Numerička matematika
14. predavanje

Saša Singer

singer@math.hr

web.math.pmf.unizg.hr/~singer

PMF – Matematički odsjek, Zagreb

Sadržaj predavanja

- Rješavanje sustava nelinearnih jednadžbi:
  - Newtonova metoda za nelinearne sustave.
  - Metoda sekante za nelinearne sustave.
- Uvod u optimizaciju bez ograničenja:
  - Formulacija problema.
  - Vrste metoda za optimizaciju bez ograničenja.

Rješavanje sustava nelinearnih jednadžbi

Formulacija problema

Zadana je funkcija

$$f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m.$$

Radi jednostavnosti, pretpostavljamo da je f definirana na cijelom prostoru $\mathbb{R}^n$.

Kao i prije, tražimo (jednu ili sve) točke $x \in \mathbb{R}^n$ za koje je

$$f(x) = 0 \in \mathbb{R}^m.$$

Najjednostavniji primjer je tzv. linearna (ili afina) funkcija f

$$f(x) = Ax - b, \quad x \in \mathbb{R}^n$$

gdje je $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ zadana pravokutna matrica s m redaka i n stupaca, a $b \in \mathbb{R}^m$ je zadani vektor.
Nultočke ove funkcije su rješenja linearnog sustava $Ax = b$.

Pojednostavljenja — dodatne pretpostavke

Raspisom vektorske jednadžbe $f(x) = 0$ po komponentama u prostoru $\mathbb{R}^m$, dobivamo sustav s m jednadžbi i n nepoznanica

$$f_i(x_1, x_2, \ldots, x_n) = 0, \quad i = 1, \ldots, m.$$

Dodatne pretpostavke u nastavku:

- funkcija f je, općenito, nelinearna,
- broj jednadžbi m jednak je broju nepoznanica n,

tj. funkcija je $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$.

Osim toga, pretpostavljamo

- da f ima samo izolirane nultočke $\alpha \in \mathbb{R}^n$, i
- da je f dovoljno glatka — na cijelom $\mathbb{R}^n$, ili barem u nekoj okolini nultočke.

O generalizaciji metoda iz jedne dimenzije

Očita ideja za rješavanje sustava nelinearnih jednadžbi je

- generalizacija metoda za rješavanje jedne jednadžbe.

Problem: U više dimenzija nema uspoređivanja funkcijskih vrijednosti (vektora f) — osim po komponentama f_i.

Zato se "jednostavne" metode — poput bisekcije,

- teško generaliziraju, a i složenost postaje problem (imamo 2^n vrhova "kocke" i n komponentnih funkcija u svakom vrhu). Probajte zamisliti u $\mathbb{R}^2$!

S druge strane, većina "iteracijskih" funkcija se

- relativno jednostavno generalizira — iz "skalarnih", u "vektorske" ili "matrično–vektorske".

Ilustracija toga = Newtonova metoda i metoda sekante.

Newtonova metoda u $\mathbb{R}^n$

Newtonovu metodu dobivamo linearizacijom funkcije f oko trenutne aproksimacije $x^{(k)} \in \mathbb{R}^n$ — slično kao za $n = 1$, samo su oznake malo drugačije (indeksi služe za komponente).

Izaberemo neku početnu točku $x^{(0)} \in \mathbb{R}^n$. Onda, induktivno, generiramo niz aproksimacija $x^{(k)}$, za $k \geq 0$, na sljedeći način.

