

ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ

Σχολή Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και Φυσικών Επιστημών

Επίλυση μη γραμμικών συστημάτων με
τη μέθοδο Newton-Raphson και
εφαρμογές στη Βελτιστοποίηση

Διπλωματική εργασία
της
Χόρτη Δανάης

Επιβλέπων : Κ. Χρυσάφινος

ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

Κεφάλαιο 0	4
0.1.Εισαγωγή.....	4
0.2.Επισκόπηση της εργασίας.....	5
Κεφάλαιο 1 ‘Εισαγωγή’.....	6
1.1. Μη γραμμικές εξισώσεις.....	6
1.2. Τάξη (ταχύτητα) σύγκλισης.....	7
1.3. Επαναληπτική μέθοδος Newton-Raphson.....	8
1.4. Η μεθοδος της τέμνουσας.....	17
1.5. Η μεθοδος Muller.....	18
1.6. Επαναληπτική μεθοδος του σταθερού σημείου.....	18
Κεφάλαιο 2.....	21
2.1. Μη γραμμικές εξισώσεις.....	21
2.2. Τύποι σύγκλισης.....	23
2.3. Επανάληψη σταθερού σημείου.....	24
2.4. Οι βασικές υποθέσεις.....	26
Κεφάλαιο 3 ‘Η μέθοδος Newton’.....	30
3.1. Τοπική σύγκλιση της μεθόδου Newton.....	30
3.2. Τερματισμός των επαναλήψεων.....	32
3.3. Η αλγοριθμική μορφοποίηση της μεθόδου Newton.....	34
3.4. Σφάλματα στη συνάρτηση και στην παράγωγο.....	36
3.5. Η μέθοδος της χορδής.....	37
3.6. Προσεγγίσεις του αντιστρόφου F'	39
3.7. Προσεγγιστικές διαφορές στον F'	40
3.8. Το θεώρημα Kantorovich.....	44
3.9. Παραδείγματα στο Matlab.....	46
Κεφάλαιο 4 ‘Βελτιστοποίηση’.....	47
4.1. Το πρόβλημα.....	47
4.2. Σημειογραφία.....	48
4.3. Απαραίτητες υποθέσεις	50
4.4. Επαρκείς υποθέσεις.....	51
4.5. Τετραγωνικής μορφής συναρτήσεις.....	52

Κεφάλαιο 5 ‘Τοπική σύγκλιση της μεθόδου Newton’.....	57
5.1. Οι βασικές υποθέσεις	57
5.2. Η μέθοδος Newton.....	58
5.3. Σφάλματα στη συνάρτηση, στην κλίση και στον Εσσιανό πίνακα.....	62
5.4. Τερματισμός των επαναλήψεων.....	68
 Βιβλιογραφία.....	 70

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 0

0.1 Πρόλογος

Ένας μεγάλος κλάδος των Εφαρμοσμένων Μαθηματικών είναι η αριθμητική ανάλυση. Η αριθμητική ανάλυση ασχολείται με το σχεδιασμό, την κατασκευή και τη μελέτη μεθόδων για την προσέγγιση, με ικανοποιητικό τρόπο, των λύσεων προβλημάτων τα οποία μπορούν να εκφραστούν με μαθηματικά μοντέλα. Στην αριθμητική ανάλυση κατασκευάζουμε, αναλύουμε και μελετάμε προσεγγιστικές μεθόδους οι οποίες τελικά βασίζονται μόνο στις τέσσερις πράξεις της αριθμητικής.

Για τα μη γραμμικά συστήματα δεν μπορούμε να γνωρίζουμε τις ακριβείς λύσεις των περισσοτέρων εξισώσεων. Η μόνη λύση είναι να βρούμε προσεγγίσεις των παραπάνω λύσεων. Η ικανότητα μιας αριθμητικής μεθόδου εξαρτάται από την ευκολία με την οποία μπορεί να εφαρμοστεί, από την ακρίβειά της και από το υπολογιστικό κόστος που μπορεί να έχει. Σκοπός της αριθμητικής ανάλυσης είναι η επινόηση, η διερεύνηση και η προσαρμογή προσεγγιστικών μεθόδων για την επίλυση προβλημάτων συμπεριλαμβανομένου και την επίλυση μη γραμμικών συστημάτων.

Για την προσέγγιση των λύσεων χρησιμοποιούμε επαναληπτικές μεθόδους. Σε αρκετές περιπτώσεις για την εύρεση μιας προσεγγιστικής λύσης ενός μη γραμμικού συστήματος χρησιμοποιούνται παραπάνω από μια επαναληπτικές μέθοδοι. Συχνά είναι μια καλή πρακτική να αρχίσουμε τις επαναλήψεις με μια μέθοδο που εντοπίζει περίπου τη ρίζα και μετά να εφαρμόσουμε μια ταχύτερη μέθοδο για μεγαλύτερη ακρίβεια. Η ταχύτερη μέθοδος που αναφέρθηκε παραπάνω είναι στην πλειοψηφία των περιπτώσεων η μέθοδος Newton-Raphson. Το πλεονέκτημα της μεθόδου αυτής είναι η ταχύτητα σύγκλισης, η οποία είναι μεγαλύτερη σε σχέση με τις άλλες μεθόδους και κατά συνέπεια μας δίνει το επιθυμητό αποτέλεσμα, δηλαδή λύση με μεγαλύτερη προσέγγιση.

Μεγαλύτερο ενδιαφέρον στους τομείς των Μαθηματικών και της Φυσικής παρουσιάζεται στα μη γραμμικά συστήματα γιατί τα περισσότερα συστήματα στη φύση είναι μη γραμμικά. Π.χ. Τέτοια συστήματα προκύπτουν από τις μερικές διαφορικές εξισώσεις που περιγράφουν τα καιρικά φαινόμενα. Για τη διακριτοποίηση αυτών των μοντέλων (με τη μέθοδο των πεπερασμένων στοιχείων) χρειάζεται να λύσουμε συστήματα μεγάλων διαστάσεων μη γραμμικών εξισώσεων.

0.2 Επισκόπηση της εργασίας

Το πρώτο κεφάλαιο πραγματεύεται τις μη γραμμικές εξισώσεις στο χώρο των πραγματικών αριθμών. Ορίζουμε τις επαναληπτικές μεθόδους και την τάξη σύγκλισης. Περιγράφουμε την επαναληπτική μέθοδο Newton-Raphson και παραθέτουμε κάποιες παρατηρήσεις πάνω στη μέθοδο αυτή. Στη συνέχεια διατυπώνουμε και αποδεικνύουμε δυο θεμελιώδη θεωρήματα και το κεφάλαιο ολοκληρώνεται με την αναφορά στις επαναληπτικές μεθόδους της τέμνουσας, της Muller και του σταθερού σημείου.

Στο δεύτερο κεφάλαιο κάνουμε μια εισαγωγή στις μη γραμμικές εξισώσεις στο χώρο των πραγματικών αριθμών N τάξης. Ακολουθούν οι τύποι σύγκλισης και η επανάληψη σταθερού σημείου. Δίνονται οι βασικές υποθέσεις, το λήμμα του Banach και κάποια θεωρήματα για τους προσεγγιστικούς ανάστροφους πίνακες.

Το τρίτο κεφάλαιο πραγματεύεται την τοπική σύγκλιση της μεθόδου Newton και παραθέτουμε το βασικό θεώρημα τοπικής σύγκλισης και το θεώρημα σύγκλισης επαναληπτικής διαδικασίας. Στη συνέχεια δίνονται κάποια κριτήρια για τον τερματισμό των επαναλήψεων, περιγράφεται η αλγοριθμική μορφοποίηση της μεθόδου Newton και διατυπώνουμε ένα θεώρημα σχετικά με τα σφάλματα στη συνάρτηση και στην παράγωγο. Ακολουθεί η περιγραφή της μεθόδου της χορδής, ένα θεώρημα για τις προσεγγίσεις του αντιστρόφου F' και γίνεται μια συζήτηση για τις προσεγγιστικές διαφορές στον F' . Το κεφάλαιο κλείνει με το θεώρημα Kantorovich για τη μέθοδο της χορδής και για τη μέθοδο Newton.

Στο τέταρτο κεφάλαιο ορίζεται το πρόβλημα της βελτιστοποίησης, δίνονται κάποιοι ορισμοί και διατυπώνονται δυο βασικά θεωρήματα βελτιστοποίησης. Ακολουθούν οι βασικές υποθέσεις που καθιστούν ένα σημείο το βέλτιστο σημείο του προβλήματος και οι επαρκείς υποθέσεις για βελτιστοποίηση. Ορίζουμε τις συναρτήσεις τετραγωνικής μορφής, κάνουμε συζήτηση για τον θετικά ορισμένο Εσσιανό πίνακα και το κεφάλαιο ολοκληρώνεται με μια αναφορά στον μη ορισμένο Εσσιανό πίνακα.

Στο πέμπτο και τελευταίο κεφάλαιο της εργασίας συζητάμε για την τοπική σύγκλιση της μεθόδου Newton. Εξετάζουμε τι συμβαίνει όταν έχουμε σφάλματα στη συνάρτηση, στην κλίση και στον Εσσιανό πίνακα και διατυπώνουμε τις βασικές υποθέσεις σύγκλισης και το θεώρημα τετραγωνικής σύγκλισης. Το κεφάλαιο κλείνει με τα κριτήρια για τον τερματισμό των επαναλήψεων.

Στον φάκελο 'nr' παρουσιάζουμε τη μέθοδο Newton-Raphson με δυο διαφορετικούς κώδικες. Ο κώδικας nr εφαρμόζει τον επαναληπτικό τύπο της μεθόδου και ο κώδικας newtonsys χρησιμοποιεί την lu παραγοντοποίηση, τη μέθοδο των προς τα εμπρός διαφορών και τη μέθοδο των προς τα πίσω διαφορών.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1

1.1 Μη γραμμικές εξισώσεις

Εισαγωγή

Η εύρεση λύσης για την εξίσωση

$$f(x)=0, \quad f: R \rightarrow R$$

είναι ένα από τα πιο συνηθισμένα προβλήματα στο πεδίο των εφαρμοσμένων μαθηματικών. Το πρόβλημα αυτό προκύπτει συχνά και κατά φυσικό τρόπο από τη μελέτη ενός μεγάλου αριθμού πρακτικών προβλημάτων. Το πρόβλημα μπορεί να περιλαμβάνει ένα σύστημα μη γραμμικών εξισώσεων με πολλές μεταβλητές ή (όπως παραπάνω) μια μη γραμμική εξίσωση μιας μόνο μεταβλητής. Στις περισσότερες περιπτώσεις η παραπάνω εξίσωση, όπου η f είναι μη γραμμική, δεν μπορεί να λυθεί με ακρίβεια, δηλαδή αναλυτικά. Ακόμα και όταν δίνεται η λύση σε κλειστή μορφή ενός ειδικού τύπου, ο τύπος αυτός απαιτεί πολλές φορές περισσότερο χρόνο για τον υπολογισμό του από γενικότερες αριθμητικές μεθόδους. Δηλαδή συχνά είναι πιο εύκολο να καταλήγουμε σε μια προσεγγιστική λύση, ακόμα και όταν είναι διαθέσιμη μια αναλυτική έκφραση για τη λύση.

Μια γενική κατηγορία μεθόδων που προσεγγίζουν ρίζες μη γραμμικών εξισώσεων είναι επαναληπτικές μέθοδοι. Οι προσεγγιστικές λύσεις είναι της μορφής $x_{k+1} = g(x_k)$ όπου η ακολουθία $\{x_k\}_{k=1}^{\infty}$ συγκλίνει, με κατάλληλες υποθέσεις, σε μια ρίζα της εξίσωσης $f(x)=0$. Η ταχύτητα της σύγκλισης εξαρτάται από τις ιδιότητες της συνάρτησης και από τη μέθοδο που χρησιμοποιούμε. Μια καλή πρακτική για την ακριβέστερη προσέγγιση κάποιας ρίζας είναι η εφαρμογή μιας μεθόδου που θα "εντοπίζει" περίπου τη ρίζα και στη συνέχεια η εφαρμογή μιας ταχύτερης μεθόδου για μεγαλύτερη ακρίβεια. Η τιμή του x ονομάζεται **λύση ή ρίζα** της εξίσωσης και μπορεί να είναι μια από πολλές λύσεις.

1.2 Τάξη (ταχύτητα) σύγκλισης

Η πλειοψηφία των μη γραμμικών εξισώσεων $f(x) = 0$ δεν μπορεί να επιλυθεί σε ένα πεπερασμένο αριθμό βημάτων. Έτσι, είμαστε αναγκασμένοι να καταφύγουμε σε μια επαναληπτική διαδικασία η οποία υπολογίζει μια ακολουθία προσεγγίσεων της λύσης και σταματάμε τη διαδικασία αυτή όταν το αποτέλεσμα είναι επαρκώς ακριβές.

Το ολικό κόστος υπολογισμού της ρίζας εξαρτάται από το κόστος σε κάθε επανάληψη και από το πλήθος των επαναλήψεων που απαιτούνται για τη σύγκλιση.

Η έννοια της τάξης σύγκλισης μιας μεθόδου είναι αναγκαία για τη σύγκριση της αποτελεσματικότητας των επαναληπτικών μεθόδων.

Το σφάλμα στην k -επανάληψη δίνεται από τη σχέση:

$$e_k = x_k - x^*$$

όπου x_k είναι η προσέγγιση στην k -επανάληψη και x^* η ακριβής τιμή της ρίζας.

Μερικές μέθοδοι σε προβλήματα μιας διάστασης δεν υπολογίζουν μια συγκεκριμένη προσεγγιστική λύση x_k αλλά ένα διάστημα το οποίο περιέχει τη λύση. Το διάστημα συνεχώς ελαττώνεται με την πρόοδο των επαναλήψεων. Θεωρούμε το e_k σαν το μήκος του διαστήματος στην k -επανάληψη.

Η μέθοδος συγκλίνει με τάξη σύγκλισης r αν ισχύει:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{|e_{k+1}|}{|e_k|^r} = c$$

όπου c είναι μια μη μηδενική σταθερά.

Μερικές ειδικές περιπτώσεις είναι:

- αν $r = 1$ και $c < 1$ η τάξη σύγκλισης είναι γραμμική
- αν $r > 1$ η τάξη σύγκλισης είναι υπεργραμμική
- αν $r = 2$ η τάξη σύγκλισης είναι τετραγωνική

1.3 Επαναληπτική μέθοδος Newton-Raphson

Η μέθοδος Newton-Raphson είναι μια από τις πιο γνωστές και εύχρηστες επαναληπτικές μεθόδους για την προσέγγιση μιας ρίζας της μη γραμμικής εξίσωσης $f(x) = 0$. Χρησιμοποιείται και για την επίλυση άλλων πιο δύσκολων μη γραμμικών προβλημάτων όπως για παράδειγμα συστήματα μη γραμμικών εξισώσεων και μη γραμμικών ολοκληρωτικών και διαφορικών εξισώσεων. Δεν είναι πάντα η καλύτερη μέθοδος για τη λύση ενός προβλήματος αλλά η μέθοδος αυτή ξεχωρίζει επειδή έχει ταχύτερη σύγκλιση σε σχέση με άλλες μεθόδους και αυτό έχει σαν αποτέλεσμα να προκύπτουν περισσότερο ακριβείς προσεγγίσεις της λύσης σε κάθε επανάληψη. Επίσης, η μέθοδος αυτή είναι μια ειδική περίπτωση της μεθόδου του σταθερού σημείου.

• Κατασκευή της μεθόδου

(A) Γεωμετρική κατασκευή:

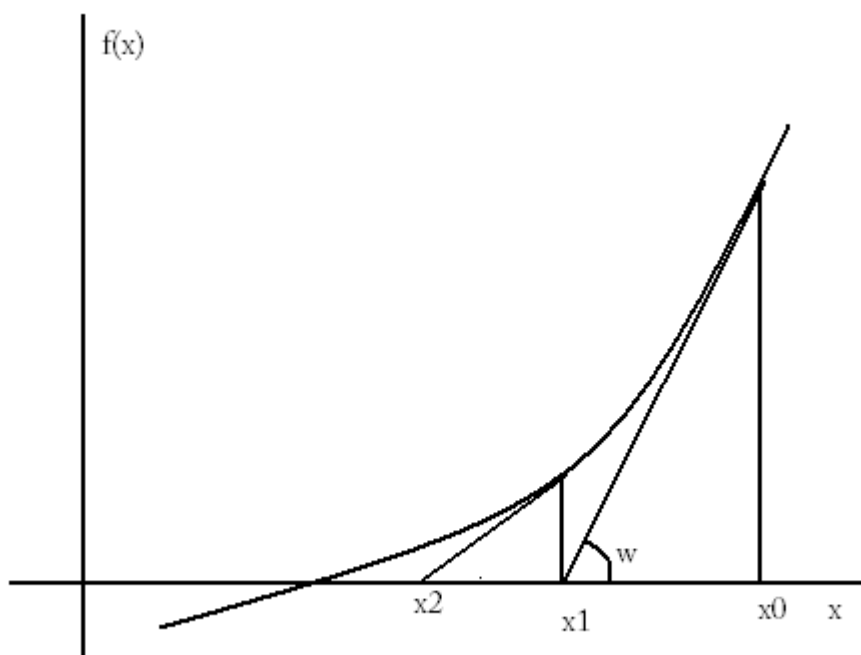
Ο πιο κοινός τρόπος κατασκευής βασίζεται στη γεωμετρία. Ας υποθέσουμε ότι έχουμε μια αρχική προσέγγιση x_0 για την εύρεση της ρίζας της εξίσωσης

$$f(x) = 0, \quad f : [a, b] \rightarrow R \quad (1.5)$$

Η μέθοδος Newton-Raphson παράγει επαναληπτικά προσεγγίσεις, ή αλλιώς μία ακολουθία προσεγγίσεων,

$$\{x_n : n \geq 1\} \quad (1.6)$$

η οποία κάτω από κατάλληλες προϋποθέσεις θα συγκλίνει στην επιθυμητή ρίζα x^* . Βασική προϋπόθεση είναι η αρχική προσέγγιση x_0 να είναι κοντά στη ρίζα x^* . Φέρνω την εφαπτόμενη του σημείου $(x_0, f(x_0))$ στην καμπύλη της $y = f(x)$ βρίσκουμε μια νέα προσέγγιση x_1 η οποία υπολογίζεται ως σημείο τομής της εφαπτόμενης με τον άξονα Ox . Παρατηρούμε ότι βασική υπόθεση είναι να η παράγωγος συνάρτηση να μη μηδενίζεται στα σημεία των επαναλήψεων. Ακολουθούμε την ίδια διαδικασία για κάθε προσέγγιση που βρίσκουμε για να καταλήξουμε τελικά στην επιθυμητή ρίζα της εξίσωσης (1.5) Με βάση την παραπάνω διαδικασία προκύπτει το παρακάτω σχήμα:



Γράφημα 1.1

$$\tan w = \frac{f(x_0)}{x_0 - x_1} \Rightarrow f'(x_0) = \frac{f(x_0)}{x_0 - x_1} \Rightarrow x_1 = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)}$$

Γενικά, αν x_{n-1} είναι μια ενδιαμέση προσέγγιση, τότε η επόμενη προσέγγιση θα δίνεται από τον παρακάτω επαναληπτικό τύπο:

$$x_n = x_{n-1} - \frac{f(x_{n-1})}{f'(x_{n-1})}, \quad x_0 \text{ δοθέν και } n=1,2,\dots \quad (1.7)$$

Παρατηρούμε από την (1.7), πως η επαναληπτική διαδικασία ορίζεται μόνο όταν η παράγωγος δεν μηδενίζεται σε μία περιοχή γύρω από την ρίζα της εξίσωσης (1.5). Δηλαδή, από την κατασκευή συμπεραίνουμε πως η Newton-Raphson είναι μία τοπική διαδικασία.

Σημείωση: Βασική προϋπόθεση είναι η παράγωγος στη ρίζα να είναι διάφορη του μηδενός. Αυτό θέλουμε να ισχύει διότι από τη συνέχεια της f' προκύπτει ότι η $f'(x)$ θα είναι διάφορη του μηδενός σε μια περιοχή της ρίζας x^* και κατά συνέπεια θα μπορούμε να εφαρμόσουμε τον τύπο της μεθόδου χωρίς να προκύψει το πρόβλημα του μηδενισμού του παρονομαστή.

