficienty $Q(x)$

$$\begin{aligned} &(q_0 + q_1 x + \dots)(x - x_n) \\ &\quad = -x_n q_0 + (q_0 - x_n q_1)x + (q_1 - x_n q_2) + \dots \end{aligned}$$

a tedy

$$q_0 = -\frac{p_0}{x_n} \qquad q_i = \frac{p_i - q_{i-1}}{x_n}$$

- analogicky opačným směrem, počínaje q_n

Kořeny polynomů

Faktorizace kořenů

- dvojitá rekurentní formule, hrozí numerická nestabilita
  - vypočteme nepřesné koeficienty Q_{n-1}, použijeme k výpočtu $Q_{n-2}, \ldots$
- stabilní chování
  - kořen s největší absolutní hodnotou, počítáme od q_0
  - kořen s nejmenší absolutní hodnotou, počítáme od q_n
- „leštění kořenů“
  - postupně nalezené kořeny chápeme jako aproximaci
  - použijeme v původním $P(x)$ např. do Newtonovy metody
  - příliš velká chyba může svést leštění k jinému kořenu (lze ohlídat)

Kořeny polynomů

Přímočará metoda

- odchytíme reálný kořen dříve popsanými metodami
  - separace metodou pokusu a omylu
  - řešení zpravidla Newtonovou metodou
    - výpočet derivace polynomu je triviální
- provedeme faktorizaci, opakujeme pro další reálný kořen
  - zpravidla včetně „leštění“
- následně faktorizace kvadratických polynomů
  - Mullerova metoda – zobecnění metody sečen, aproximace parabolou
  - Bairstowova metoda – vede na Newtonovu metodu ve dvou dimenzích

Kořeny polynomů

Další metody

- Laguerre
  - iterační hledání jednoho kořene včetně komplexních
  - triková manipulace s $\ln |P(x)|$ a jeho derivacemi
  - funguje i pro komplexní koeficienty
  - faktorizace a opakované použití
  - iterační krok lze použít k leštění
- Jenkins-Traub
  - propracovaná metoda, základ obecných knihoven
  - odvození vyžaduje 4 kapitoly v knize ...
- Lehmer-Shur
  - generalizace separace kořenů na kruhy v komplexní rovině

Kořeny polynomů

Vlastní hodnoty matic

- vlastní hodnoty matice A jsou kořeny charakteristického polynomu
$$P(x) = \det|A - xI|$$
- lze zkonstuovat matici
$$A = \begin{pmatrix} -\frac{p_{m-1}}{p_m} & -\frac{p_{m-2}}{p_m} & \dots & -\frac{p_0}{p_m} \\ 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & & & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix}$$
jejíž charakteristický polynom je právě $P(x) = \sum p_i x^i$
- lze aplikovat metody hledání vlastních hodnot
    - zpravidla pomalejší ale celkově robustnější

Shrnutí

- řešíme nelineární rovnice tvaru $F(x) = G(x)$ iteračními metodami
- redukce na hledání kořenů $f(x) = 0$
- separace kořenů je klíčová
  - nalezení intervalu, ve kterém leží právě jeden
- metoda půlení intervalů
  - robustní ale pomalá
- Newtonova metoda
  - rychlá konvergence
  - vyžaduje derivaci a dobrý počáteční odhad
- seminewtonovské metody
  - vnitřní aproximace derivace
  - metoda sečen, regula falsi
- pokročilé metody
  - aproximace funkce složitější křivkou
  - Ridders, Brent
- speciální metody pro polynomy