Oko trenutne točke $x^{(k)}$, svaku komponentnu funkciju f_i

- aproksimiramo linearnim dijelom Taylorovog razvoja,

tj. odbacujemo sve članove nakon linearnih. Dobivamo

$$f_i(x) \approx f_i(x^{(k)}) + \sum_{j=1}^{n} \frac{\partial f_i}{\partial x_j}(x^{(k)})\,(x_j - x_j^{(k)}), \quad i = 1, \ldots, n.$$

Newtonova metoda u $\mathbb{R}^n$

Iskoristimo Jacobijevu matricu $J_f(x)$, koja sadrži parcijalne derivacije svih komponentnih funkcija po svim varijablama

$$[\,J_f(x)\,]_{ij} = \frac{\partial f_i}{\partial x_j}, \quad i = 1, \ldots, n, \quad j = 1, \ldots, n,$$

ili

$$J_f(x) = \frac{\partial f}{\partial x}(x) = \begin{bmatrix} \dfrac{\partial f_1}{\partial x_1} & \dfrac{\partial f_1}{\partial x_2} & \cdots & \dfrac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \dfrac{\partial f_2}{\partial x_1} & \dfrac{\partial f_2}{\partial x_2} & \cdots & \dfrac{\partial f_2}{\partial x_n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \dfrac{\partial f_n}{\partial x_1} & \dfrac{\partial f_n}{\partial x_2} & \cdots & \dfrac{\partial f_n}{\partial x_n} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n\times n}.$$

Newtonova metoda u $\mathbb{R}^n$

Lineariziranu aproksimaciju za $f(x)$ oko točke $x^{(k)}$ možemo zapisati u matrično–vektorskom obliku

$$f(x) \approx f(x^{(k)}) + J_f(x^{(k)})\,(x - x^{(k)}).$$

Novu aproksimaciju $x^{(k+1)}$ za nultočku dobivamo iz zahtjeva da je

$$f(x^{(k+1)}) \approx f(x^{(k)}) + J_f(x^{(k)})\,(x^{(k+1)} - x^{(k)}) = 0.$$

Ako je $J_f(x^{(k)})$ regularna matrica, onda je pripadna korekcija

$$d^{(k)} := x^{(k+1)} - x^{(k)}$$

jedinstveno rješenje linearnog sustava jednadžbi

$$J_f(x^{(k)})\,d^{(k)} = -f(x^{(k)}).$$

Newtonova metoda u $\mathbb{R}^n$

Za korekciju $d^{(k)}$ onda vrijedi (ali se ne računa ovako)

$$d^{(k)} = -\big[J_f(x^{(k)})\big]^{-1} f(x^{(k)}),$$

pa izlazi standardni zapis za iteracije u Newtonovoj metodi

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \big[J_f(x^{(k)})\big]^{-1} f(x^{(k)}), \quad k = 0, 1, \ldots .$$

U usporedbi sa "skalarnim" oblikom Newtonove metode,

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \frac{f(x^{(k)})}{f'(x^{(k)})},$$

- množenje inverzom Jacobijeve matrice $J_f(x)$, i to slijeva, je "zamjena" za dijeljenje derivacijom funkcije $f'(x)$.

Za računanje, Jacobijeva matrica $J_f(x^{(k)})$ mora biti regularna.

Lokalna konvergencija Newtonove metode u $\mathbb{R}^n$

Uočite da se rješavanje jednog nelinearnog sustava jednadžbi svodi na niz rješavanja linearnih sustava.

Što se konvergencije tiče, vrijedi potpuni analogon rezultata o lokalnoj konvergenciji i brzini konvergencije u jednoj dimenziji.

Teorem. Neka je α nultočka funkcije $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ i neka je f klase C^2 u okolini od α.

Ako je $J_f(\alpha)$ regularna matrica (to je analogon jednostruke nultočke), onda postoji okolina nultočke α, takva da

- za bilo koju početnu točku $x^{(0)}$ iz te okoline,
- niz iteracija generiran Newtonovom metodom, konvergira prema α, i konvergencija je (barem) kvadratna,

tj. vrijedi
$$\|\alpha - x^{(k+1)}\| \in O\big(\|\alpha - x^{(k)}\|^2\big).$$
■

Metoda sekante u $\mathbb{R}^n$

Metodu sekante dobivamo iz Newtonove metode, slično kao u jednoj dimenziji.