(B) Αναλυτική κατασκευή:

Για την αναλυτική κατασκευή της μεθόδου Newton-Raphson χρησιμοποιούμε το πολυώνυμο Taylor. Έστω η συνάρτηση $f \in C^2[a, b]$ και έστω $\bar{x} \in [a, b]$ μια προσέγγιση της ρίζας x^* τέτοια ώστε $f'(\bar{x}) \neq 0$ και $\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{|e_{k+1}|}{|e_k|^r} = c |\bar{x} - x^*|$ να είναι «μικρό».

Θεωρώ το πολυώνυμο Taylor πρώτου βαθμού για την $f(x)$ γύρω από το \bar{x} :

$$f(x) = f(\bar{x}) + (x - \bar{x})f'(\bar{x}) + \frac{(x - \bar{x})^2}{2} f''(\xi) \quad (1.8)$$

όπου το ξ βρίσκεται ανάμεσα στο x και στο \bar{x} .

Ισχύει ότι $f(x^*) = 0$ και για $x = x^*$ η σχέση (1) γράφεται:

$$0 = f(\bar{x}) + (x^* - \bar{x})f'(\bar{x}) + \frac{(x^* - \bar{x})^2}{2} f''(\xi) \quad (1.9)$$

Θεωρώ τον όρο $(x^* - \bar{x})^2$ αρκετά μικρό οπότε μπορούμε να γράψουμε τη σχέση:

$$0 \approx f(\bar{x}) + (x^* - \bar{x})f'(\bar{x})$$

Και λύνοντας ως προς x^* προκύπτει ότι:

$$x^* \approx \bar{x} - \frac{f(\bar{x})}{f'(\bar{x})}$$

Αν x_{n-1} είναι μια προσέγγιση της ρίζας x^* , η νέα προσέγγιση προκύπτει από τον επαναληπτικό τύπο:

$$x_n = x_{n-1} - \frac{f(x_{n-1})}{f'(x_{n-1})}, \quad n \geq 1$$

η οποία κάτω από ορισμένες προϋποθέσεις είναι καλύτερη από την x_{n-1} .

➤ Παρατηρήσεις

- I. Η βασική δυσκολία της μεθόδου Newton-Raphson είναι η εύρεση της αρχικής προσέγγισης x_0 ώστε να βρίσκεται σε μια περιοχή $[x^* - \delta, x^* + \delta]$. Αν το x_0 είναι εκτός της περιοχής αυτής τότε οι διαδοχικές προσεγγίσεις της μεθόδου απομακρύνονται συνεχώς από το x^* και κατά συνέπεια η ρίζα δεν μπορεί να προσεγγισθεί.
- II. Ο υπολογισμός της αρχικής προσέγγισης μπορεί να γίνει γραφικά. Μετασχηματίζουμε την εξίσωση $f(x) = 0$ στην ισότητα $f_1(x) = f_2(x)$. Κατασκευάζουμε τις γραφικές παραστάσεις των συναρτήσεων f_1 και f_2 και αν τέμνονται τότε η εξίσωση έχει ρίζες πραγματικές οι οποίες προσεγγίζονται από τις προβολές των τομών στον άξονα Ox .
- III. Επίσης, ένας άλλος τρόπος για τον υπολογισμό της αρχικής προσέγγισης είναι πριν εφαρμοστεί η μέθοδος Newton-Raphson να υπολογίσουμε προσεγγίσεις της ρίζας με κάποιον αλγόριθμο ο οποίος συγκλίνει για κάθε αρχική προσέγγιση.
- IV. Το συμπέρασμα είναι ότι η μέθοδος Newton-Raphson συχνά χρησιμοποιείται στην πράξη σαν μια τελική διαδικασία τερματισμού ενός άλλου, πιο αργού αλλά πιο ασφαλούς αλγορίθμου.
- V. Η τάξη σύγκλισης της μεθόδου Newton-Raphson είναι τετραγωνική.
- VI. Η κύρια σημασία της μεθόδου Newton-Raphson είναι ότι μπορεί να εφαρμοστεί και για την εύρεση μιγαδικών ριζών αναλυτικών συναρτήσεων f και επίσης ότι μπορεί να επεκταθεί για την επίλυση συστημάτων μη γραμμικών εξισώσεων.

ΘΕΩΡΗΜΑ 1.3.1

Έστω οι συναρτήσεις $f(x), f'(x), f''(x)$ συνεχείς $\forall x$ σε μια περιοχή της ρίζας x^* και $f(x^*)=0, f'(x^*) \neq 0$. Εάν το x_0 είναι κοντά στη ρίζα x^* η ακολουθία των προσεγγίσεων της ρίζας $\{x_n\}$, $n \geq 0$ θα συγκλίνει στο x^* . Επίσης θα ισχύει:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{x^* - x_{n+1}}{(x^* - x_n)^2} = -\frac{f''(x^*)}{2f'(x^*)} \quad (1.10)$$

ΑΠΟΔΕΙΞΗ

Έστω το διάστημα $I = [x^* - \varepsilon, x^* + \varepsilon]$ στο οποίο η $f'(x) \neq 0$ (αυτό ισχύει λόγω της συνέχειας της $f'(x)$ και $f'(x^*) \neq 0$)

Ορίζω

$$M = \frac{\text{Max}_{x \in I} |f''(x)|}{2 \text{Min}_{x \in I} |f'(x)|},$$

το οποίο δείχνει πόσο αργά ή γρήγορα θα συγκλίνει η μέθοδος.

Είναι

$$\begin{aligned} x^* - x_{n+1} &= x^* - \left(x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}\right) \\ &= x^* - x_n + \frac{f(x_n)}{f'(x_n)} \end{aligned} \quad (i)$$

Εφαρμόζουμε το θεώρημα Taylor και έχουμε:

$$f(x_n) = f(x^*) + (x_n - x^*)f'(x^*) + \frac{(x_n - x^*)^2}{2} f''(\xi_{n1}) \quad (ii)$$

Εφαρμόζουμε το θεώρημα Taylor πρώτης τάξης για την f' και έχουμε:

$$f'(x_n) = f'(x^*) + (x_n - x^*)f''(\xi_{n2}) \quad (iii)$$

Εφαρμόζω τη (iii) στη (ii) και είναι:

$$\begin{aligned} f(x_n) &= (x_n - x^*) \left\{ f'(x_n) - (x_n - x^*)f''(\xi_{n2}) \right\} + \frac{(x_n - x^*)^2}{2} f''(\xi_{n1}) \\ &= (x_n - x^*)f'(x_n) - (x_n - x^*)^2 f''(\xi_{n2}) + \frac{(x_n - x^*)^2}{2} f''(\xi_{n1}) \end{aligned}$$

$$\frac{f(x_n)}{f'(x_n)} = (x_n - x^*) - (x_n - x^*)^2 \frac{f''(\xi_{n2})}{f'(x_n)} + \frac{(x_n - x^*)^2}{2} \frac{f''(\xi_{n1})}{f'(x_n)}$$

Άρα η (i) γίνεται:

$$\begin{aligned}x^* - x_{n+1} &= -(x_n - x^*)^2 \frac{1}{f'(x_n)} \{f''(\xi_{n2}) + f''(\xi_{n1})\} \\ &= -(x_n - x^*)^2 \frac{1}{f'(x_n)} f''(\xi_n)\end{aligned}$$

Από την εξίσωση $x^* - x_{n+1} = -(x^* - x_n)^2 \frac{f''(\xi_n)}{2f'(x_n)}$, $n \geq 0$ ισχύει ότι:

$$M|x^* - x_1| \leq (M|x^* - x_0|)^2$$

Διαλέγω $|x^* - x_0| \leq \varepsilon$ και $M|x^* - x_0| < 1$. Τότε $M|x^* - x_1| < 1$ και $M|x^* - x_1| \leq M|x^* - x_0|$ από το οποίο προκύπτει ότι $|x^* - x_1| \leq \varepsilon$.

Για να φανεί η σύγκλιση χρησιμοποιώ την $x^* - x_{n+1} = -(x^* - x_n)^2 \frac{f''(\xi_n)}{2f'(x_n)}$, $n \geq 0$ και προκύπτει ότι:

$$\begin{aligned}|x^* - x_{n+1}| &\leq M|x^* - x_n|^2 \\ M|x^* - x_{n+1}| &\leq (M|x^* - x_n|)^2\end{aligned}\tag{1.11}$$

και επαγωγικά

$$\begin{aligned}M|x^* - x_n| &\leq (M|x^* - x_0|)^{2^n} \\ |x^* - x_n| &\leq \frac{1}{M}(M|x^* - x_0|)^{2^n}\end{aligned}\tag{1.12}$$

Επειδή $M|x^* - x_0| < 1$ ισχύει ότι $x_n \rightarrow x^*$ καθώς $n \rightarrow \infty$.

Στην εξίσωση $x^* - x_{n+1} = -(x^* - x_n)^2 \frac{f''(\xi_n)}{2f'(x_n)}$, $n \geq 0$ το άγνωστο σημείο ξ_n είναι μεταξύ του x_n και του x^* , δηλ. $\xi_n \rightarrow x^*$ καθώς $n \rightarrow \infty$.

Έτσι:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{x^* - x_{n+1}}{(x^* - x_n)^2} = -\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{f''(\xi_n)}{2f'(x_n)} = \frac{-f''(x^*)}{2f'(x^*)} \quad \square$$

Μια άλλη προσέγγιση για την ανάλυση του σφάλματος της μεθόδου Newton-Raphson δίνεται από την παρακάτω κατασκευή και το παρακάτω θεώρημα (θεώρημα 1.3.2).

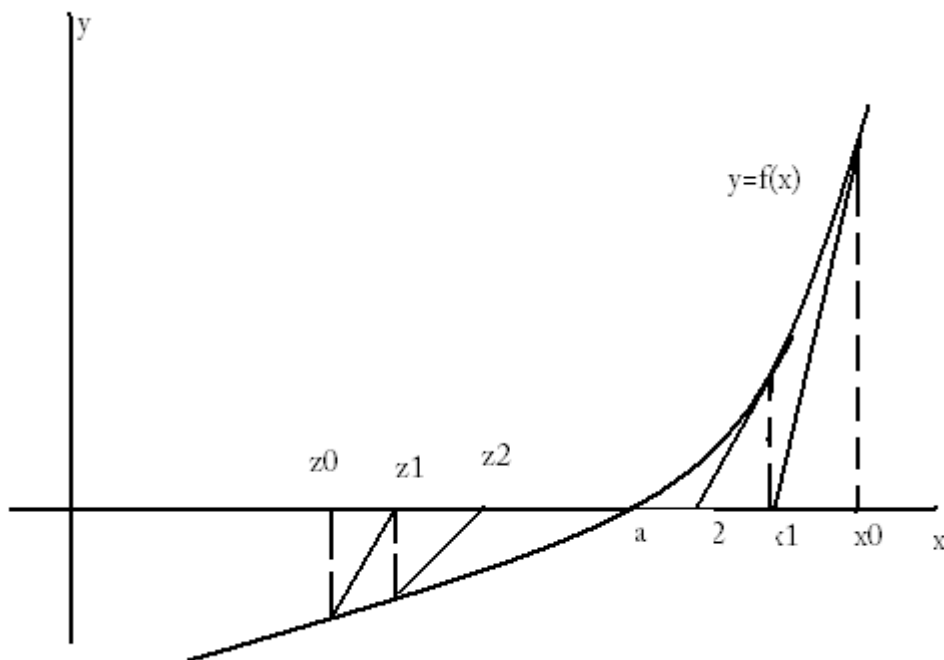
Έστω $f(x)$ συνεχής και διπλά παραγωγίσιμη στο διάστημα $[a,b]$ στο οποίο περιέχεται η ρίζα x^* . Επίσης, έστω $f(a) < 0, f(b) > 0$ και $f'(x) > 0, f''(x) > 0$ για $a \leq x \leq b$.

Τότε η $f(x)$ είναι γνησίως αύξουσα στο $[a,b]$ και έχει μοναδική ρίζα x^* στο διάστημα $[a,b]$. Επίσης, $f(x) < 0$ για $a \leq x \leq x^*$ και $f(x) > 0$ για $x^* \leq x \leq b$.

Για $x_0 = b$ βρίσκουμε τις προσεγγίσεις x_n της μεθόδου με βάση τον αναδρομικό τύπο $x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$. Στη συνέχεια βρίσκουμε μια νέα ακολουθία προσεγγίσεων με βάση τον παρακάτω αναδρομικό τύπο:

$$z_{n+1} = z_n - \frac{f(z_n)}{f'(x_n)}, \quad n \geq 0 \quad (1.13)$$

με $z_0 = a$. Οι προσεγγίσεις που προκύπτουν φαίνονται στο γράφημα 1.2. Με τη χρήση της ακολουθίας $\{z_n\}$ εξασφαλίζουμε ιδανικά άνω και κάτω όρια για τη ρίζα x^* . Η χρήση της (1.13) σε συνδυασμό με τη μέθοδο Newton-Raphson έχει σαν αποτέλεσμα τη **μέθοδο Newton-Fourier**.



Γράφημα 1.2 Η μέθοδος Newton-Fourier

ΘΕΩΡΗΜΑ 1.3.2

Έστω $f(x)$ διπλά συνεχής στο διάστημα $[a, b]$ και ισχύουν οι συνθήκες $f(a) < 0, f(b) > 0, f'(x) > 0, f''(x) > 0$. Τότε η ακολουθία των προσεγγίσεων $\{x_n\}$ είναι αυστηρώς φθίνουσα και συγκλίνει στο ρ και η ακολουθία $\{z_n\}$ είναι αυστηρώς αύξουσα και συγκλίνει στο x^* .

Επίσης

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{x_{n+1} - z_{n+1}}{(x_n - z_n)^2} = \frac{f''(x^*)}{2f'(x^*)} \quad (1.14)$$

μας δείχνει ότι η απόσταση μεταξύ των x_n και z_n μειώνεται **τετραγωνικά** με το n .

ΑΠΟΔΕΙΞΗ

Πρώτα θα δείξω ότι

$$z_0 < z_1 < x^* < x_1 < x_0 \quad (1.15)$$

Από τις σχέσεις

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}, \quad n \geq 0 \quad \text{και} \quad z_{n+1} = z_n - \frac{f(z_n)}{f'(z_n)}, \quad n \geq 0$$

προκύπτει ότι

$$x_1 - x_0 = \frac{-f(x_0)}{f'(x_0)} < 0 \quad \text{και} \quad z_1 - z_0 = \frac{-f(z_0)}{f'(z_0)} > 0$$

Από τον τύπο του σφάλματος προκύπτει ότι

$$x^* - x_1 = -(x^* - x_0)^2 \frac{f''(\xi_0)}{2f'(x_0)} < 0$$

Τελικά,

$$\begin{aligned} x^* - z_1 &= x^* - z_0 + \frac{f(z_0)}{f'(z_0)} = \\ &= x^* - z_0 + \frac{f(z_0) - f(x^*)}{f'(x_0)} = \\ &= x^* - z_0 - \frac{f'(\zeta_0)(x^* - z_0)}{f'(x_0)} \quad \text{για κάποιο } z_0 < \zeta_0 < x^* \end{aligned}$$

$$x^* = x^* - z_0 \left[\frac{f'(x_0) - f'(\zeta_0)}{f'(x_0)} \right] > 0$$

επειδή η $f'(x)$ είναι αύξουσα στο $[a, b]$. Με βάση όλα τα παραπάνω αποδεικνύεται ότι $z_0 < z_1 < x^* < x_1 < x_0$.

Η απόδειξη αυτή οδηγεί στο ότι ισχύει και

$$z_n < z_{n+1} < x^* < x_{n+1} < x_n, \quad n \geq 0 \quad (1.16)$$

Η ακολουθία $\{x_n\}$ είναι φραγμένη από το a οπότε έχει infimum το \bar{x} και η ακολουθία $\{z_n\}$ έχει supremum το \bar{z} . Δηλαδή:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} x_n = \bar{x} \geq x^* \quad \text{και} \quad \lim_{n \rightarrow \infty} z_n = \bar{z} \leq x^*$$

Βάζοντας όρια στις σχέσεις

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)} \quad \text{και} \quad z_{n+1} = z_n - \frac{f(z_n)}{f'(z_n)}$$

προκύπτει ότι

$$\bar{x} = \bar{x} - \frac{f(\bar{x})}{f'(\bar{x})} \quad \text{και} \quad \bar{z} = \bar{z} - \frac{f(\bar{z})}{f'(\bar{z})}$$

το οποίο οδηγεί στο $f(\bar{x}) = 0 = f(\bar{z})$.

Επειδή το x^* είναι η μοναδική ρίζα της εξίσωσης $f(x) = 0$ στο διάστημα $[a, b]$ αυτό αποδεικνύει ότι οι ακολουθίες $\{x_n\}$ και $\{z_n\}$ συγκλίνουν στο x^* .

Η ακολουθία $\{x_n\}$ συγκλίνει στο x^* τετραγωνικά. Το αποτέλεσμα

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{x_{n+1} - z_{n+1}}{(x_n - z_n)^2} = \frac{f''(x^*)}{2f'(x^*)}$$

δείχνει ότι

$$|x^* - x_n| \leq |z_n - x_n|$$

είναι ένα όριο σφάλματος το οποίο μειώνεται τετραγωνικά. \square

Αλγόριθμος Newton-Raphson σε Matlab

INPUT αρχική προσέγγιση b_0
φράγμα TOL
μέγιστος αριθμός επαναλήψεων N

OUTPUT προσέγγιση b ή ένα μήνυμα αποτυχίας

Βήμα 1: Θέσε $I=1$

Βήμα 2: Όταν $I \leq N$ εκτέλεσε τα βήματα 3-6

Βήμα 3: Θέσε $b = b_0 - \frac{f(b_0)}{f'(b_0)}$

Βήμα 4: Αν $|b - b_0| < \text{TOL}$ τότε η ζητούμενη προσέγγιση είναι b
(η διαδικασία τελείωσε με επιτυχία)

STOP

Βήμα 5: Θέσε $I=I+1$

Βήμα 6: Θέσε $b_0 = b$ (ανανέωση του b_0)

Βήμα 7: OUTPUT (η μέθοδος απέτυχε μετά από N επαναλήψεις)

STOP

1.4 Η μέθοδος της τέμνουσας

Στη μέθοδο της τέμνουσας χρησιμοποιούμε την ευθεία που ορίζουν δυο σημεία προσέγγισης x_0 και x_1 και ορίζουμε ως την επόμενη προσέγγιση x_2 το σημείο τομής της ευθείας αυτής με τον άξονα Ox. Σε αυτή την περίπτωση, έστω ότι x_0 και x_1 είναι δυο αρχικές προσεγγίσεις της ρίζας. Στο γράφημα της $y = f(x)$ η ευθεία της τέμνουσας προσεγγίζεται από τα σημεία $(x_0, f(x_0))$ και $(x_1, f(x_1))$. Έστω ότι η ρίζα που προκύπτει από αυτή την ευθεία είναι η x_2 . Χρησιμοποιώντας τον τύπο της κλίσης στη ευθεία της τέμνουσας έχουμε:

$$\frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0} = \frac{f(x_1) - 0}{x_1 - x_2}$$

και λύνοντας ως προς x_2

$$x_2 = x_1 - f(x_1) \cdot \frac{x_1 - x_0}{f(x_1) - f(x_0)}$$

Χρησιμοποιώντας τα x_1 και x_2 επαναλαμβάνουμε την παραπάνω διαδικασία για να βρούμε το x_3 κλπ.