Izaberemo dvije početne točke $x^{(0)}$ i $x^{(1)}$.

U točki $x^{(k)}$, za $k \geq 1$, sve parcijalne derivacije u Jacobijevoj matrici $J_f(x^{(k)})$,

- aproksimiramo pripadnim podijeljenim razlikama kroz zadnje dvije aproksimacije $x^{(k)}$ i $x^{(k-1)}$.

Dobivamo "sekantnu" matricu

$$\big[\, S_f(x^{(k)}) \,\big]_{ij} = \frac{f_i(x^{(k)}) - f_i(x^{(k-1)})}{x_j^{(k)} - x_j^{(k-1)}}, \quad i, j = 1, \ldots, n.$$

Dalje postupamo isto kao u Newtonovoj metodi.

Metoda sekante u $\mathbb{R}^n$

Ako je $S_f(x^{(k)})$ regularna matrica, onda je pripadna korekcija

$$d^{(k)} := x^{(k+1)} - x^{(k)}$$

jedinstveno rješenje linearnog sustava jednadžbi

$$S_f(x^{(k)})\, d^{(k)} = -f(x^{(k)}).$$

Odavde izlazi standardni zapis za iteracije u metodi sekante

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \left[S_f(x^{(k)})\right]^{-1} f(x^{(k)}), \quad k = 1, 2, \ldots .$$

Napomena. Korektnija oznaka za matricu je $S_f(x^{(k)}, x^{(k-1)})$, tako da se vidi ovisnost o zadnje dvije aproksimacije.

Za metodu sekante u $\mathbb{R}^n$ vrijede slični rezultati kao u $\mathbb{R}$.

Uvod u optimizaciju bez ograničenja

Formulacija problema optimizacije

Zadana je funkcija
$$f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}.$$

Opet, radi jednostavnosti, pretpostavljamo da je f definirana na cijelom prostoru $\mathbb{R}^n$.

Tražimo (jednu ili sve) točke $x^* \in \mathbb{R}^n$ za koje je
$$f(x^*) = \min f(x), \quad \text{ili} \quad x^* = \arg\min f(x).$$

Takve točke x^* zovu se točke minimuma funkcije f.

Problem maksimizacije ili traženja točaka maksimuma za funkciju f

- ekvivalentan je minimizaciji funkcije $g = -f$.

Zato se često kaže: "optimizacija" = "minimizacija".

Vrste problema optimizacije

Ovisno o tome za koje x vrijedi ranija relacija, razlikujemo

- točke lokalnog minimuma — relacija vrijedi za sve x iz neke okoline od x^*,
- točke globalnog minimuma — relacija vrijedi za sve x iz domene (kod nas je to cijeli $\mathbb{R}^n$).

Ovaj problem — bez restrikcija u domeni, zove se optimizacija bez ograničenja. Ako minimum tražimo na nekom podskupu $D \subset \mathbb{R}^n$, dobivamo problem optimizacije s ograničenjima.

Napomena. Većina numeričkih metoda za optimizaciju, nalazi (ili garantira) samo točke lokalnog minimuma.

Globalnost ili jedinstvenost se dobiva iz dodatnih svojstava funkcije f — na primjer, konveksnost od f (plus još ponešto).

Metode za optimizaciju bez ograničenja

Uočite da je kodomena funkcije f skup $\mathbb{R}$.

- Zato ovdje smijemo uspoređivati funkcijske vrijednosti.

Metode za rješavanje problema optimizacije (bez ograničenja), ugrubo, dijelimo po tome koje informacije o funkciji f koriste (glatkoća).

- Metode direktnog pretraživanja koriste samo funkcijske vrijednosti za f.
- Metode silaska koriste i derivacije (gradijente) funkcije f, ili neke aproksimacije za njih.
- Metode Newtonovog tipa koriste i druge derivacije (Hesseovu matricu) od f, ili neke aproksimacije za njih.