Ο γενικός τύπος είναι:

$$x_{n+1} = x_n - f(x_n) \cdot \frac{x_n - x_{n-1}}{f(x_n) - f(x_{n-1})}, \quad n \geq 1 \quad (1.17)$$

Η παραπάνω μέθοδος είναι η **μέθοδος της τέμνουσας**

• Σύγκριση με τη μέθοδο Newton

Η μέθοδος Newton και η μέθοδος της τέμνουσας συνδέονται άμεσα. Αν χρησιμοποιήσουμε στη μέθοδο Newton την παρακάτω προσέγγιση

$$f[x_2, x_1] + (x - x_1)f[x_2, x_1, x_0]$$

τότε προκύπτει η μέθοδος της τέμνουσας. Οι υποθέσεις για σύγκλιση είναι σχεδόν ίδιες και οι εκτιμήσεις των σφαλμάτων αποδεικνύονται με παρόμοιο τρόπο. Παρόλα αυτά υπάρχουν δυο βασικές διαφορές. Η μέθοδος Newton απαιτεί τη γνώση των $f(x_n)$ και $f'(x_n)$ σε κάθε επανάληψη ενώ η μέθοδος της τέμνουσας απαιτεί τη γνώση μόνο της $f(x_n)$. Επίσης, η μέθοδος Newton έχει μεγαλύτερο κόστος επανάληψης σε σχέση με τη μέθοδο της τέμνουσας. Από την άλλη όμως η μέθοδος Newton συγκλίνει πιο γρήγορα και κατά συνέπεια απαιτούνται λιγότερες επαναλήψεις για να επιτύχουμε τη ζητούμενη ακρίβεια.

1.5 Η μέθοδος Muller

Η μέθοδος Muller προκύπτει από τη γενικοποίηση της προσέγγισης που οδήγησε στη μέθοδο της τέμνουσας. Με δεδομένα τα x_1, x_2, x_3 δημιουργείται ένα τετραγωνικό πολυώνυμο το οποίο έχει ρίζες αυτά τα τρία σημεία $(x_i, f(x_i)), i = 0, 1, 2$. Μια από τις ρίζες του πολυωνύμου χρησιμοποιείται για τη βελτίωση της προσέγγισης μιας ρίζας α της $f(x)$.

Το τετραγωνικό πολυώνυμο δίνεται από τον τύπο:

$$p(x) = f(x_2) + (x - x_2)f[x_2, x_1] + (x - x_1)f[x_2, x_1, x_0] \quad (1.18)$$

1.6 Επαναληπτική μέθοδος του σταθερού σημείου

Έστω η μη γραμμική εξίσωση:

$$f(x) = 0 \quad (1.19)$$

Στην παράγραφο αυτή θα παρουσιάσουμε μια γενική επαναληπτική μέθοδο επίλυσης της μη γραμμικής εξίσωσης.

Αν $g : R \rightarrow R$ είναι μια συνάρτηση, μια τιμή του x που ικανοποιεί τη σχέση:

$$x = g(x)$$

ονομάζεται σταθερό σημείο της συνάρτησης g επειδή το x δεν μεταβάλλεται όταν η g εφαρμόζεται σε αυτό.

Πολλοί επαναληπτικοί αλγόριθμοι για την επίλυση μη γραμμικών εξισώσεων ή συστημάτων βασίζονται σε επαναληπτικούς τύπους της μορφής:

$$x_{k+1} = g(x_k),$$

όπου g είναι μια κατάλληλα επιλεγμένη συνάρτηση της οποίας τα σταθερά σημεία είναι λύσεις της εξίσωσης (1.18). Ένα τέτοιο σχήμα ονομάζεται **μέθοδος του σταθερού σημείου** ή **γενική επαναληπτική μέθοδος**.

Για μια δεδομένη εξίσωση της μορφής (1.18) μπορεί να υπάρχουν περισσότερα από ένα ισοδύναμα προβλήματα σταθερού σημείου $x = g(x)$ με διαφορετικές επιλογές της συνάρτησης g . Όμως, όλες αυτές οι επιλογές δεν είναι εξίσου χρήσιμες για την κατασκευή του επαναληπτικού τύπου. Τα διάφορα επαναληπτικά σχήματα μπορούν να διαφέρουν όχι μόνο ως προς την τάξη (ταχύτητα) σύγκλισης αλλά και με το αν συγκλίνει ή όχι η επαναληπτική μέθοδος.

Γραφικά, ένα σταθερό σημείο προκύπτει από την τομή των γραφικών παραστάσεων των συναρτήσεων $y = g(x)$ και $y = x$.

• Ύπαρξη και μοναδικότητα σταθερού σημείου

Στο σημείο αυτό θα εξετάσουμε πότε μια συνάρτηση έχει ένα σταθερό σημείο και πώς τα σταθερά σημεία μπορούν να υπολογιστούν. Οι ικανές και αναγκαίες συνθήκες για την ύπαρξη και μοναδικότητα ενός σταθερού σημείου δίνονται από το παρακάτω θεώρημα.

ΘΕΩΡΗΜΑ 1.6.1

Έστω ότι η συνάρτηση $g \in C[a, b]$ και $g(x) \in [a, b]$ για κάθε $x \in [a, b]$. Τότε η g έχει ένα σταθερό σημείο στο $[a, b]$. Αν επί πλέον υπάρχει $g'(x)$ στο (a, b) και ισχύει:

$$|g'(x)| \leq k < 1, \forall x \in (a, b)$$

τότε η g έχει ένα μοναδικό σταθερό σημείο x^* στο $[a, b]$.

ΑΠΟΔΕΙΞΗ Βλέπε βιβλία [3,4]

• Προσέγγιση σταθερού σημείου

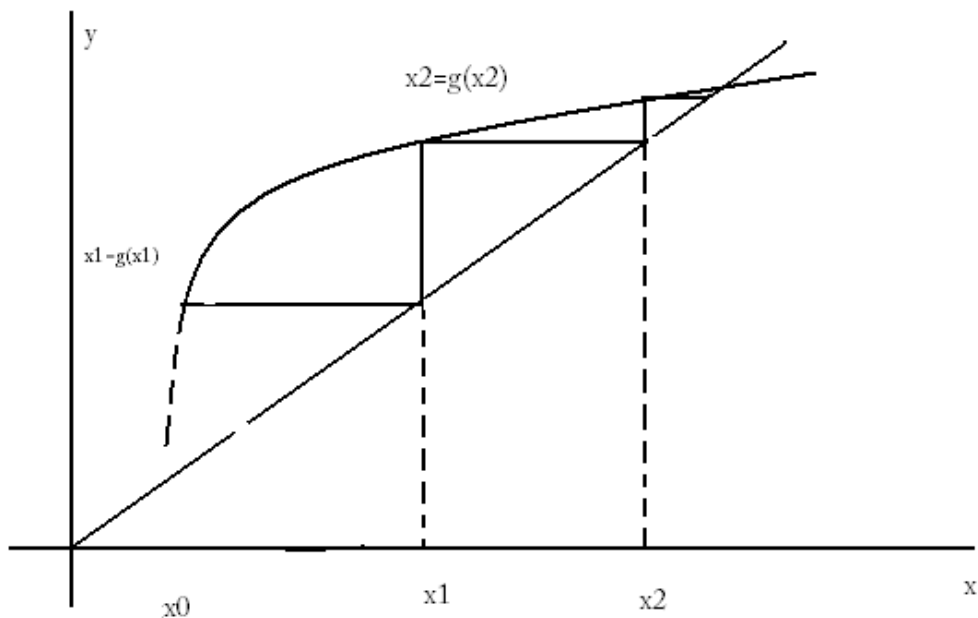
Για να προσεγγίσουμε το σταθερό σημείο x^* της συνάρτησης g επιλέγουμε μια αρχική προσέγγιση x_0 και κατασκευάζουμε μια ακολουθία προσεγγίσεων $\{x_n\}$, $n \in \mathbb{N}$ από τον επαναληπτικό τύπο:

$$x_n = g(x_{n-1}), \quad n \geq 1.$$

Αν η συνάρτηση g είναι συνεχής και η ακολουθία $\{x_n\}$ συγκλίνει στο x , τότε έχουμε:

$$x = \lim_{n \rightarrow +\infty} x_n = \lim_{n \rightarrow +\infty} g(x_{n-1}) = g(\lim_{n \rightarrow +\infty} x_{n-1}) = g(x)$$

και έτσι μια λύση της $x = g(x)$ και άρα μια ρίζα της $f(x) = 0$ μπορεί να υπολογιστεί. Η γεωμετρική ερμηνεία της μεθόδου φαίνεται στο παρακάτω σχήμα.



• Σύγκλιση

Η συμπεριφορά της επαναληπτικής μεθόδου του σταθερού σημείου ποικίλει ανάμεσα στην απόκλιση, την αργή σύγκλιση και την ταχεία σύγκλιση. Το ερώτημα είναι τι είναι αυτό που κάνει τη διαφορά. Ο απλούστερος τρόπος και όχι ο πιο γενικός για να χαρακτηρίσουμε τη συμπεριφορά της επαναληπτικής διαδικασίας για το πρόβλημα του σταθερού σημείου είναι να θεωρήσουμε την παράγωγο της συνάρτησης g στη λύση x^* , υποθέτοντας ότι η g είναι λεία. Το παρακάτω θεώρημα αφορά τη σύγκλιση της γενικής επαναληπτικής μεθόδου.

ΘΕΩΡΗΜΑ 1.6.2

Έστω ότι $g \in C[a, b]$ και $g(x) \in [a, b]$ για κάθε $x \in [a, b]$. Επί πλέον έστω ότι υπάρχει συνάρτηση $g'(x)$ στο διάστημα (a, b) και ισχύει:

$$|g'(x)| \leq k < 1, \forall x \in (a, b).$$

Αν x_0 μια οποιαδήποτε αρχική προσέγγιση του σταθερού σημείου της g στο $[a, b]$ τότε για την ακολουθία:

$$x_n = g(x_{n-1}), \quad n \geq 1$$

ισχύει

$$\lim_{n \rightarrow +\infty} |x_n - x| = 0$$

ΑΠΟΔΕΙΞΗ Βλέπε βιβλία []

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2

2.1 Μη γραμμικές εξισώσεις

Εισαγωγή

Προσπαθούμε να λύσουμε το πρόβλημα:

$$F(x) = 0 \quad (2.1)$$

όπου η F είναι $R^N \rightarrow R^N$. Συμβολίζουμε το i -οστό στοιχείο της F με f_i .

Ορισμός νόρμας 2.1.1 (Γενική νόρμα διανύσματος)

Έστω V ένας διανυσματικός χώρος πάνω στο R . Μια νόρμα $\|\cdot\|$ στο V είναι μια συνάρτηση με πεδίο ορισμού το V και τιμές στο R , με τις ακόλουθες ιδιότητες:

(α) $\|x\| \geq 0, x \in V$

(β) $\|x\| = 0$ αν και μόνο αν $x = 0$.

(γ) $\|\lambda x\| = |\lambda| \cdot \|x\|, \lambda \in R, x \in V$

(δ) $\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|, x, y \in V$ (Τριγωνική Ανισότητα)

Από τις (γ) και (δ) εύκολα προκύπτει και η ανισότητα:

(δ') $\| \|x\| - \|y\| \| \leq \|x - y\|, x, y \in V$ $c \|x\|_a \leq \|x\|_b \leq C \|x\|_a$

Ορισμός νόρμας 2.1.2 (Νόρμα πίνακα)

Έστω $M_n = R^{n \times n}$ ο διανυσματικός χώρος των πινάκων $n \times n$. Μια νόρμα στο M_n είναι μια συνάρτηση με πεδίο ορισμού το M_n και τιμές στο R , με τις ακόλουθες ιδιότητες:

(α) $\|A\| \geq 0, A \in M_n$

(β) $\|A\| = 0$ αν και μόνο αν $A = 0$

(γ) $\|\lambda A\| = |\lambda| \|A\|, \lambda \in R, A \in M_n$

(δ) $\|A + B\| \leq \|A\| + \|B\|, A, B \in M_n$

(ε) $\|A \cdot B\| \leq \|A\| \|B\|, A, B \in M_n$

ΘΕΩΡΗΜΑ 2.1.1

Έστω A ένας πίνακας $n \times n$. Οι ακόλουθες προτάσεις είναι ισοδύναμες:

1. $|A| \neq 0$, όπου $|A|$ είναι η ορίζουσα του A .

2. Το γραμμικό σύστημα $Ax = b$ έχει μια μοναδική λύση για κάθε δεύτερο μέλος b .
 3. Το ομογενές σύστημα $Ax = 0$ έχει μοναδική λύση $x = 0$.
 4. Ο πίνακας A έχει αντίστροφο A^{-1} .
- Ένας πίνακας A που ικανοποιεί τις παραπάνω προτάσεις καλείται **ομαλός**.

Πρόταση 2.1.1

Έστω $\|\cdot\|_a$ και $\|\cdot\|_b$ δυο νόρμες στον R^n . Τότε υπάρχουν σταθερές $c > 0$ και $C > 0$ τέτοιες ώστε:

$$c\|x\|_a \leq \|x\|_b \leq C\|x\|_a$$

δηλαδή όλες οι νόρμες στον R^n είναι **ισοδύναμες**. (Αυτό δεν ισχύει γενικά σε απειροδιάστατους διανυσματικούς χώρους.)

Εάν τα στοιχεία της F είναι παραγωγίσιμα σε σημείο $x \in R^N$ τότε ορίζουμε τον Ιακωβιανό πίνακα της $F'(x)$ με:

$$F'(x)_{ij} = \frac{\partial f_i}{\partial x_j}(x)$$

Ο Ιακωβιανός πίνακας περιέχει όλες τις μερικές παραγώγους πρώτης τάξης.

Η συνάρτηση $f: \Omega \rightarrow R$ λέγεται **παραγωγίσιμη** στο σημείο $x \in \Omega$ αν, για $x+h \in \Omega$, ισχύει:

$$f(x+h) - f(x) = v(x)^T h + \varepsilon(h)\|h\|$$

όπου $v(x) \in R^n$ και $\varepsilon(h) \rightarrow 0$.

Η f έχει τότε μερικές παραγώγους στο x και έχουμε $v(x) = \nabla f(x)$.

Αν η F είναι παραγωγίσιμη σε κάθε x του συνόλου Ω τότε λέμε ότι είναι παραγωγίσιμη στο σύνολο αυτό.

ΘΕΩΡΗΜΑ 2.1.2 (ΘΕΜΕΛΙΩΔΕΣ ΘΕΩΡΗΜΑ ΑΠΕΙΡΟΣΤΙΚΟΥ ΛΟΓΙΣΜΟΥ)

Έστω F παραγωγίσιμη σε ένα ανοιχτό σύνολο $\Omega \subset R^N$ και έστω $x^* \in \Omega$. Τότε για όλα τα $x \in \Omega$ πολύ κοντά στο x^* ισχύει:

$$F(x) - F(x^*) = \int_0^1 F'(x^* + t(x-x^*))(x-x^*) dt$$

2.2 Τύποι Σύγκλισης

Οι επαναληπτικές μέθοδοι μπορούν να κατηγοριοποιηθούν με βάση την ταχύτητα σύγκλισης.

Έστω ακολουθία $\{x_n\} \subset R^N$ και $x^* \in R^N$, και έστω $\|\cdot\|$ νόρμα του R^N . Τότε:

- $x_n \rightarrow x^*$ τετραγωνικά αν $x_n \rightarrow x$ και υπάρχει $K > 0$ τέτοιο ώστε
$$\|x_{n+1} - x^*\| \leq K \|x_n - x^*\|^2$$
- $x_n \rightarrow x^*$ υπεργραμμικά αν $\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\|x_{n+1} - x^*\|}{\|x_n - x^*\|} = 0$
- $x_n \rightarrow x^*$ γραμμικά με συντελεστή $\sigma \in (0,1)$ αν $\|x_{n+1} - x^*\| \leq \sigma \|x_n - x^*\|$ για n αρκετά μεγάλο.

Ορισμός 2.2.1 Μια επαναληπτική μέθοδος για τον υπολογισμό της ρίζας x^* είναι τοπικά τετραγωνικά/υπεργραμμικά/γραμμικά συγκλίνουσα αν οι επαναλήψεις συγκλίνουν στη x^* τετραγωνικά/υπεργραμμικά/γραμμικά με την προϋπόθεση ότι τα αρχικά δεδομένα βοηθούν στη γρήγορη προσέγγιση της ρίζας.

Ας σημειώσουμε ότι μια υπεργραμμική σύγκλιση ακολουθίας είναι επίσης γραμμική με συντελεστή σ για κάθε $\sigma > 0$. Μια τετραγωνική σύγκλιση ακολουθίας είναι υπεργραμμικά συγκλίνουσα με τάξη 2.

Γενικά, μια υπεργραμμική σύγκλιση ακολουθίας είναι προτιμότερη από μια γραμμική σύγκλιση αν το κόστος για μια μόνο επανάληψη είναι το ίδιο και στις δυο μεθόδους. Συχνά μια μέθοδος η οποία έχει μικρή ταχύτητα σύγκλισης, με βάση τους παραπάνω τύπους σύγκλισης, μπορεί να έχει κόστος επανάληψης τόσο μικρό που η αργή επανάληψη να είναι πιο αποτελεσματική από μία μέθοδο με καλύτερη τάξη σύγκλισης αλλά με μεγάλο κόστος επανάληψης.

Κάποιες φορές σημειώνονται λάθη σε κάποια επανάληψη τα οποία είναι ανεξάρτητα από τα σφάλματα της προσεγγιστικής λύσης. Ένα παράδειγμα θα ήταν το πρόβλημα στο οποίο η μη γραμμική εξίσωση F είναι το αποτέλεσμα ενός άλλου αλγορίθμου ο οποίος παρέχει έλεγχο σφαλμάτων, όπως προσαρμογή του μεγέθους σε μια προσέγγιση μιας διαφορικής εξίσωσης. Κάποιος μπορεί να υπολογίσει την F με χαμηλή ακρίβεια στις αρχικές φάσεις της επανάληψης για να υπολογίσει μια λύση και να σταθεροποιήσει την ακρίβεια καθώς τρέχουν οι επαναλήψεις. Ο τύπος r σύγκλισης μας βοηθάει να περιγράψουμε αυτή την ιδέα.

Ορισμός 2.2.2 Έστω ακολουθία $\{x_n\} \subset R^N$ και $x^* \in R^N$. Τότε η $\{x_n\}$ συγκλίνει στο x^* τετραγωνικά/υπεργραμμικά/γραμμικά αν υπάρχει ακολουθία $\{\xi_n\} \subset R$ η οποία να συγκλίνει τετραγωνικά/υπεργραμμικά/γραμμικά στο μηδέν έτσι ώστε:

$$\|x_n - x^*\| \leq \xi_n.$$

Λέμε ότι η $\{x_n\}$ συγκλίνει υπεργραμμικά με τάξη $\alpha > 1$ αν $\xi_n \rightarrow 0$ υπεργραμμικά με τάξη α .

2.3 Επανάληψη σταθερού σημείου

Πολλές μη γραμμικές εξισώσεις σχηματίζονται ως προβλήματα σταθερού σημείου

$$x = K(x) \tag{2.2}$$

όπου K , η συνάρτηση σταθερού σημείου είναι μη γραμμική. Μια ρίζα x^* της (2.2) ονομάζεται σταθερό σημείο της συνάρτησης K . Σε αυτό το κομμάτι της εργασίας θα αναλύσουμε τη σύγκλιση της επανάληψης σταθερού σημείου, η οποία δίνεται από τον τύπο:

$$x_{n+1} = K(x_n) \tag{2.3}$$

Αυτού του είδους οι επαναληπτικές μέθοδοι ονομάζονται *μεθοδοι μη γραμμικής Richardson επανάληψης* ή *μέθοδοι επιτυχούσας αντικατάστασης*.

Ορισμός 2.3.1 Έστω $\Omega \subset \mathbb{R}^N$. $K: \Omega \rightarrow \mathbb{R}^N$ είναι μια χαρτογραφηση συστολής στο Ω αν K είναι Lipschitz συνεχής στο Ω με σταθερά Lipschitz $\gamma < 1$.

Το σταθερό αποτέλεσμα για επανάληψη σταθερού σημείου είναι το *Θεώρημα Συστολικής Συνάρτησης*.

ΘΕΩΡΗΜΑ 2.3.1 (Θεώρημα Συστολικής Συνάρτησης)

Έστω Ω ένα κλειστό υποσύνολο του \mathbb{R}^N και έστω K μια συνάρτηση συστολής στο Ω με σταθερά Lipschitz $\gamma < 1$ τέτοια ώστε $K(x) \in \Omega$ για όλα τα $x \in \Omega$.

Τότε υπάρχει μοναδικό σταθερό σημείο του K , $x^* \in \Omega$, και η επανάληψη που ορίζεται από την (2.3) συγκλίνει γραμμικά στο x^* με παράγοντα γ για όλες τις αρχικές επαναλήψεις $x_0 \in \Omega$.

ΑΠΟΔΕΙΞΗ

Έστω $x_0 \in \Omega$. Ισχύει ότι $\{x_n\} \subset \Omega$ επειδή $x_0 \in \Omega$ και $K(x) \in \Omega$ για οποιοδήποτε $x \in \Omega$. Η ακολουθία $\{x_n\}$ παραμένει φραγμένη αφού για όλα τα $i \geq 1$

$$\|x_{i+1} - x_i\| = \|K(x_i) - K(x_{i-1})\| \leq \gamma \|x_i - x_{i-1}\| \dots \leq \gamma^i \|x_1 - x_0\|,$$

και γι' αυτό

$$\begin{aligned} \|x_n - x_0\| &= \left\| \sum_{i=0}^{n-1} x_{i+1} - x_i \right\| \\ &\leq \sum_{i=0}^{n-1} \|x_{i+1} - x_i\| \leq \|x_1 - x_0\| \sum_{i=0}^{n-1} \gamma^i \\ &\leq \|x_1 - x_0\| / (1 - \gamma). \end{aligned}$$

Τώρα για όλα τα $n, k \geq 0$,

$$\begin{aligned} \|x_{n+k} - x_n\| &= \|K(x_{n+k+1}) - K(x_{n-1})\| \\ &\leq \gamma \|x_{n+k-1} - x_{n-1}\| \\ &\leq \gamma \|K(x_{n+k-2}) - K(x_{n-2})\| \\ &\leq \gamma^2 \|x_{n+k-2} - x_{n-2}\| \leq \dots \leq \gamma^n \|x_k - x_0\| \\ &\leq \gamma^2 \|x_1 - x_0\| / (1 - \gamma) \end{aligned}$$

Οπότε

$$\lim_{n,k \rightarrow \infty} \|x_{n+k} - x_n\| = 0$$

και γι' αυτό η ακολουθία $\{x_n\}$ είναι ακολουθία Cauchy και έχει όριο το x^* .

Αν K έχει δύο σταθερά σημεία το x^* και το y^* στο Ω , τότε

$$\|x^* - y^*\| = \|K(x^*) - K(y^*)\| \leq \gamma \|x^* - y^*\|.$$

Επειδή το $\gamma < 1$ ισχύει ότι $\|x^* - y^*\| = 0$, δηλαδή $x^* = y^*$. Άρα το σταθερό σημείο είναι μοναδικό.

Τέλος, έχουμε ότι

$$\|x_{n+1} - x^*\| = \|K(x_n) - K(x^*)\| \leq \gamma \|x_n - x^*\|,$$

και η απόδειξη έχει ολοκληρωθεί. \square

Μια απλή εφαρμογή αυτού του θεωρήματος είναι η αριθμητική ολοκλήρωση των συνήθων διαφορικών εξισώσεων με επαναληπτικές μεθόδους. Για παράδειγμα, έστω το πρόβλημα αρχικών τιμών:

$$y' = f(y), y(t_0) = y_0$$

και η λύση του μέσω της μεθόδου του Euler με βήμα h

$$y^{n+1} - y^n = hf(y^{n+1}) \tag{2.4}$$

Στην εξίσωση (2.4) ο όρος y^k δηλώνει την προσέγγιση του $y(t_0 + kh)$. Η μετάβαση από το y^n στο y^{n+1} απαιτεί λύση του προβλήματος σταθερού σημείου

$$y = K(y) = y^n + hf(y).$$

Για απλότητα υποθέτουμε ότι η f είναι φραγμένη και συνεχής κατά Lipschitz, έστω

$$|f(y)| \leq M \text{ και } |f(x) - f(y)| \leq M|x - y|$$

για όλα τα x, y .

Αν $hM < 1$ μπορούμε να εφαρμόσουμε το θεώρημα συστολής θέτοντας $\Omega = R$ αφού για όλα τα x, y

$$\|K(x) - K(y)\| = h|f(x) - f(y)| \leq hM|x - y|.$$

Από το παραπάνω συμπεραίνουμε ότι για h αρκετά μικρό μπορούμε να ολοκληρώσουμε και ταυτόχρονα το βήμα h μπορούμε να το διαλέξουμε ανεξάρτητα από το y .

2.4 Οι βασικές υποθέσεις

Οι βασικές υποθέσεις για τον F .

1. Η εξίσωση $F(x) = 0$ έχει λύση την x^* .
2. $F' : \Omega \rightarrow R^{N \times N}$ είναι Lipschitz συνεχής με σταθερά Lipschitz γ
3. $F'(x^*)$ είναι ομαλός.

Οι παραπάνω υποθέσεις ισχύουν χωρίς να επηρεάζεται η σύγκλιση των μεθόδων. Παρόλα αυτά το κλασικό αποτέλεσμα της τετραγωνικής σύγκλισης της μεθόδου του Newton τις απαιτεί. Θα συμβολίζουμε τη ρίζα της F με x^* και $B(r)$ τη σφαίρα γύρω από το x^* με ακτίνα r και θα είναι:

$$B(r) = \{x : \|e\| < r\}$$

όπου $e = x - x^*$.

Αν x_n είναι η n -οστή προσέγγιση τότε $e_n = x_n - x^*$ είναι το αντίστοιχο σφάλμα.

• Το λήμμα του Banach και προσεγγιστικοί ανάστροφοι πίνακες

Η πιο άμεση προσέγγιση μιας επαναληπτικής λύσης ενός γραμμικού συστήματος είναι να γραφεί η $Ax = b$ ως μια γραμμική επανάληψη σταθερού σημείου. Ένας τρόπος είναι να γραφεί ως:

$$x = (I - A)x + b$$

και να ορίσουμε την επανάληψη Richardson ως:

$$x_{k+1} = (I - A)x_k + b$$

Υπάρχουν και πιο γενικές μέθοδοι στις οποίες η $\{x_k\}$ δίνεται από:

$$x_{k+1} = Mx_k + c.$$

Στην τελευταία ισότητα ο M είναι ένας $N \times N$ πίνακας και λέγεται πίνακας επανάληψης. Οι επαναληπτικές μέθοδοι αυτής της μορφής λέγονται σταθερές επαναληπτικές μέθοδοι επειδή η μετάβαση από την x_k στην x_{k+1} δεν εξαρτάται από το ιστορικό της επανάληψης.

Όλα τα αποτελέσματα βασίζονται στο παρακάτω λήμμα.

ΛΗΜΜΑ 2.4.1 (BANACH)

Αν M είναι ένας $N \times N$ πίνακας με $\|M\| < 1$ τότε ο πίνακας $I - M$ είναι ομαλός και

$$\|(I - M)^{-1}\| \leq \frac{1}{1 - \|M\|}.$$

ΑΠΟΔΕΙΞΗ Βλέπε βιβλίο [2]

ΠΟΡΙΣΜΑ 2.4.1

Αν $\|M\| < 1$ τότε η επανάληψη $x_{k+1} = Mx_k + c$ συγκλίνει στο $x = (I - M)^{-1}c$ για κάθε αρχική επανάληψη x_0 .

Μια συνέπεια του πορίσματος 2.4.1 είναι ότι η επανάληψη Richardson $x_{k+1} = (I - A)x_k + b$ θα συγκλίνει αν $\|I - A\| < 1$. Κάποιες φορές είναι πιθανό το $\text{cond}(A)$ να είναι πολύ μεγάλο και πολλαπλασιάζοντας και τις δυο πλευρές της $Ax = b$ με ένα πίνακα B , δηλαδή

$$BAx = Bb$$

να καταφέρνω να μειώσω το δείκτη κατάστασης που συμβολίζουμε με $\text{cond}(A)$ ή ισοδύναμα να βελτιωθεί η σύγκλιση της επαναληπτικής μεθόδου. Όσον αφορά την επανάληψη Richardson, οι πίνακες B που μας επιτρέπουν να εφαρμόζουμε το λήμμα του Banach και το πόρισμα 2.4.1 ονομάζονται προσεγγιστικοί ανάστροφοι.

ΘΕΩΡΗΜΑ 2.4.1

Αν A και B είναι $N \times N$ πίνακες και ο B είναι ένας προσεγγιστικός ανάστροφος του A τότε οι A και B είναι και οι δυο ομαλοί και

$$\|A^{-1}\| \leq \frac{\|B\|}{1 - \|I - BA\|} \quad , \quad \|B^{-1}\| \leq \frac{\|A\|}{1 - \|I - BA\|}$$

και

$$\|A^{-1} - B\| \leq \frac{\|B\| \|I - BA\|}{1 - \|I - BA\|} \quad , \quad \|A - B^{-1}\| \leq \frac{\|A\| \|I - BA\|}{1 - \|I - BA\|} \quad .$$

ΑΠΟΔΕΙΞΗ Βλέπε βιβλίο [1]

Το παραπάνω θεώρημα μας δείχνει πόσο μικρή είναι η απόσταση ανάμεσα στον B και στον A^{-1} .

Η επανάληψη Richardson με βάση την παραπάνω αναφορά στη βελτίωση της σύγκλισης της επαναληπτικής μεθόδου με τον προσεγγιστικό ανάστροφο έχει τη μορφή:

$$x_{k+1} = (I - BA)x_k + Bb.$$

Αν η νόρμα του $I - BA$ είναι μικρή, τότε όχι μόνο η ταχύτητα σύγκλισης θα είναι μεγάλη αλλά και οι αποφάσεις τερματισμού που βασίζονται στο υπόλοιπο $Bb - BAx$ θα είναι πιο καθοριστικές για το πραγματικό σφάλμα.

Ορισμός 2.4.1

Ο B είναι προσεγγιστική αναστροφή του A αν $\|I - BA\| < 1$.

ΛΗΜΜΑ 2.4.2

Έστω ότι ισχύουν οι βασικές υποθέσεις (§2.4). Τότε υπάρχει $\delta > 0$ τέτοιο ώστε για όλα τα $x \in B(r)$ να ισχύουν τα παρακάτω:

$$\|F'(x)\| \leq 2 \|F'(x^*)\| \quad (2.5)$$

$$\|F'(x)^{-1}\| \leq 2 \|F'(x^*)^{-1}\| \quad (2.6)$$

και

$$\|F'(x^*)^{-1}\|^{-1} \|e\| / 2 \leq \|F(x)\| \leq 2 \|F'(x^*)\| \|e\| \quad (2.7)$$

ΑΠΟΔΕΙΞΗ

Έστω δ αρκετά μικρό έτσι ώστε $B(\delta) \subset \Omega$. Για όλα τα $x \in B(\delta)$ ισχύει ότι:

$$\|F'(x)\| \leq \|F'(x^*)\| + \gamma \|e\|$$

μειώνοντας το δ τόσο ώστε $\gamma\delta < \|F'(x^*)\|$ και προκύπτει η ανισότητα (2.5).

Η ανισότητα (2.6) είναι άμεση συνέπεια του λήμματος Banach.

Θα αποδείξουμε:

$$\|I - F'(x^*)^{-1}F'(x)\| < 1/2$$

Για $\delta > 0$ τέτοιο ώστε:

$$\delta < \frac{\|F'(x^*)^{-1}\|^{-1}}{2\gamma}$$

Προκύπτει ότι:

$$\begin{aligned} \|I - F'(x^*)^{-1}F'(x)\| &= \|F'(x^*)^{-1}(F'(x^*) - F'(x))\| \\ &\leq \gamma \|F'(x^*)^{-1}\| \|e\| \leq \gamma\delta \|F'(x^*)^{-1}\| < 1/2. \end{aligned} \quad (2.8)$$

Για την απόδειξη της τελικής ανισότητας (2.7) σημειώνουμε ότι αν $x \in B(\delta)$ τότε $x^* + te \in B(\delta)$ για όλα τα $0 \leq t \leq 1$. Χρησιμοποιούμε την (2.5) και το θεώρημα (2.2.1) για να καταλήξουμε στο ότι:

$$\|F(x)\| \leq \int_0^1 \|F'(x^* + te)\| \|e\| dt \leq 2 \|F'(x^*)\| \|e\|$$

όπου είναι το δεξί μέλος της ζητούμενης ανισότητας.

Για το αριστερό μέλος έχουμε από το θεώρημα (2.4.1) ότι:

$$\begin{aligned} F'(x^*)^{-1}F(x) &= F'(x^*)^{-1} \int_0^1 F'(x^* + te) e dt \\ &= e - \int_0^1 (I - F'(x^*)^{-1}F'(x^* + te)) e dt \end{aligned}$$

και από την $\|I - F'(x^*)^{-1}F'(x)\| < 1/2$ έχουμε:

$$\|F'(x^*)^{-1}F(x)\| \geq \|e\| (1 - \|I - F'(x^*)^{-1}F'(x^* + te)\|) \geq \|e\|/2$$

Οπότε:

$$\frac{\|e\|}{2} \leq \|F'(x^*)^{-1}F(x)\| \leq \|F'(x^*)^{-1}\| \|F(x)\|$$

και η απόδειξη έχει ολοκληρωθεί. \square

Το παραπάνω λήμμα δίνει φράγματα τιμών της Ιακωβιανής σε κατάλληλη περιοχή με βάση τιμές της Ιακωβιανής στη ρίζα.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3 Η μέθοδος Newton

3.1 Τοπική σύγκλιση της μεθόδου Newton

Θα περιγράψουμε επαναληπτικές μεθόδους για μη γραμμικές εξισώσεις σε όρους μεταφοράς από μια τρέχουσα επανάληψη x_c σε μια νέα επανάληψη x_+ .

Με βάση αυτά τα δεδομένα η μέθοδος Newton μπορεί να περιγραφεί ως:

$$x_+ = x_c - F'(x_c)^{-1}F(x_c) \quad (3.1)$$

Επίσης το x_+ μπορεί να θεωρηθεί η ρίζα του τύπου Taylor ή του γραμμικού μοντέλου της F γύρω από το x_c

$$M_c(x) = F(x_c) + F'(x_c)(x - x_c).$$

ΘΕΩΡΗΜΑ 3.1.1

Έστω ότι ισχύουν οι βασικές υποθέσεις (§2.4). Τότε υπάρχει σταθερά $K > 0$ και $\delta > 0$ τέτοια ώστε αν $x_c \in B(\delta)$ η Newton επανάληψη από το x_c που δίνεται από την εξίσωση (3.1) ικανοποιεί την παρακάτω ανισότητα:

$$\|e_+\| \leq K \|e_c\|^2 \quad (3.2)$$

όπου και $e_c = x_c - x^*$.

ΑΠΟΔΕΙΞΗ

Έστω ότι το δ είναι τόσο μικρό ώστε τα συμπεράσματα του λήμματος 2.4.2 να ισχύουν.

Από το θεώρημα 2.1.2 με διαδοχικές πράξεις προκύπτει ότι:

$$\begin{aligned} e_+ &= x_+ - x^* \\ &= x_+ - x_c + x_c - x^* \\ &= e_c + (x_+ - x_c) \\ &\stackrel{(3.1)}{=} e_c - F'(x_c)^{-1}F(x_c). \end{aligned}$$

Επίσης:

$$F'(x_c)^{-1} \int_0^1 (F'(x_c) - F'(x^* + te_c))e_c dt =$$

$$\begin{aligned}
&= \int_0^1 F'(x_c)^{-1} F'(x_c) e_c dt - F'(x_c)^{-1} \int_0^1 F'(x^* + te_c) e_c dt \\
&= \int_0^1 I e_c dt - F'(x_c)^{-1} \int_0^1 F'(x^* + te_c) e_c dt \\
&= e_c - F'(x_c)^{-1} \int_0^1 F'(x^* + te_c) e_c dt
\end{aligned}$$

Οπότε από το θεώρημα (2.1.2) έχουμε :

$$F'(x_c)^{-1} \int_0^1 (F'(x_c) - F'(x^* + te_c)) e_c dt = e_c - F'(x_c)^{-1} \int_0^1 F'(x^* + te_c) e_c dt$$

Από το λήμμα 2.4.2, τη συνέχεια κατά Lipschitz της F' και τις προηγούμενες σχέσεις προκύπτει ότι:

$$\|e_+\| \leq (2 \|F'(x^*)^{-1}\|) \gamma \|e_c\|^2 / 2$$

Οπότε θέτοντας $K = \gamma \|F'(x^*)^{-1}\|$ έχουμε τη ζητούμενη ανισότητα. \square

Παρατηρούμε πως η σταθερά K του Θεωρήματος 2.3.1 εξαρτάται από τον αντίστροφο της Ιακωβιανής υπολογισμένο στη ρίζα, και όσο μικρότερη είναι η τιμή της σταθεράς αυτής τόσο γρηγορότερα επιτυγχάνεται η σύγκλιση. Η τιμή της σταθεράς K , επηρεάζει κατά ουσιαστικό τρόπο την ακτίνα σύγκλισης $\delta > 0$, της μεθόδου.

ΘΕΩΡΗΜΑ 3.1.2 (Θεώρημα Σύγκλισης Επαναληπτικής Διαδικασίας)

Έστω ότι ισχύουν οι βασικές υποθέσεις (§2.4). Τότε υπάρχει δ τέτοιο ώστε αν $x_0 \in B(\delta)$ η προσέγγιση Newton

$$x_{n+1} = x_n - F'(x_n)^{-1} F(x_n)$$

συγκλίνει τετραγωνικά στο x^* .

ΑΠΟΔΕΙΞΗ

Έστω δ μικρό αρκετά τέτοιο ώστε τα συμπεράσματα του θεωρήματος 3.1.1 να ισχύουν. Μειώνουμε το δ τόσο ώστε $K\delta = \eta < 1$. Τότε αν $n \geq 0$ και $x_n \in B(\delta)$, από το θεώρημα 3.1.1 προκύπτει ότι:

$$\|e_{n+1}\| \leq K \|e_n\|^2 \leq \eta \|e_n\| < \|e_n\| \quad (3.3)$$

και ότι $x_{n+1} \in B(\eta\delta) \subset B(\delta)$. Επομένως αν $x_n \in B(\delta)$ μπορούμε να συνεχίσουμε τις επαναλήψεις. Αφού $x_0 \in B(\delta)$ από υπόθεση, ολόκληρη η σειρά $\{x_n\} \subset B(\delta)$.

Η ανισότητα (3.3) δείχνει ότι $x_n \rightarrow x^*$ τετραγωνικά. \square

Η υπόθεση ότι η αρχική προσέγγιση είναι πολύ κοντά στη λύση ίσως φανεί πλασματική με την πρώτη ματιά. Παρόλα αυτά υπάρχουν πολλές περιπτώσεις στις οποίες η αρχική προσέγγιση μπορεί να επιλεγεί σωστά.

3.2 Τερματισμός των επαναλήψεων

Η απόφαση για τον τερματισμό των επαναλήψεων μπορεί να βασιστεί στο λήμμα 2.4.2. Αν $x \in B(\delta)$, όπου δ είναι αρκετά μικρό έτσι ώστε τα συμπεράσματα του λήμματος 2.4.2 ισχύουν, τότε αν $F'(x^*)$ είναι καλά ορισμένο, μπορούμε να τερματίσουμε τις επαναλήψεις όταν το σχετικό μη γραμμικό υπόλοιπο $\frac{\|F(x)\|}{\|F(x_0)\|}$ είναι μικρό.

ΛΗΜΜΑ 3.2.1

Έστω ότι ισχύουν οι βασικές υποθέσεις. Έστω $\delta > 0$ μικρό αρκετά τέτοιο ώστε τα συμπεράσματα του λήμματος 2.4.2 ισχύουν για $x \in B(\delta)$. Τότε για όλα $x \in B(\delta)$ ισχύει:

$$\frac{\|e\|}{4\|e_0\|\kappa(F'(x^*))} \leq \frac{\|F(x)\|}{\|F(x_0)\|} \leq \frac{4\kappa(F'(x^*))\|e\|}{\|e_0\|},$$

όπου $\kappa(F'(x^*)) = \|F'(x^*)\| \|F'(x^*)^{-1}\|$ είναι ο δείκτης κατάστασης του $F'(x^*)$ σε σχέση με τη νόρμα $\|\cdot\|$.

Από το λήμμα 3.2.1 συμπεραίνουμε ότι αν η $F'(x^*)$ είναι καλά ορισμένη (δηλαδή έχει καλό δείκτη κατάστασης), το μέγεθος του σχετικού μη γραμμικού υπολοίπου είναι ένας καλός δείκτης για το μέγεθος του σφάλματος. Ωστόσο, αν υπάρχει σφάλμα στον υπολογισμό της F ή αν η αρχική προσέγγιση είναι κοντά στη ρίζα, μια απόφαση τερματισμού βασισμένη στο σχετικό υπόλοιπο μπορεί να οδηγήσει σε πάρα πολλές επαναλήψεις ή οι επαναλήψεις να μην τερματίσουν ποτέ.

Στους περισσότερους κώδικες MATLAB και αλγορίθμους για τις μη γραμμικές εξισώσεις το πρακτικό κριτήριο τερματισμού είναι να σταματήσουν οι επαναλήψεις αν ικανοποιείται ανισότητα της μορφής:

$$\|F(x)\| \leq \tau_r \|F(x_0)\| + \tau_a \quad (3.4)$$

όπου το σχετικό σφάλμα ανοχής τ_r και το απόλυτο σφάλμα ανοχής τ_a είναι δεδομένα του αλγορίθμου. Οι συνδυασμοί των σχετικών και απόλυτων σφαλμάτων ανοχής χρησιμοποιούνται συχνά σε αριθμητικές μεθόδους για συνήθεις διαφορικές εξισώσεις ή διαφορικές αλγεβρικές εξισώσεις.

Ένας άλλος τρόπος για να αποφασίσουμε αν θα τερματίσουμε τις επαναλήψεις είναι να ελέγξουμε το βήμα στη μέθοδο Newton

$$s = -F'(x_c)^{-1}F(x_c) = x_+ - x_c,$$

και να τερματίσουμε την επανάληψη όταν το $\|s\|$ είναι αρκετά μικρό. Αυτό το κριτήριο βασίζεται στο θεώρημα 3.1.1, από το οποίο προκύπτει ότι

$$\|e_c\| = \|s\| + O(\|e_c\|^2).$$

Επίσης, κοντά στη ρίζα τα s και e_c έχουν σχεδόν το ίδιο μέγεθος.

Για μεθόδους άλλες εκτός από τη μέθοδο Newton, η σχέση ανάμεσα στο βήμα και το σφάλμα δεν είναι τόσο ξεκάθαρη. Αν η προσέγγιση είναι γραμμικά συγκλίνουσα, τότε

$$\|e_+\| \leq \sigma \|e_c\|, \quad \sigma < 1$$

προκύπτει ότι

$$(1 - \sigma)\|e_c\| \leq \|s\| \leq (1 + \sigma)\|e_c\|.$$

ΑΠΟΔΕΙΞΗ

Είναι $e_c = x_c - x^*$ και $s = x_+ - x_c$

$$\begin{aligned} \|e_c\| &= \|x_c - x^*\| \\ &\leq \|x_c - x_+\| + \|x_+ - x^*\| \\ &\leq \|s\| + \|e_+\| \\ &\leq \|s\| + \sigma \|e_c\| \Leftrightarrow (1 - \sigma)\|e_c\| \leq \|s\| \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \|s\| &= \|x_+ - x_c\| \\ &\leq \|x_+ - x^*\| + \|x^* - x_c\| \\ &\leq \|e_+\| + \|e_c\| \end{aligned}$$

$$\leq \sigma \|e_c\| + \|e_c\| \Leftrightarrow \|s\| \leq (1 + \sigma) \|e_c\| \quad \square$$

Με βάση τα παραπάνω, το βήμα είναι ένας αξιόπιστος δείκτης του σφάλματος υπό την προϋπόθεση ότι το σ δεν είναι πολύ κοντά στο 1.

Παρόλα αυτά, για να εκτιμήσουμε το $\|e_c\|$ με αυτό τον τρόπο πρέπει να ολοκληρώσουμε όλη τη δουλειά που απαιτείται για τον υπολογισμό του x_+ , ενώ τερματίζοντας σε μικρά σχετικά υπόλοιπα ή σε περίπτωση όπως η (3.4) η απόφαση να σταματήσουμε τις επαναλήψεις μπορεί να παρθεί πριν τον υπολογισμό του παράγοντα $F'(x_c)$. Αν ο υπολογισμός του Ιακωβιανού πίνακα είναι περίπλοκος τότε ο τερματισμός των επαναλήψεων σε μικρά βήματα είναι καλύτερος.

3.3 Η αλγοριθμική μορφοποίηση της μεθόδου Newton

Για να υπολογίσουμε τη Newton επανάληψη x_+ ξεκινώντας από ένα σταθερό σημείο x_c πρέπει πρώτα να υπολογίσουμε τον $F(x_c)$ και να αποφασίσουμε αν θα τερματίσουμε τις επαναλήψεις. Αν αποφασίσουμε να συνεχίσουμε πρέπει να υπολογιστεί και να παραγωγιθεί ο Ιακωβιανός πίνακας $F'(x_c)$. Τότε το βήμα υπολογίζεται ως η λύση της $F'(x_c)s = -F(x_c)$ και η επανάληψη αυξάνεται κατά $x_+ = x_c + s$. Στα βήματα που περιγράψαμε παραπάνω ο υπολογισμός και η παραγωγή του $F'(x_c)$ κοστίζουν αρκετά. Η παραγωγή του F' στην περίπτωση όπου προκύπτει πλήρης πίνακας κοστίζει $O(N^3)$ και γίνεται με πράξεις μηχανής. Ο υπολογισμός του $F'(x_c)$ με τη μέθοδο πεπερασμένων διαφορών έχει αναμενόμενο κόστος N φορές το κόστος του υπολογισμού του F επειδή κάθε στήλη του F' απαιτεί έναν εκ νέου υπολογισμό του F για να βρούμε την προσέγγιση με τις πεπερασμένες διαφορές. Οπότε το κόστος για ένα βήμα της μεθόδου Newton μπορεί να εκτιμηθεί ως $N+1$ υπολογισμοί του F και $O(N^3)$ με πράξεις μηχανής.

Σε πολλές περιπτώσεις ο $F'(x_c)$ μπορεί να υπολογιστεί πιο αποτελεσματικά, με μεγαλύτερη ακρίβεια και άμεσα απ' ότι με τις πεπερασμένες διαφορές και η παραπάνω ανάλυση σχετικά με το κόστος μια επανάληψης Newton μπορεί να θεωρηθεί αρκετά απαισιόδοξη.

Για αυστηρή και σωστή περιγραφή του αλγορίθμου Newton χρησιμοποιούμε μια παραγοντοποίηση LU του $F'(x_c)$. Μια άλλη παραγοντοποίηση που θα ήταν εξίσου κατάλληλη θα ήταν μια QR ή μια Cholesky παραγοντοποίηση σε περίπτωση που ο Ιακωβιανός πίνακας είναι συμμετρικός και θετικά ορισμένος. Τα δεδομένα του αλγορίθμου είναι η αρχική επανάληψη x , η μη γραμμική εξίσωση F και ένα διάνυσμα ανοχής τερματισμού $\tau = (\tau_r, \tau_a) \in R^2$.

ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΣ 3.3.1 newton (x, F, τ)

1. $r_0 = \|F(x)\|$
2. Ενώ $\|F(x)\| > \tau_r r_0 + \tau_a$ κάνε:
 - (α) Υπολόγισε $F'(x)$
 - (β) Παραγοντοποίησε $F'(x) = LU$
 - (γ) Λύσε $LUs = -F(x)$
 - (δ) $x = x + s$
 - (ε) Υπολόγισε $F(x)$.

Μια προσέγγιση για να μειώσουμε τα κόστη των βημάτων 2(α) και 2(β) του παραπάνω αλγορίθμου είναι να τα μετακινήσουμε έξω από την κύρια επανάληψη. Αυτό σημαίνει ότι η γραμμική προσέγγιση $F(x) = 0$ η οποία λύνεται σε κάθε επανάληψη έχει σταθερή παράγωγο από την αρχική επανάληψη.

$$x_+ = x_c - F'(x_0)^{-1} F(x_c).$$

Αυτή η μέθοδος λέγεται **μέθοδος της χορδής**. Τα δεδομένα είναι ίδια όπως και στη μέθοδο του Newton.

ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΣ 3.3.2 chord (x, F, τ)

1. $r_0 = \|F(x)\|$
2. Υπολόγισε $F'(x)$
3. Παραγοντοποίησε $F'(x) = LU$
4. Ενώ $\|F(x)\| > \tau_r r_0 + \tau_a$ κάνε:
 - (α) Λύσε $LUs = -F(x)$
 - (β) $x = x + s$
 - (γ) Υπολόγισε $F(x)$.

Η μόνη διαφορά από τον αλγόριθμο της μεθόδου Newton είναι ότι ο υπολογισμός και η παραγοντοποίηση του Ιακωβιανού πίνακα γίνονται πριν αρχίσουν οι επαναλήψεις. Η διαφορά στις επαναλήψεις είναι ότι χρησιμοποιείται μια προσέγγιση του $F'(x_c)$. Παρόμοιες διαφορές προκύπτουν αν ο $F'(x_c)$ υπολογίζεται με πεπερασμένες διαφορές.

3.4 Σφάλματα στη συνάρτηση και στην παράγωγο

Έστω ότι οι F και F' υπολογίζονται χωρίς ακρίβεια έτσι ώστε $F + \varepsilon$ και $F' + \Delta$ χρησιμοποιούνται αντί για F και F' στην επανάληψη. Αν Δ είναι αρκετά μικρό τότε από την επανάληψη μπορεί να προκύψει ένα αποτέλεσμα ακρίβειας $O(\varepsilon)$ στο x^* . Αυτή η περίπτωση είναι διαφορετική από τη σύγκλιση και λέγεται τοπική βελτίωση. Αν, για παράδειγμα, το ε προκύπτει από σφάλματα αποκοπής και προσέγγισης για την αριθμητική της μηχανής δεν υπάρχει λόγος να δεχτούμε ότι $\|F(x_n)\|$ θα είναι μικρότερο από το ε γενικότερα. Θα αναφερόμαστε σε αυτή τη φάση της επανάληψης κατά την οποία το μη γραμμικό υπόλοιπο δεν μειώνεται πλέον ως παύση της επανάληψης.

ΘΕΩΡΗΜΑ 3.4.1

Έστω ότι ισχύουν οι βασικές υποθέσεις (§2.4). Τότε υπάρχουν $\bar{K} > 0, \delta > 0$ και $\delta_1 > 0$ τέτοια ώστε αν $x_c \in B(\delta)$ και $\|\Delta(x_c)\| < \delta_1$ τότε ορίζεται

$$x_+ = x_c - (F'(x_c) + \Delta(x_c))^{-1} (F(x_c) + \varepsilon(x_c))$$

όπου $F'(x_c) + \Delta(x_c)$ είναι ομαλός και ικανοποιεί:

$$\|e_+\| \leq \bar{K} (\|e_c\|^2 + \|\Delta(x_c)\| \|e_c\| + \|\varepsilon(x_c)\|) \quad (3.5)$$

ΑΠΟΔΕΙΞΗ

Έστω δ αρκετά μικρό τέτοιο ώστε τα συμπεράσματα του λήμματος 2.3.1 και του θεωρήματος 3.1.1 να ισχύουν. Έστω

$$x_+^N = x_c - F'(x_c)^{-1} F(x_c)$$

όπου x_+^N είναι η επανάληψη χωρίς τα σφάλματα αποκοπής και ξέρουμε ότι ισχύει

$$x_+ = x_+^N + (F'(x_c)^{-1} - (F'(x_c) + \Delta(x_c))^{-1}) F(x_c) - (F'(x_c) + \Delta(x_c))^{-1} \varepsilon(x_c)$$

όπου x_+ είναι η επανάληψη με τα σφάλματα αποκοπής.

Από το λήμμα 2.4.2 και το θεώρημα 3.1.1 έχουμε ότι

$$\|e_+\| \leq K \|e_c\|^2 + 2 \|F'(x_c)^{-1} - (F'(x_c) + \Delta(x_c))^{-1}\| \|F'(x^*)\| \|e_c\| + \|(F'(x_c) + \Delta(x_c))^{-1}\| \|\varepsilon(x_c)\| \quad (3.6).$$

Αν

$$\|\Delta(x_c)\| \leq \|F'(x^*)^{-1}\|^{-1} / 4$$

τότε από το λήμμα 2.4.2 προκύπτει ότι

$$\|\Delta(x_c)\| \leq \|F'(x_c)^{-1}\|^{-1} / 2$$

και από το λήμμα του Banach προκύπτει ότι ο $F'(x_c) + \Delta(x_c)$ είναι ομαλός και

$$\|(F'(x_c) + \Delta(x_c))^{-1}\| \leq 2\|F'(x_c)^{-1}\| \leq 4\|F'(x^*)^{-1}\|.$$

Οπότε

$$\|F'(x_c)^{-1} - (F'(x_c) + \Delta(x_c))^{-1}\| \leq 8\|F'(x^*)^{-1}\|^2 \|\Delta(x_c)\|.$$

Χρησιμοποιούμε αυτές τις προσεγγίσεις και την (3.6) για να καταλήξουμε στο ότι

$$\|e_+\| \leq K\|e_c\|^2 + 16\|F'(x^*)^{-1}\|^2 \|F'(x^*)\| \|\Delta(x_c)\| \|e_c\| + 4\|(F'(x^*)^{-1})\| \|\varepsilon(x_c)\|.$$

Θέτοντας

$$\bar{K} = K + 16\|F'(x^*)^{-1}\|^2 \|F'(x^*)\| + 4\|(F'(x^*)^{-1})\|$$

η απόδειξη έχει ολοκληρωθεί. \square

3.5 Η μέθοδος της χορδής

Η μέθοδος της χορδής περιγράφεται από τον τύπο:

$$x_+ = x_c - F'(x_0)^{-1} F(x_c)$$

Με βάση το θεώρημα 3.4.1 είναι:

$$\varepsilon(x_c) = 0, \Delta(x_c) = F'(x_0) - F'(x_c).$$

Οπότε αν $x_c, x_0 \in B(\delta) \subset \Omega$

$$\|\Delta(x_c)\| \leq \gamma \|x_0 - x_c\| \leq \gamma(\|e_0\| + \|e_c\|). \quad (3.7)$$

ΘΕΩΡΗΜΑ 3.5.1

Έστω ότι ισχύουν οι βασικές υποθέσεις (§2.4). Τότε υπάρχουν $K_C > 0$ και $\delta > 0$ τέτοια ώστε αν $x_0 \in B(\delta)$ οι επαναλήψεις από τη μέθοδο της χορδής συγκλίνουν q-γραμμικά στο x^* και

$$\|e_{n+1}\| \leq K_C \|e_0\| \|e_n\|. \quad (3.8)$$

ΑΠΟΔΕΙΞΗ

Έστω δ τόσο μικρό ώστε $B(\delta) \subset \Omega$ και τα συμπεράσματα του θεωρήματος 3.4.1 ισχύουν. Έστω $e_n, e_0 \in B(\delta)$. Συνδυάζοντας τις σχέσεις (3.6) και (3.7) προκύπτει ότι:

$$\begin{aligned} \|e_{n+1}\| &\leq \bar{K} (\|e_n\| (1 + \gamma) + \gamma \|e_0\|) \|e_n\| \\ &\leq \bar{K} (1 + 2\gamma) \delta \|e_n\| \end{aligned}$$

Αν δ τόσο μικρό τέτοιο ώστε

$$\bar{K} (1 + 2\gamma) \delta = \eta < 1$$

τότε οι επαναλήψεις στη μέθοδο της χορδής συγκλίνουν γραμμικά στο x^* . Από την γραμμική σύγκλιση προκύπτει ότι $\|e_n\| < \|e_0\|$ και η (3.8) ισχύει με $K_C = \bar{K} (1 + 2\gamma)$. □

Μια άλλη μορφή της μεθόδου της χορδής είναι:

$$x_+ = x_c - A^{-1} F(x_c)$$

όπου $A \approx F'(x^*)$. Επαναλήψεις τέτοιου τύπου μπορούν να θεωρηθούν μη γραμμικές προαπαιτούμενες επαναλήψεις της μεθόδου Richardson. Επειδή

$$\|\Delta(x_c)\| = \|A - F'(x_c)\| \leq \|A - F'(x^*)\| + \|F'(x^*) - F'(x_c)\|$$

αν $x_c \in B(\delta) \subset \Omega$ τότε

$$\|\Delta(x_c)\| \leq \|A - F'(x^*)\| + \gamma \|e_c\| \leq \|A - F'(x^*)\| + \gamma \delta.$$

ΘΕΩΡΗΜΑ 3.5.2

Έστω ότι ισχύουν οι βασικές υποθέσεις (§2.4). Τότε υπάρχουν $K_A > 0, \delta > 0$ και $\delta_1 > 0$ τέτοια ώστε αν $x_0 \in B(\delta)$ και $\|A - F'(x^*)\| < \delta_1$ τότε η επανάληψη

$$x_{n+1} = x_n - A^{-1}F(x_n)$$

συγκλίνει γραμμικά στο x^* και

$$\|e_{n+1}\| \leq K_A (\|e_0\| + \|A - F'(x^*)\|) \|e_n\|. \quad (3.9)$$

3.6 Προσεγγίσεις του αντιστρόφου F'

Ένας άλλος τρόπος για να περιγράψουμε τη μέθοδο της χορδής είναι η εύρεση μιας προσέγγισης του ανάστροφου του F' . Αντικαθιστούμε τον όρο $F'(x)^{-1}$ με τον $B(x)$, όπου ο υπολογισμός του B σε ένα διάνυσμα έχει μικρότερη πολυπλοκότητα σε σχέση με την εύρεση της λύσης χρησιμοποιώντας την παραγωγή του LU . Αντί να εκφράσουμε την επανάληψη με βάση τους όρους $B^{-1}(x) - F'(x)$ και χρησιμοποιώντας το θεώρημα 3.5.2 μπορούμε να εφαρμόσουμε τη μέθοδο απευθείας με τον ορισμό της προσεγγιστικής αναστροφής.

Ας σημειώσουμε ότι αν ο B είναι σταθερός πίνακας (ανεξάρτητος από το x) τότε η επανάληψη

$$x_{+} = x_c - BF(x_c)$$

μπορεί να θεωρηθεί μια μη γραμμική Richardson επανάληψη κατά την οποία πολλαπλασιάσαμε με τον πίνακα B με σκοπό να βελτιώσουμε το δείκτη κατάστασης της επανάληψης.

ΘΕΩΡΗΜΑ 3.6.1

Έστω ότι ισχύουν οι βασικές υποθέσεις (§2.4). Τότε υπάρχουν $K_B > 0, \delta > 0$ και $\delta_1 > 0$ τέτοια ώστε αν $x_0 \in B(\delta)$ και η συνάρτηση η οποία στην ουσία είναι ο πίνακας $B(x)$ ικανοποιεί

$$\|I - B(x)F'(x^*)\| = \rho(x) < \delta_1 \quad (3.10)$$

για κάθε $x \in B(\delta)$ τότε η επανάληψη

$$x_{n+1} = x_n - B(x_n)F(x_n)$$

συγκλίνει γραμμικά στο x^* και

$$\|e_{n+1}\| \leq K_B(\rho(x_n) + \|e_n\|)\|e_n\|. \quad (3.11)$$

Σημείωση: Ας παρατηρήσουμε ότι στο θεώρημα που περιγράψαμε παραπάνω ο πίνακας B εξαρτάται από την επανάληψη (αφού είναι της μορφής $B(x_n)$) και κατά συνέπεια έχουμε ένα διαφορετικό πίνακα B για κάθε επανάληψη. Στη μη γραμμική επανάληψη Richardson ο πίνακας B είναι σταθερός και δεν εξαρτάται από την επανάληψη.

ΑΠΟΔΕΙΞΗ

Το θεώρημα αυτό μπορεί να ληφθεί ως ένα πόρισμα του λήμματος Banach και του θεωρήματος 3.4.1.

Από την (3.8) έχουμε

$$\begin{aligned} \|B(x)\| &= \|B(x)F'(x^*)F'(x^*)^{-1}\| \\ &\leq \|B(x)F'(x^*)\| \|F'(x^*)^{-1}\| \\ &\leq M_B = (1 + \delta_1) \|F'(x^*)^{-1}\| \end{aligned} \quad (3.12)$$

Χρησιμοποιώντας την (3.12) και

$$\begin{aligned} e_+ &= e_c - B(x_c)F(x_c) = \int_0^1 (I - B(x_c)F'(x^* + te_c))e_c dt \\ &= (I - B(x_c)F'(x^*))e_c + B(x_c) \int_0^1 (F'(x^*) - F'(x^* + te_c))e_c dt \end{aligned}$$

προκύπτει

$$\|e_+\| \leq \rho(x_c)\|e_c\| + M_B \gamma \|e_c\|^2 / 2.$$

Και η απόδειξη ολοκληρώνεται με $K_B = 1 + M_B \gamma / 2$. \square

3.7 Προσεγγιστικές διαφορές στον F'

Έστω ότι υπολογίζουμε το $F(x) + \varepsilon(x)$ αντί για τον $F(x)$ και ότι επιχειρούμε να προσεγγίσουμε τον $F'(x)$ σε ένα διάνυσμα από μια προσέγγιση με προς τα εμπρός διαφορές. Αυτό το κάνουμε όταν για παράδειγμα φτιάχνουμε μια προσέγγιση Ιακωβιανής. Η j -οστή στήλη του $F'(x)$ είναι $F'(x)e_j$, όπου e_j είναι το μοναδιαίο διάνυσμα με j -οστό στοιχείο το 1 και όλα τα υπόλοιπα 0.

Μια προσέγγιση με προς τα εμπρός διαφορές του $F'(x)w$ θα ήταν:

$$\frac{F(x+hw) + \varepsilon(x+h) - F(x) - \varepsilon(x)}{h}$$

Έστω ότι $\|\varepsilon(x)\| \leq \bar{\varepsilon}$. Τότε

$$F'(x)w - \frac{F(x+hw) + \varepsilon(x+h) - F(x) - \varepsilon(x)}{h} = O(h + \bar{\varepsilon}/h)$$

Η ποσότητα μέσα στον όρο O ελαχιστοποιείται όταν $h = \sqrt{\bar{\varepsilon}}$. Αυτό σημαίνει ότι για παράδειγμα, πολύ μικρά βήματα διαφορών h μπορούν να οδηγήσουν σε ανακριβή αποτελέσματα. Στην ειδική περίπτωση όπου το $\varepsilon(x)$ είναι ένα αποτέλεσμα προσέγγισης μηχανής ($\bar{\varepsilon} \approx 10^{-15}$) η ανάλυση υποδεικνύει ότι η επιλογή $h \approx 10^{-7}$ είναι απόλυτα λογική. Η επιλογή $h \approx 10^{-15}$ μπορεί να οδηγήσει σε καταστροφή! Εδώ πρέπει να υποθέσουμε ότι το x και το w έχουν σχεδόν το ίδιο μέγεθος. Αν όχι, τότε η επιλογή του h θα πρέπει να περιλαμβάνει τα x και w . Η επιλογή

$$h = \varepsilon^{-1/2} \|x\| / \|w\|$$

καλύπτει όλη την παραπάνω συζήτηση.

Μια πιο σημαντική συνέπεια αυτής της ανάλυσης είναι ότι στην επιλογή του μεγέθους του βήματος, δηλαδή η επιλογή του h χρησιμοποιώντας προς τα εμπρός διαφορές για τη δημιουργία της Ιακωβιανής σε ένα διάνυσμα πρέπει να ληφθεί υπόψη το σφάλμα στην παραγωγή του F . Αυτό μπορεί να είναι πολύ σημαντικό αν μέρος του F προκύπτει από υπολογισμένα δεδομένα.

Αν ο $F(x)$ έχει ήδη υπολογιστεί τότε το κόστος μιας προσέγγισης με προς τα εμπρός διαφορές του $F'(x)w$ είναι ένας μόνο υπολογισμός του F (στο $x+hw$). Οπότε η παραγωγή μιας Ιακωβιανής με πεπερασμένες διαφορές θα κόστιζε N παραγωγίσεις, μία για κάθε στήλη της Ιακωβιανής. Η χρήση ειδικής μεθοδολογίας θα μείωνε αυτό το κόστος.

Η προσέγγιση με προς τα εμπρός διαφορές στην παράγωγο δεν είναι γραμμικός τελεστής στο w . Ο λόγος είναι ότι η παράγωγος έχει προσεγγιστεί και κατά συνέπεια η γραμμικότητα έχει χαθεί. Γι' αυτό πρέπει να είμαστε ιδιαίτερα προσεκτικοί όταν ορίζουμε την προσεγγιστική διαφορά της Ιακωβιανής.

Ορισμός 3.7.1

Έστω F ορισμένος σε μια περιοχή του $x \in R^N$. $(\nabla_h F)(x)$ είναι ένας $N \times N$ πίνακας του οποίου η j -οστή στήλη δίνεται από:

$$(\nabla_h F)(x)_j = \begin{cases} \frac{F(x + h\|x\|e_j) - F(x)}{h\|x\|}, & x \neq 0 \\ \frac{F(he_j) - F(x)}{h}, & x = 0 \end{cases}$$

Ορισμός 3.7.2

Έστω F ορισμένος σε μια περιοχή του $x \in \mathbb{R}^N$ και έστω $w \in \mathbb{R}^N$. Έχουμε ότι:

$$D_h F(x; w) = \begin{cases} 0, & w = 0 \\ \|w\| \frac{F(x + h\|x\|w/\|w\|) - F(x)}{h\|x\|}, & w, x \neq 0 \\ \|w\| \frac{F(hw/\|w\|) - F(x)}{h}, & x = 0, w \neq 0 \end{cases} \quad (3.13)$$

Από τις βασικές υποθέσεις (§2.4) και το λήμμα του Banach προκύπτει το παρακάτω αποτέλεσμα.

ΛΗΜΜΑ 3.7.1

Έστω ότι ισχύουν οι βασικές υποθέσεις (§2.4). Τότε υπάρχουν $\delta, \bar{\varepsilon}, \bar{h} > 0$ τέτοια ώστε αν $\varepsilon, h \leq \bar{h}$ και $\varepsilon(x) \leq \bar{\varepsilon}$ για όλα τα $x \in B(\delta)$, τότε ο $\nabla_h(F + \varepsilon)(x)$ είναι ομαλός για κάθε $x \in B(\delta)$ και υπάρχει $M_F > 0$ τέτοιο ώστε

$$\|F'(x) - \nabla_h(F + \varepsilon)(x)\| \leq M_F(h + \varepsilon(x)/h)$$

Αν υποθέσουμε ότι η μετέπειτα διαφορά βήματος έχει επιλεγεί έτσι ώστε $h = O(\sqrt{\varepsilon(x)})$ τότε $\Delta(x) = O(\sqrt{\varepsilon(x)})$ από το λήμμα 3.7.1.

Ενδεικτικά αναφέρουμε το ακόλουθο θεώρημα. Για περισσότερα αποτελέσματα παραπέμπουμε τον αναγνώστη στο βιβλίο [2].

ΘΕΩΡΗΜΑ 3.7.1

Έστω ότι ισχύουν οι βασικές υποθέσεις (§2.4). Τότε υπάρχουν θετικά $\delta, \bar{\varepsilon}$ και K_D τέτοια ώστε αν $x_c \in B(\delta), \varepsilon(x) \leq \bar{\varepsilon}$ για κάθε $x \in B(\delta)$, και υπάρχει $M_- > 0$ τέτοιο ώστε

$$h_c > M_- \sqrt{\varepsilon(x_c)}$$

τότε

$$x_+ = x_c - \nabla_{h_c} (F + \varepsilon)(x_c)^{-1} (F(x_c) + \varepsilon(x_c))$$

ικανοποιεί

$$\|e_+\| \leq K_D(\varepsilon(x_c) + (\|e_c\| + h_c)\|e_c\|)$$

Από το θεώρημα 3.7.1 δεν προκύπτει ότι μια επανάληψη θα συγκλίνει στο x^* . Ακόμα και αν το ε προσεγγιστεί με πράξεις μηχανής, δεν υπάρχει εγγύηση ότι $\varepsilon(x_n) \rightarrow 0$ όταν $x_n \rightarrow x^*$. Οπότε κάποιος θα περίμενε ότι η ακολουθία $\{\|e_n\|\}$ θα σύγκλινε στο $\|e_n\| \approx \varepsilon(x^*)$. Γι' αυτό στα πρώτα στάδια των επαναλήψεων, καθώς το $\|e_n\| \gg \sqrt{\varepsilon(x^*)}$, η πρόοδος της επανάληψης θα ξεχωρίσει σε σχέση με τη μέθοδο Newton καθώς μοιάζει με μια ακριβή Ιακωβιανή. Όταν $\|e_n\| \leq \sqrt{\varepsilon(x^*)}$ το θεώρημα 3.7.1 λέει ότι $\|e_{n+1}\| = O(\varepsilon(x^*))$. Οπότε η τετραγωνική σύγκλιση θα φανεί όταν το σφάλμα στην F δεν μειώνεται πια.

Μια διαφορετική προσέγγιση σε μια πλήρη Ιακωβιανή δεν χρησιμοποιεί κάποια ιδιαίτερη μεθοδολογία και πιθανόν να είναι λιγότερο αποτελεσματική απ' ό,τι η προσέγγισή της να γίνει με μια αναλυτική Ιακωβιανή. Αν οι πληροφορίες σχετικά με την πυκνότητα της Ιακωβιανής είναι διαθέσιμες, κάποιες φορές είναι δυνατό να υπολογιστεί η $\nabla_h F$ με πολύ λιγότερες από N υπολογισμούς της F . Αν η πυκνότητα είναι τέτοια ώστε η F' να μπορεί να βρεθεί σε τριγωνική μορφή, τότε ολόκληρη η διαδικασία της λύσης μπορεί να γίνει ευκολότερη με βάση αυτή τη διαδικασία.

Για προβλήματα στα οποία η σταθερά Lipschitz της F' είναι μεγάλη τότε το σφάλμα στην προσέγγιση με προς τα εμπρός διαφορές θα είναι επίσης πολύ μεγάλο. Επιπλέον, η $D_h F(x; w)$ δεν είναι γενικά ένας γραμμικός παράγοντας του w και συνήθως είναι:

$$(\nabla_h F(x))w \neq D_h F(x; w)$$

Αν $F'(x^*)$ είναι ασθενώς υπολογισμένος ή αν η σταθερά Lipschitz είναι πολύ μεγάλη, τότε η διαφορά ανάμεσά τους μπορεί να γίνει αισθητή και μια προσέγγιση με πεπερασμένες διαφορές μιας άμεσης παραγώγου, η οποία χρησιμοποιεί το μέγεθος του w , είναι πιθανό να είναι πιο ακριβής από την $(\nabla_h F(x))w$.

3.8 Το θεώρημα Kantorovich

Σε αυτή την παράγραφο θα παρουσιάσουμε το αποτέλεσμα του Kantorovich, από το οποίο προκύπτει ότι αν οι βασικές υποθέσεις «σχεδόν» ισχύουν στο x_0 τότε υπάρχει ρίζα και η μέθοδος Newton συγκλίνει τετραγωνικά στη ρίζα αυτή.

Υπόθεση 3.8.1

Έστω ότι υπάρχουν β, η και γ με $\beta\eta\gamma \leq 1/2$ και $x_0 \in R^N$ τέτοια ώστε:

1. F είναι διαφορίσιμος στο x^*

$$\|F'(x_0)^{-1}\| \leq \beta \quad \text{και} \quad \|F'(x_0)^{-1}F(x_0)\| \leq \eta$$

2. F' είναι Lipschitz συνεχής με σταθερά Lipschitz γ σε μια μπάλα με ακτίνα $\bar{r} \geq r_-$ κοντά στο x_0 όπου

$$r_- = \frac{1 - \sqrt{1 - 2\beta\eta\gamma}}{\beta\gamma} .$$

Έστω B_0 κλειστή μπάλα με ακτίνα r_- κοντά στο x_0

$$B_0 = \{x : \|x - x_0\| \leq r_-\} .$$

ΘΕΩΡΗΜΑ 3.8.1 (θεώρημα Kantorovich για τη μέθοδο της χορδής)

Έστω ότι ισχύει η υπόθεση (3.8.1) και έστω

$$\beta\eta\gamma < 1/2 \tag{3.14}$$

Τότε υπάρχει μοναδική ρίζα x^* της F στην B_0 , η επανάληψη της μεθόδου της χορδής με αρχική συνθήκη το x_0 συγκλίνει στο x^* γραμμικά με παράγοντα $\beta\gamma r_-$ και $x_n \in B_0$ για κάθε n . Επιπλέον, το x^* είναι μοναδική ρίζα της F στην μπάλα με ακτίνα

$$\min\left(\bar{r}, \frac{1 + \sqrt{1 - 2\beta\eta\gamma}}{\beta\gamma}\right)$$

κοντά στο x_0 .

ΘΕΩΡΗΜΑ 3.8.2 (θεώρημα Kantorovich για τη μέθοδο Newton-Raphson)

Έστω ότι ισχύει η υπόθεση (3.8.1). Τότε υπάρχει μοναδική ρίζα x^* της F στην B_0 , η επανάληψη της μεθόδου Newton με αρχική προσέγγιση x_0 καθώς συγκλίνει στο x^* και $x_n \in B_0$ για κάθε n . Το x^* είναι η μοναδική ρίζα της F στην μπάλα με ακτίνα

$$\min\left(r, \frac{1 + \sqrt{1 - 2\beta\eta\gamma}}{\beta\gamma}\right)$$

κοντά στο x_0 και το σφάλμα ικανοποιεί

$$\|e_n\| \leq \frac{(2\beta\eta\gamma)^{2n}}{2^n \beta\gamma} . \quad (3.15)$$

Αν $\beta\eta\gamma < 1/2$ τότε από την (3.13) προκύπτει ότι η σύγκλιση είναι τετραγωνική.

3.9 Παραδείγματα στο Matlab

Φτιάχνουμε ένα πρόγραμμα στο Matlab το οποίο εφαρμόζει τη μέθοδο Newton-Raphson.

Το πρώτο παράδειγμα είναι:

$$x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 = 1$$

$$x_1^2 + x_3^2 = 0,25$$

$$x_1^2 + x_2^2 - 4x_3 = 0$$

και το αποτέλεσμα είναι ότι η μέθοδος συγκλίνει στη ρίζα ύστερα από έξι επαναλήψεις και ότι η καλύτερη προσέγγιση της ρίζας είναι:

$$x_1 = 0.4408 \quad x_2 = 0.8660 \quad x_3 = 0.2361$$

Το δεύτερο παράδειγμα είναι:

$$x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 = 1$$

$$2x_1^2 + x_2^2 - 4x_3 = 0$$

$$3x_1^2 - 4x_2 + x_3^2 = 0$$

και το αποτέλεσμα είναι ότι η μέθοδος συγκλίνει στη ρίζα ύστερα από πέντε επαναλήψεις και ότι η καλύτερη προσέγγιση της ρίζας είναι:

$$x_1 = 0.7852 \quad x_2 = 0.4966 \quad x_3 = 0.3699$$

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4 Βελτιστοποίηση

4.1 Το πρόβλημα

Το πρόβλημα βελτιστοποίησης χωρίς περιορισμούς είναι να ελαχιστοποιήσουμε μια πραγματικά ορισμένη συνάρτηση της $f: N$ μεταβλητών. Δηλαδή να βρούμε ένα τοπικό ελάχιστο, ένα σημείο x τέτοιο ώστε

$$f(x^*) \leq f(x) \text{ για κάθε } x \text{ κοντά στο } x^*. \quad (4.1)$$

Είναι σύνηθες να εκφράζουμε αυτό το πρόβλημα ως

$$\min_x f(x) \quad (4.2)$$

ή να λέμε ότι ψάχνουμε τη λύση του προβλήματος $\min f$. Η συμφωνία είναι ότι η σχέση (4.1) σημαίνει ότι ψάχνουμε ένα τοπικό ελάχιστο. Θα αναφέρουμε την f ως την αντικειμενική συνάρτηση και το $f(x^*)$ το ελάχιστο ή την ελάχιστη τιμή.

Λέμε ότι το πρόβλημα (4.2) είναι χωρίς περιορισμούς επειδή θέτουμε προϋποθέσεις στις ανεξάρτητες μεταβλητές x και επειδή υποθέτουμε ότι η f ορίζεται για κάθε x .

Το πρόβλημα του τοπικού ελαχίστου είναι λιγότερο δύσκολο από το πρόβλημα ολικού ελαχίστου στο οποίο ψάχνουμε ένα ολικό ελάχιστο, δηλαδή ένα σημείο x^* τέτοιο ώστε

$$f(x^*) \leq f(x) \text{ για κάθε } x. \quad (4.3)$$

Το υπό περιορισμούς πρόβλημα βελτιστοποίησης είναι να ελαχιστοποιήσουμε μια συνάρτηση f πάνω σε ένα σύνολο $U \subset R^N$. Ένα τοπικό ελάχιστο είναι ένα $x^* \in U$ τέτοιο ώστε

$$f(x^*) \leq f(x) \text{ για κάθε } x \in U \text{ κοντά στο } x^*. \quad (4.4)$$

Παρόμοια με το (4.2) το εκφράζουμε ως

$$\min_{x \in U} f(x) \quad (4.5)$$

ή λέμε ότι ψάχνουμε τη λύση του προβλήματος $\min_U f$. Ένα ολικό ελάχιστο είναι ένα σημείο $x^* \in U$ τέτοιο ώστε

$$f(x^*) \leq f(x) \text{ για κάθε } x \in U. \quad (4.6)$$

Έχοντας θέσει ένα τέτοιο πρόβλημα μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε τις κλασσικές μεθόδους που απαιτούν την ομαλότητα της f . Αυτές οι μέθοδοι μπορεί να αποτύχουν αν η αντικειμενική συνάρτηση παρουσιάζει ασυνέχειες ή ανωμαλίες. Τέτοιου είδους μη ομαλότητα είναι συνήθης και μπορεί να προκληθεί για παράδειγμα από σφάλμα στρογγυλοποίησης σε εσωτερικούς υπολογισμούς για την f , όταν χρησιμοποιούμε πιθανοθεωρητικά μοντέλα για την f ή από τη χρήση πειραματικών δεδομένων για την f .

4.2 Σημειογραφία

Σε αυτό το κεφάλαιο τα διανύσματα θα θεωρούνται διανύσματα στήλες. Το διάνυσμα x^* θα συμβολίζει μια λύση, το x θα συμβολίζει μια πιθανή λύση και η ακολουθία $\{x_k\}_{k \geq 0}$ θα συμβολίζει μια ακολουθία προσεγγίσεων. Θα αναφερόμαστε στο x_0 ως την αρχική επανάληψη. Το x_0 κάποιες φορές θα ονομάζεται η αρχική εικασία. Θα συμβολίζουμε το i -οστό στοιχείο ενός διανύσματος x με $(x)_i$ και το i -οστό στοιχείο της x_k με $(x_k)_i$. Σπάνια θα αναφέρουμε μεμονωμένα στοιχεία ενός διανύσματος. Το $\frac{\partial f}{\partial x_i}$ θα συμβολίζει τη μερική παράγωγο της f ως προς το $(x)_i$. Η σχέση $e = x - x^*$ θα συμβολίζει το σφάλμα, η σχέση $e_n = x_n - x^*$ θα συμβολίζει το σφάλμα στην n -οστή επανάληψη και $B(r)$ θα είναι μπάλα με ακτίνα r γύρω από το x^* , δηλαδή

$$B(r) = \{x : \|e\| < r\}$$

Για $x \in R^N$ είναι $\nabla f(x) \in R^N$ η κλίση, δηλαδή το διάνυσμα των πρώτων παραγώγων της f , και δίνεται από τον τύπο:

$$\nabla f(x) = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}, \frac{\partial f}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial f}{\partial x_N} \right)$$

όταν αυτή υπάρχει.

Θα είναι $\nabla^2 f$ ο Εσσιανός πίνακας της f , δηλαδή ο πίνακας με τις δεύτερες παραγώγους

$$(\nabla^2 f)_{ij} = \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}$$

όταν αυτή υπάρχει.

Ας σημειώσουμε ότι η $\nabla^2 f$ είναι η Ιακωβιανή της ∇f . Αν η f είναι συνεχής και δυο φορές παραγωγίσιμη τότε ο Εσσιανός πίνακας είναι συμμετρικός, δηλαδή $(\nabla^2 f)_{ij} = (\nabla^2 f)_{ji}$, ως προς την ισότητα των μερικών παραγώγων.

Σε αυτό το κεφάλαιο θα χρησιμοποιούμε συχνά την Ευκλείδεια νόρμα η οποία δίνεται από τον τύπο:

$$\|x\| = \sqrt{\sum_{i=1}^N (x_i)^2} .$$

Η νόρμα ενός πίνακα θα προκύπτει από την Ευκλείδεια νόρμα και θα συμβολίζεται με

$$\|A\| = \max_{x \neq 0} \frac{\|A_x\|}{\|x\|} .$$

Ορισμός 4.2.1

Ένας $N \times N$ πίνακας A είναι θετικά ημιορισμένος αν $x^T A x \geq 0$ για όλα τα $x \in R^N$. Ο A είναι θετικά ορισμένος αν $x^T A x > 0$ για όλα τα $x \in R^N$, $x \neq 0$. Αν ο A έχει θετικές και αρνητικές ιδιοτιμές τότε λέμε ότι ο A είναι αόριστος.

ΘΕΩΡΗΜΑ 4.2.1

Έστω f συνεχής και δυο φορές παραγωγίσιμη σε μια γειτονιά ενός τμήματος μιας γραμμής ανάμεσα στα σημεία x^* , $x = x^* + e \in R^N$. Τότε:

$$f(x) = f(x^*) + \int_0^1 \nabla f(x^* + te)^T e dt$$

και

$$\nabla f(x) = \nabla f(x^*) + \int_0^1 \nabla^2 f(x^* + te) e dt .$$

ΘΕΩΡΗΜΑ 4.2.2

Έστω f συνεχής και δυο φορές παραγωγίσιμη σε μια περιοχή ενός σημείου $x^* \in R^N$. Τότε για $e \in R^N$ και $\|e\|$ αρκετά μικρό ισχύει

$$\nabla f(x^*) = 0 . \tag{4.7}$$

4.3 Απαραίτητες Υποθέσεις

Έστω ότι η f είναι συνεχής και διπλά παραγωγίσιμη. Θα χρησιμοποιήσουμε το θεώρημα Taylor με ένα απλό τρόπο για να δείξουμε ότι η κλίση της f μηδενίζεται σε ένα τοπικό ελάχιστο και ότι ο Εσσιανός πίνακας είναι θετικά ημιορισμένος. Αυτές είναι οι αναγκαίες συνθήκες για να είναι βέλτιστο σημείο το x^* .

Οι απαραίτητες υποθέσεις σχετίζονται με (4.1) με μια μη γραμμική εξίσωση και μας επιτρέπουν να χρησιμοποιήσουμε γρήγορους αλγορίθμους για μη γραμμικές εξισώσεις έτσι ώστε να υπολογίσουμε τα τοπικά ελάχιστα. Ένα πρώτο σημαντικό βήμα για την κατασκευή του αλγορίθμου για ένα νέο πρόβλημα βελτιστοποίησης είναι ο ορισμός των απαραίτητων υποθέσεων. Φυσικά, η κλίση μηδενίζεται στο τοπικό ελάχιστο και η εφαρμογή των μη γραμμικών εξισώσεων είναι περιορισμένη σε μια γειτονιά του τοπικού ελαχίστου.

ΘΕΩΡΗΜΑ 4.3.1

Έστω η f συνεχής και δυο φορές παραγωγίσιμη και έστω x^* ένα τοπικό ελάχιστο της f . Τότε

$$\nabla f(x^*) = 0$$

Επίσης η $\nabla^2 f(x^*)$ είναι θετικά ημιορισμένη.

ΑΠΟΔΕΙΞΗ

Έστω δεδομένο $u \in R^N$. Από το θεώρημα Taylor προκύπτει ότι για κάθε πραγματικό t αρκετά μικρό ισχύει ότι

$$f(x^* + tu) = f(x^*) + t\nabla f(x^*)^T u + \frac{t^2}{2} u^T \nabla^2 f(x^*) u + o(t^2)$$

Αφού το x^* είναι ένα τοπικό ελάχιστο πρέπει για αρκετά μικρό t να ισχύει

$$0 \leq f(x^* + tu) - f(x^*)$$

και κατά συνέπεια

$$\nabla f(x^*)^T u + \frac{t}{2} u^T \nabla^2 f(x^*) u + o(t) \geq 0 \quad (4.8)$$

για κάθε t αρκετά μικρό και για κάθε $u \in R^N$. Έτσι αν θέσουμε $t=0$ και $u = -\nabla f(x^*)$ παίρνουμε

$$\|\nabla f(x^*)\|^2 = 0.$$

Για το δεύτερο μέρος του θεωρήματος θέτοντας $\nabla f(x^*) = 0$, διαιρώντας με t και θέτοντας $t = 0$ στην (4.8) παίρνουμε

$$\frac{1}{2}u^T \nabla^2 f(x^*)u \geq 0$$

για κάθε $u \in R^N$. Με την τελευταία σχέση ολοκληρώνεται η απόδειξη. \square

Η υπόθεση ότι $\nabla f(x^*) = 0$ ονομάζεται *απαραίτητη υπόθεση πρώτης τάξης* και το σημείο που την ικανοποιεί ονομάζεται *στάσιμο ή κρίσιμο σημείο*.

4.4 Επαρκείς Υποθέσεις

Το κρίσιμο σημείο δεν χρειάζεται να είναι ένα τοπικό ελάχιστο. Για παράδειγμα η συνάρτηση $\phi(t) = -t^4$ ικανοποιεί τις απαραίτητες υποθέσεις στο σημείο 0, το οποίο είναι τοπικό μέγιστο της ϕ . Για να βρούμε ένα τοπικό ελάχιστο πρέπει η δεύτερη παράγωγος να είναι μη μηδενική. Αυτό βέβαια από μόνο του δεν είναι επαρκές (ας σκεφτούμε την $\phi(t) = t^3$) και μόνο αν η δεύτερη παράγωγος είναι αυστηρά θετική μπορούμε να είμαστε απολύτως σίγουροι. Αυτές είναι οι επαρκείς υποθέσεις για βελτιστοποίηση.

ΘΕΩΡΗΜΑ 4.4.1

Έστω f συνεχής και δυο φορές παραγωγίσιμη σε μια περιοχή του x^* . Ας υποθέσουμε ότι $\nabla f(x^*) = 0$ και ότι $\nabla^2 f(x^*)$ είναι θετικά ορισμένη. Τότε το x^* είναι ένα τοπικό ελάχιστο της f .

ΑΠΟΔΕΙΞΗ

Έστω $0 \neq u \in R^N$. Για αρκετά μικρό t έχουμε

$$\begin{aligned} f(x^* + tu) &= f(x^*) + t \nabla f(x^*)^T u + \frac{t^2}{2} u^T \nabla^2 f(x^*) u + o(t^2) \\ &= f(x^*) + \frac{t^2}{2} u^T \nabla^2 f(x^*) u + o(t^2) \end{aligned}$$

Κατά συνέπεια, αν $\lambda > 0$ είναι η ελάχιστη ιδιοτιμή της $\nabla^2 f(x^*)$ έχουμε

$$f(x^* + tu) - f(x^*) \geq \frac{\lambda}{2} \|tu\|^2 + o(t^2) > 0$$

για t αρκετά μικρό. Οπότε το x^* είναι ένα τοπικό ελάχιστο. \square

4.5 Τετραγωνικής μορφής συναρτήσεις

Τα πιο απλά προβλήματα βελτιστοποίησης είναι αυτά με *τετραγωνικής μορφής συναρτήσεις*. Εδώ

$$f(x) = -x^T b + \frac{1}{2} x^T H x. \quad (4.9)$$

Μπορούμε, χωρίς βλάβη της γενικότητας, να υποθέσουμε ότι ο πίνακας H είναι συμμετρικός επειδή

$$x^T H x = x^T \left(\frac{H + H^T}{2} \right) x. \quad (4.10)$$

Οι τετραγωνικές συναρτήσεις αποτελούν τη βάση για τους περισσότερους αλγόριθμους που θα δούμε σε αυτό το κομμάτι, με τους οποίους προσεγγίζουμε μια αντικειμενική συνάρτηση f με ένα μοντέλο τετραγωνικής μορφής και ελαχιστοποιούμε το μοντέλο αυτό. Σε αυτό το κομμάτι συζητάμε κάποια στοιχειώδη θέματα στην περιοχή της βελτιστοποίησης τετραγωνικών μορφών. Προφανώς

$$\nabla^2 f(x) = H$$

για όλα x . Από τη συμμετρία του H προκύπτει ότι

$$\nabla f(x) = -b + Hx$$

Ορισμός 4.5.1

Η συνάρτηση f τετραγωνικής μορφής στην (4.9) είναι *κυρτή* αν ο H είναι θετικά ημιορισμένος.

• Θετικά ορισμένος Εσσιανός πίνακας

Από τις απαραίτητες υποθέσεις για βελτιστοποίηση προκύπτει ότι αν μια συνάρτηση f τετραγωνικής μορφής έχει ένα τοπικό ελάχιστο x^* , τότε ο H είναι θετικά ημιορισμένος και

$$Hx^* = b. \quad (4.11)$$

Πιο συγκεκριμένα, αν ο H είναι συμμετρικός και θετικά ορισμένος (και κατά συνέπεια ομαλός), ο μοναδικό ολικό ελάχιστο είναι η λύση του γραμμικού συστήματος (4.11).

Αν ο H είναι ένας πυκνός πίνακας και η διάσταση N του προβλήματος δεν είναι πολύ μεγάλη είναι λογικό να λύσουμε το (4.11) με την παραγοντοποίηση Cholesky του H

$$H = LL^T,$$

όπου ο L είναι ένας ομαλός κάτω τριγωνικός πίνακας με θετική διαγώνιο και κατά συνέπεια το (4.11) λύνεται με μια προς τα εμπρός και μια προς τα πίσω αντικατάσταση. Αν ο H είναι αόριστος, τότε η παραγοντοποίηση Cholesky δεν θα είναι εφικτή και οι βασικές υποθέσεις δεν θα πληρούνται επειδή ο υπολογισμός της διαγώνιου του H θα απαιτεί μια πραγματική τετραγωνική ρίζα ενός αρνητικού αριθμού ή διαίρεση με το μηδέν.

Αν η διάσταση N του προβλήματος είναι πολύ μεγάλη, ο H είναι αραιός ή ο H δεν μπορεί να παραστεί ως πίνακας τότε μια πιο αποτελεσματική προσέγγιση είναι η μέθοδος των συζυγών κλίσεων. Η μέθοδος αυτή απαιτεί μόνο πολλαπλασιασμούς πίνακα επί διάνυσμα. Η κατασκευή του αλγορίθμου χρησιμοποιεί το x όχι μόνο ως μεταβλητή εισόδου αλλά και ως μεταβλητή εξόδου. Στην είσοδο το x περιέχει και το x_0 το οποίο είναι η αρχική επανάληψη και στην έξοδο περιέχει την προσεγγιστική λύση. Τερματίζουμε τις επαναλήψεις αν το σχετικό υπόλοιπο είναι αρκετά μικρό, δηλαδή

$$\|b - Hx\| \leq \varepsilon \|b\|$$

ή αν έχουν γίνει πολλές επαναλήψεις, όπως είδαμε και στο προηγούμενο κεφάλαιο.

ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΣ 4.5.1 $cg(x, b, H, \varepsilon, k_{\max})$

$$1. r = b - Hx, \rho_0 = \|r\|^2, k = 1$$

$$2. \text{Καθώς } \sqrt{\rho_{k-1}} > \varepsilon \|b\| \text{ και } k < k_{\max} \text{ κάνε}$$

$$(\alpha) \text{ αν } k = 1 \text{ τότε } p = r$$

αλλιώς

$$\beta = \rho_{k-1} / \rho_{k-2} \text{ και } p = r + \beta p$$

$$(\beta) w = Hp$$

$$(\gamma) \alpha = \rho_{k-1} / p^T w$$

$$(\delta) x = x + \alpha p$$

$$(\epsilon) r = r - \alpha w$$

$$(\sigma\tau) \rho_k = \|r\|^2$$

$$(\zeta) k = k + 1$$

Ας σημειώσουμε ότι αν ο H δεν είναι συμμετρικός και θετικά ορισμένος ο παρονομαστής στο $\alpha = \rho_{k-1}/p^T w$ μπορεί να μηδενιστεί με αποτέλεσμα την κατάρρευση της επανάληψης.

Η μέθοδος των συζυγών κλίσεων ελαχιστοποιεί την f πάνω σε μια αύξουσα ακολουθία κλειστών υποσυνόλων του R^N . Έχουμε ότι

$$f(x_k) \leq f(x) \text{ για κάθε } x \in x_0 + K_k$$

όπου K_k είναι το υποσύνολο Krylov

$$K_k = \text{span}(r_0, Hr_0, \dots, H^{k-1}r_0) \quad \text{για } k \geq 1.$$

Ενώ σύμφωνα με τη θεωρία η επανάληψη πρέπει να συγκλίνει μετά από N επαναλήψεις και η μέθοδος των συζυγών κλίσεων μπορεί να θεωρηθεί σαν άμεση λύση το N είναι στην πραγματικότητα πολύ μεγάλο για τα προβλήματα που προορίζεται. Σαν μια επαναληπτική μέθοδο η απόδοση του αλγορίθμου της μεθόδου των συζυγών κλίσεων εξαρτάται από το b και τη φασματική ακτίνα του H . Μια γενική προσέγγιση σύγκλισης είναι

$$\|x_k - x^*\|_H \leq 2 \|x_0 - x^*\|_H \left[\frac{\sqrt{\kappa(H)} - 1}{\sqrt{\kappa(H)} + 1} \right]^k. \quad (4.12)$$

Στην (4.12) η νόρμα του H είναι ένα δάνυσμα που ορίζεται από

$$\|u\|_H^2 = u^T H u$$

για ένα συμμετρικό και θετικά ορισμένο πίνακα. $\kappa(H)$ είναι ο l^2 δείκτης κατάστασης

$$\kappa(H) = \|H\| \|H\|^{-1}$$

Για συμμετρικό και θετικά ορισμένο πίνακα H

$$\kappa(H) = \lambda_l \lambda_s^{-1}$$

όπου λ_l και λ_s είναι η ελάχιστη και η μέγιστη ιδιοτιμή του H . Γεωμετρικά, $\kappa(H)$ είναι μεγάλο αν τα ελλειψοειδή επίπεδα της επιφάνειας της f είναι πολύ μακριά από τα σφαιρικά.

Η μέθοδος των συζυγών κλίσεων θα είναι πολύ καλύτερη αν $\kappa(H)$ είναι κοντά στο l και μπορεί να μην είναι καλή αν το $\kappa(H)$ είναι μεγάλο. Η επίδοση της επανάληψης μπορεί να βελτιωθεί με μετατροπή του (4.11) σε ένα πίνακα με

ιδιοτιμές κοντά στο l . Ας υποθέσουμε ότι ο M είναι ένας συμμετρικός και θετικά ορισμένος πίνακας και μια πολύ καλή προσέγγιση του στον H^{-1} τέτοια ώστε

$$\kappa(M^{1/2}HM^{1/2})$$

είναι πολύ μικρότερο από το $\kappa(H)$. Σε αυτή την περίπτωση από την (4.12) θα προέκυπτε ότι πολύ λίγες επαναλήψεις της μεθόδου των συζυγών κλίσεων μπορεί να χρειάζοντουσαν για να λυθεί το

$$M^{1/2}HM^{1/2}z = M^{1/2}b \quad (4.13)$$

αντί να λυθεί το (4.11). Επίσης, η λύση x^* του (4.11) θα μπορούσε να επισκιαστεί από τη λύση z^* του (4.13) με

$$x = M^{1/2}z. \quad (4.14)$$

Στην πράξη η τετραγωνική ρίζα του πίνακα M που έχει υποστεί μετατροπή δεν χρειάζεται να υπολογιστεί. Ο αλγόριθμος χρησιμοποιώντας τις ίδιες προϋποθέσεις με το cg είναι

ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΣ 4.5.2 $\text{pcg}(x, b, H, M, \varepsilon, k \max)$

1. $r = b - Hx, \rho_0 = \|r\|^2, k = 1$

2. Καθώς $\sqrt{\rho_{k-1}} > \varepsilon \|b\|$ και $k < k \max$ κάνε

(α) $z = Mr$

(β) $\tau_{k-1} = z^T r$

(γ) αν $k = 0$ τότε $\beta = 0$ και $p = z$

αλλιώς

$$\beta = \tau_{k-1} / \tau_{k-2}, p = z + \beta p$$

(δ) $w = Hp$

(ε) $\alpha = \tau_{k-1} / p^T w$

(στ) $x = x + \alpha p$

(ζ) $r = r - \alpha w$

(η) $\rho_k = r^T r$

(θ) $k = k + 1$

Ας σημειώσουμε ότι τα γινόμενα του M με τα διανύσματα στον R^N είναι απαραίτητα και μια αναπαράσταση του πίνακα M δεν χρειάζεται να αποθηκευτεί.

- **Μη ορισμένος Εσσιανός πίνακας**

Αν ο H είναι μη ορισμένος από τις απαραίτητες υποθέσεις, από το θεώρημα 4.3.1 προκύπτει ότι δεν θα υπάρχει τοπικό ελάχιστο. Ακόμα και αυτό να ισχύει, είναι σημαντικό να καταλάβουμε κάποιες ιδιότητες των τετραγωνικών προβλημάτων με μη ορισμένους Εσσιανούς πίνακες όταν κατασκευάζουμε αλγορίθμους με αρχικές επαναλήψεις πολύ μακριά από τοπικούς ελαχιστοποιητές.

Αν

$$u^T H u < 0$$

λέμε ότι το u είναι μια κατεύθυνση αρνητικής κυρτότητας. Αν το u είναι μια κατεύθυνση αρνητικής κυρτότητας τότε η $f(x+tu)$ θα συγκλίνει στο $-\infty$ καθώς το $t \rightarrow \infty$.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5

Τοπική σύγκλιση της μεθόδου Newton

Με τον όρο τοπική σύγκλιση της μεθόδου εννοούμε ότι απαιτείται η αρχική επανάληψη x_0 να είναι κοντά σε ένα τοπικό ελάχιστο x^* στο οποίο ισχύουν οι απαραίτητες υποθέσεις (§4.4).

Σε αυτό το κεφάλαιο οι τύποι σύγκλισης είναι ίδιοι (§2.2).

5.1 Οι βασικές υποθέσεις

Υποθέτουμε ότι τα τοπικά ελάχιστα ικανοποιούν τις βασικές υποθέσεις, οι οποίες όπως οι βασικές υποθέσεις για τις μη γραμμικές εξισώσεις έχουν σαν αποτέλεσμα ότι η μέθοδος Newton συγκλίνει q-τετραγωνικά στο x^* . Σε όλο το κεφάλαιο θα υποθέτουμε ότι η f και το x^* θα ικανοποιούν την παρακάτω υπόθεση.

ΥΠΟΘΕΣΗ 5.1.1

1. Η f είναι δυο φορές παραγωγίσιμη και

$$\|\nabla^2 f(x) - \nabla^2 f(y)\| \leq \gamma \|x - y\| \quad (5.1)$$

2. $\nabla f(x^*) = 0$

3. $\nabla^2 f(x^*)$ είναι θετικά ορισμένος.

Κάποιες φορές λέμε ότι η f είναι δυο φορές *Lipschitz* συνεχής παραγωγίσιμη με σταθερά *Lipschitz* γ με την έννοια ότι το 1 από την υπόθεση 5.1.1 ισχύει.

Αν ισχύουν οι βασικές υποθέσεις τότε από το θεώρημα 4.4.1 προκύπτει ότι το x^* είναι ένα τοπικό ελάχιστο της f . Επίσης, οι βασικές υποθέσεις για μη γραμμικές εξισώσεις ισχύουν για το σύστημα $\nabla f(x) = 0$. Αυτό σημαίνει ότι όλα τα αποτελέσματα της τοπικής σύγκλισης για μη γραμμικές εξισώσεις μπορούν να εφαρμοστούν σε προβλήματα βελτιστοποίησης τα οποία δεν έχουν περιορισμούς.

5.2 Η μέθοδος Newton

Θα ορίσουμε τις επαναληπτικές μεθόδους με βάση τη μεταφορά από μια τρέχουσα επανάληψη x_c σε μια νέα x_+ . Σε αυτή την περίπτωση το σύστημα των μη γραμμικών εξισώσεων, για παράδειγμα x_+ είναι η ρίζα του τοπικού γραμμικού μοντέλου της F γύρω από το x_c

$$M_c(x) = F(x_c) + F'(x_c)(x - x_c)$$

Η λύση της $M_c(x_+) = 0$ οδηγεί στην έκφραση για την επανάληψη της μεθόδου Newton

$$x_+ = x_c - F'(x_c)^{-1}F(x_c). \quad (5.2)$$

Θα μπορούσαμε να πούμε ότι η μέθοδος Newton για βελτιστοποίηση χωρίς περιορισμούς είναι η μέθοδος για μη γραμμικές εξισώσεις αν την εφαρμόσουμε στο $\nabla f(x) = 0$. Ενώ κάτι τέτοιο θα ήταν τεχνικά σωστό αν το x_c είναι κοντά σε ένα ελάχιστο, είναι τελείως λάθος αν το x_c είναι κοντά σε ένα μέγιστο. Ένας πιο ακριβής τρόπος για να εκφράσουμε αυτή τη σκέψη είναι να πούμε ότι το x_+ είναι ένα ελάχιστο στο τοπικό μοντέλο τετραγωνικής μορφής της f κοντά στο x_c .

$$m_c(x) = f(x_c) + \nabla f(x_c)^T(x - x_c) + \frac{1}{2}(x - x_c)^T \nabla^2 f(x_c)(x - x_c) \quad .$$

Αν ο $\nabla^2 f(x_c)$ είναι θετικά ορισμένος, τότε το ελάχιστο x_+ της m_c είναι η μοναδική λύση του $\nabla m_c(x) = 0$. Κατά συνέπεια

$$0 = \nabla m_c(x_+) = \nabla f(x_c) + \nabla^2 f(x_c)(x_+ - x_c) \quad .$$

Γι αυτό

$$x_+ = x_c - (\nabla^2 f(x_c))^{-1} \nabla f(x_c) \quad (5.3)$$

η οποία είναι ίδια με την (5.2) με τη διαφορά ότι η F έχει αντικατασταθεί με την ∇f και η F' με τον $\nabla^2 f$. Φυσικά το x_+ δεν υπολογίζεται με τη δημιουργία του αντίστροφου πίνακα. Μάλλον, δοθέντος του x_c η κλίση $\nabla f(x_c)$ υπολογίζεται και η γραμμική εξίσωση

$$\nabla^2 f(x_c)s = -\nabla f(x_c) \quad (5.4)$$

λύνεται για βήμα s . Τότε η (5.3) γίνεται $x_+ = x_c + s$.

Παρόλα, αυτά αν το u_c είναι μακριά από ένα ελάχιστο, τότε ο $\nabla^2 f(u_c)$ θα μπορούσε να μην έχει αρνητικές ιδιοτιμές, το τετραγωνικό μοντέλο δεν θα έχει τοπικά ελάχιστα και M_c , το τοπικό γραμμικό μοντέλο της ∇f κοντά στο u_c , θα μπορούσε να έχει ρίζες οι οποίες αντιστοιχούν στο τοπικό μέγιστο ή στα σημεία που αλλάζει η κυρτότητα του m_c . Επίσης, πρέπει να προσέχουμε όταν κάνουμε την αντιστοίχιση ανάμεσα στη μέθοδο Newton ελαχιστοποίησης και στη μέθοδο Newton για μη γραμμικές εξισώσεις σε περιοχές μακριά από το ελάχιστο. Σε αυτό το κεφάλαιο θα υποθέσουμε ότι είμαστε αρκετά κοντά σε ένα τοπικό ελάχιστο όπου ισχύουν οι βασικές υποθέσεις για τοπική βελτιστοποίηση για να προκύψουν οι βασικές υποθέσεις για μη γραμμικές εξισώσεις.

Λήμμα 5.2.1

Έστω ότι ισχύουν οι βασικές υποθέσεις. Τότε υπάρχει $\delta > 0$ τέτοιο ώστε για όλα τα $x \in B(\delta)$

$$\|\nabla^2 f(x)\| \leq 2\|\nabla^2 f(x^*)\| \quad (5.5)$$

$$\|\nabla f(x_n)\| \leq \tau_r \|\nabla f(x_0)\| \quad (5.6)$$

και

$$\|(\nabla^2 f(x^*))^{-1}\|^{-1} \|e\|/2 \leq 2\|\nabla f(x)\| \leq 2\|\nabla^2 f(x^*)\| \|e\|. \quad (5.7)$$

Σαν ένα πρώτο παράδειγμα, θα αποδείξουμε την τοπική σύγκλιση της μεθόδου Newton.

ΘΕΩΡΗΜΑ 5.2.1

Έστω ότι ισχύουν οι βασικές υποθέσεις (§5.1). Τότε υπάρχουν $K > 0$ και $\delta > 0$ τέτοια ώστε αν $x_c \in B(\delta)$, η επανάληψη της μεθόδου Newton για το x_c που δίνεται από την (5.3) να ικανοποιεί την ανίσωση

$$\|e_+\| \leq K \|e_c\|^2. \quad (5.8)$$

ΑΠΟΔΕΙΞΗ

Έστω δ αρκετά μικρό ώστε τα συμπεράσματα του λήμματος 5.2.1 ισχύουν. Από το θεώρημα 4.2.1 ισχύει

$$e_+ = e_c - \nabla^2 f(x_c)^{-1} \nabla f(x_c) = (\nabla^2 f(x_c))^{-1} \int_0^1 (\nabla^2 f(x_c) - \nabla^2 f(x^* + te_c)) e_c dt.$$

Από το λήμμα 5.2.1 και τη συνέχεια κατά Lipschitz του $\nabla^2 f$,

$$\|e_+\| \leq (2\|(\nabla^2 f(x^*))^{-1}\|) \gamma \|e_c\|/2.$$

Αυτή η σχέση ολοκληρώνει την απόδειξη της (5.8) θέτοντας $K = \gamma \|(\nabla^2 f(x^*))^{-1}\|$.

□

Όπως και στις μη γραμμικές εξισώσεις, από το θεώρημα 5.2.1 προκύπτει ότι η ολοκληρωμένη επανάληψη είναι τοπικά τετραγωνικά συγκλίνουσα.

ΘΕΩΡΗΜΑ 5.2.2 (θεώρημα τετραγωνικής σύγκλισης)

Έστω ότι ισχύουν οι βασικές υποθέσεις (§5.1). Τότε υπάρχει $\delta > 0$ τέτοιο ώστε αν $x_0 \in B(\delta)$ τότε η επανάληψη Newton

$$x_{n+1} = x_n - (\nabla^2 f(x_n))^{-1} \nabla f(x_n)$$

συγκλίνει τετραγωνικά στο x^* .

ΑΠΟΔΕΙΞΗ

Έστω δ αρκετά μικρό ώστε τα συμπεράσματα του θεωρήματος 5.2.1 ισχύουν. Μειώνουμε το δ , αν χρειάζεται, τόσο ώστε $K\delta = \eta < 1$. Τότε αν $n \geq 0$ και $x_n \in B(\delta)$, από το θεώρημα 5.2.1 προκύπτει ότι

$$\|e_{n+1}\| \leq K \|e_n\|^2 \leq \eta \|e_n\| < \|e_n\| \quad (5.9)$$

και συνεπώς $x_{n+1} \in B(\eta\delta) \subset B(\delta)$. Γι αυτό αν $x_n \in B(\delta)$ οι επαναλήψεις μπορούν να συνεχιστούν. Αφού από υπόθεση $x_0 \in B(\delta)$, ολόκληρη η ακολουθία $\{x_n\} \subset B(\delta)$. Από τη σχέση (5.9) προκύπτει ότι $x_n \rightarrow x^*$ τετραγωνικά. \square

Η μέθοδος Newton, από τη μεριά της τοπικής σύγκλισης, είναι ακριβώς ίδια με τη μέθοδο επίλυσης των μη γραμμικών εξισώσεων η οποία εφαρμόζεται στο πρόβλημα εύρεσης των ριζών της ∇f . Εκμεταλλευόμαστε την επιπλέον δομή του θετικού ορισμού του $\nabla^2 f$ με μια αναφορά στη μέθοδο Newton βασιζόμενοι στην παραγοντοποίηση Cholesky

$$\nabla^2 f(u) = LL^T \quad (5.10)$$

όπου ο L είναι ένας κάτω τριγωνικός πίνακας με θετική διαγώνιο.

Τερματίζουμε τις επαναλήψεις όταν η ∇f είναι αρκετά μικρή. Ένα φυσιολογικό κριτήριο είναι να απαιτήσουμε μια σχετική μείωση της $\|\nabla f\|$ και να τερματίσουμε τις επαναλήψεις όταν

$$\|\nabla f(x_n)\| \leq \tau_r \|\nabla f(x_0)\| \quad (5.11)$$

όπου $\tau_r \in (0,1)$ είναι η επιθυμητή μείωση στη νόρμα της κλίσης. Παρόλα αυτά, αν $\|\nabla f(x_0)\|$ είναι πολύ μικρή μπορεί να μην ικανοποιείται η (5.11) στην αριθμητική της μηχανής και ένας αλγόριθμος βασιζόμενος αποκλειστικά στην (5.11) μπορεί να νη τερματίσει ποτέ. Μια λύση στο πρόβλημα του μη τερματισμού των επαναλήψεων είναι να επικαλεστούμε το κριτήριο του σχετικού σφάλματος και να τερματίσουμε τις επαναλήψεις χρησιμοποιώντας ένα συνδυασμό των σχετικών και απόλυτων μέτρων της ∇f , δηλαδή όταν

$$\|\nabla f(x_n)\| \leq \tau_r \|\nabla f(x_0)\| + \tau_\alpha. \quad (5.12)$$

Στη σχέση (5.12) ο όρος τ_α είναι η ανοχή του απόλυτου σφάλματος. Γι αυτό το κριτήριο τερματισμού των επαναλήψεων σαν είσοδος σε πολλούς αλγορίθμους θα είναι ένα διάνυσμα $\tau = (\tau_r, \tau_\alpha)$ των σχετικών και των απόλυτων υπολοίπων.

ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΣ 5.2.1 newton(x, f, τ)

1. $r_0 = \|\nabla f(x)\|$

2. Καθώς $\|\nabla f(x)\| > \tau_r r_0 + \tau_\alpha$ κάνε

(α) Υπολόγισε $\nabla^2 f(x)$

(β) Παραγώγισε $\nabla^2 f(x) = LL^T$

(γ) Λύσε $LL^T s = -\nabla f(x)$

(δ) $x = x + s$

(ε) Υπολόγισε $\nabla f(x)$.

Ο παραπάνω αλγόριθμος δεν είναι εντελώς ικανοποιήσιμος. Η τιμή της συνάρτησης f δεν χρησιμοποιείται ποτέ και το βήμα 2β θα αποτύχει αν ο $\nabla^2 f$ δεν είναι θετικά ορισμένος. Αυτή η αποτυχία, στην πραγματικότητα, θα μπορούσε να είναι και ένα σημάδι ότι βρισκόμαστε πολύ μακριά από ένα ελάχιστο έτσι ώστε η μέθοδος Newton να μπορεί να εφαρμοστεί. Παρόλα αυτά, αν είμαστε αρκετά κοντά σε ένα τοπικό ελάχιστο όλα θα είναι κανονικά και θα μπορούμε να εφαρμόσουμε τα αποτελέσματα από τις μη γραμμικές εξισώσεις.

5.3 Σφάλματα στη συνάρτηση, στην κλίση και στον Εσσιανό πίνακα

Όταν υπάρχουν σφάλματα στη συνάρτηση και στην κλίση το πρόβλημα της βελτιστοποίησης χωρίς περιορισμούς γίνεται πιο δύσκολο από το πρόβλημα εύρεσης της ρίζας.

Μια σημαντική διαφορά από την περίπτωση των μη γραμμικών εξισώσεων προκύπτει μόνο αν οι συναρτήσεις είναι διαθέσιμες και οι κλίσεις και οι Εσσιανοί πίνακες πρέπει να υπολογιστούν με τη μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών. Μια απλή ανάλυση μιας διάστασης αρκεί για να δοθεί κάποια εξήγηση στον παραπάνω προβληματισμό. Ας υποθέσουμε ότι μπορούμε να υπολογίσουμε την f μόνο προσεγγιστικά. Αν υπολογίσουμε $\hat{f} = f + \varepsilon_f$ αντί για την f , τότε μια προς τα εμπρός διαφορά κλίσης με διαφορά προσάυξης h

$$D_h f(x) = \frac{\hat{f}(x+h) - \hat{f}(x)}{h}$$

διαφέρει από την f' κατά $O(h + \varepsilon_f/h)$ και αυτό το σφάλμα ελαχιστοποιείται αν $h = O(\sqrt{\varepsilon_f})$. Σε αυτή την περίπτωση το σφάλμα στην κλίση είναι $\varepsilon_g = O(h) = O(\sqrt{\varepsilon_f})$. Αν σε μια προς τα εμπρός διαφορά ο Εσσιανός πίνακας υπολογίζεται χρησιμοποιώντας το D_h ως μια προσέγγιση της κλίσης τότε το σφάλμα στον Εσσιανό πίνακα θα είναι

$$\Delta = O(\sqrt{\varepsilon_g}) = O(\varepsilon_f^{1/4}) \quad (5.13)$$

και η ακρίβεια στον $\nabla^2 f$ θα είναι πολύ λιγότερη από αυτή στον Ιακωβιανό πίνακα στην περίπτωση των μη γραμμικών εξισώσεων.

Αν το ε_f είναι αρκετά μεγάλο από αυτό των πράξεων μηχανής τότε από την (5.13) προκύπτει ότι χρησιμοποιώντας αριθμητικούς Εσσιανούς βασισμένους σε μια δεύτερη αριθμητική παραγωγή της συνάρτησης δεν θα είναι αρκετά ακριβής. Ακόμα και στην καλύτερη περίπτωση, όπου το ε_f είναι ίδιου μεγέθους με αυτό των πράξεων μηχανής, ο υπολογισμός του Εσσιανού με τη μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών δεν θα είναι αρκετά ακριβής και το κόστος υπολογισμού θα είναι μεγάλο αν ο Εσσιανός είναι αραιός. Αν όπως στους περισσότερους υπολογιστές σήμερα το σφάλμα μηχανής είναι περίπου 10^{-16} , από την (5.13) προκύπτει ότι ο υπολογισμός του Εσσιανού με προς τα εμπρός διαφορά θα είναι ακριβής κατά τέσσερα δεκαδικά ψηφία.

Μπορούμε να έχουμε καλύτερα αποτελέσματα με τη μέθοδο των κεντρικών διαφορών αλλά το κόστος θα είναι διπλάσιο από αυτό του υπολογισμού της συνάρτησης. Μια προσέγγιση της ∇f με τη μέθοδο των κεντρικών διαφορών είναι

$$D_h f(x) = \frac{\hat{f}(x+h) - \hat{f}(x-h)}{2h}$$

και το σφάλμα είναι $O(h^2 + \varepsilon_f/h)$, το οποίο ελαχιστοποιείται όταν $h = O(\varepsilon_f^{1/3})$ το οποίο οδηγεί σε σφάλμα στην κλίση της τάξης $\varepsilon_g = O(\varepsilon_f^{2/3})$. Οπότε, μια κεντρική διαφορά στον Εσσιανό θα έχει σφάλμα

$$\Delta = O((\varepsilon_g)^{2/3}) = O(\varepsilon_f^{4/9})$$

το οποίο είναι ουσιωδώς καλύτερο. Θα δούμε ότι η ακρίβεια στην κλίση είναι πολύ πιο σημαντική από την ακρίβεια στον Εσσιανό και ότι μια επιλογή που έχουμε είναι να υπολογίζουμε την κλίση με τη μέθοδο των κεντρικών διαφορών και τον Εσσιανό με τη μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών. Οπότε το σφάλμα της κλίσης είναι $O(\varepsilon_f^{2/3})$ και το σφάλμα του Εσσιανού είναι

$$\Delta = O(\sqrt{\varepsilon_g}) = O(\varepsilon_f^{1/3})$$

Σε πολλά προβλήματα βελτιστοποίησης είναι απαραίτητο να είναι ακριβής οι κλίσεις. Όταν αυτό συμβαίνει η αριθμητική παραγωγή για τον υπολογισμό του Εσσιανού είναι σαν τον υπολογισμό του Ιακωβιανού για μη γραμμικές εξισώσεις. Αυτή είναι μια λογική ιδέα για πολλά προβλήματα και οι προς τα εμπρός διαφορές λειτουργούν καλά με λιγότερο κόστος.

Έξυπνη εφαρμογή του υπολογισμού των διαφορών μπορεί να έχει σαν αποτέλεσμα οικονομία στον Εσσιανό, να προκύψει μια προσέγγιση μιας προς τα εμπρός διαφοράς με πολύ λιγότερους από N υπολογισμούς της ∇f .

Αν δεν ισχύει $\varepsilon_g(x_n) \rightarrow 0$ καθώς προχωράει η επανάληψη, τότε δεν μπορούμε να θεωρήσουμε ότι θα υπάρξει σύγκλιση. Για αυτό το λόγο εκτιμήσεις όπως η (5.14) συνήθως ονομάζονται αποτελέσματα τοπικής βελτίωσης. Το παρακάτω θεώρημα είναι ένα τυπικό παράδειγμα.

ΘΕΩΡΗΜΑ 5.3.1

Έστω ότι ισχύουν οι βασικές υποθέσεις. Τότε υπάρχουν $\bar{K} > 0, \delta > 0$ και $\delta_1 > 0$ τέτοια ώστε αν $x_c \in B(\delta)$ και $\|\Delta(x_c)\| < \delta_1$ τότε το

$$x_+ = x_c - (\nabla^2 f(x_c) + \Delta(x_c))^{-1} (\nabla f(x_c) + \varepsilon_g(x_c))$$

μπορεί να οριστεί (δηλαδή $\nabla^2 f(x_c) + \Delta(x_c)$ είναι ομαλός) και ικανοποιεί

$$\|e_+\| \leq \bar{K} (\|e_c\|^2 + \|\Delta(x_c)\| \|e_c\| + \|\varepsilon_g(x_c)\|). \quad (5.14)$$

ΑΠΟΔΕΙΞΗ

Έστω δ αρκετά μικρό ώστε τα συμπεράσματα του λήμματος 5.2.1 και του θεωρήματος 5.2.1 να ισχύουν. Έστω

$$x_+^N = x_c - (\nabla^2 f(x_c))^{-1} \nabla f(x_c)$$

και ας σημειώσουμε ότι

$$x_+ = x_+^N + ((\nabla^2 f(x_c))^{-1} - (\nabla^2 f(x_c) + \Delta(x_c))^{-1}) \nabla f(x_c) - (\nabla^2 f(x_c) + \Delta(x_c))^{-1} \varepsilon_g(x_c).$$

Από το λήμμα 5.2.1 και το θεώρημα 5.2.1 προκύπτει ότι:

$$\bar{K} = K + 16 \left\| (\nabla^2 f(x^*))^{-1} \right\|^2 \left\| \nabla^2 f(x^*) \right\| + 4 \left\| (\nabla^2 f(x^*))^{-1} \right\|. \quad (5.15)$$

Αν

$$\left\| \Delta(x_c) \right\| \leq \left\| (\nabla^2 f(x^*))^{-1} \right\|^{-1} / 4$$

από το λήμμα 5.2.1 προκύπτει ότι

$$\left\| \Delta(x_c) \right\| \leq \left\| (\nabla^2 f(x^*))^{-1} \right\|^{-1} / 2$$

από το λήμμα του Banach έχουμε ότι ο $\nabla^2 f(x_c) + \Delta(x_c)$ είναι ομαλός και

$$\left\| (\nabla^2 f(x_c) + \Delta(x_c))^{-1} \right\| \leq 2 \left\| (\nabla^2 f(x_c))^{-1} \right\| \leq 4 \left\| (\nabla^2 f(x^*))^{-1} \right\|.$$

Οπότε

$$\left\| (\nabla^2 f(x_c))^{-1} - (\nabla^2 f(x_c) + \Delta(x_c))^{-1} \right\| \leq 8 \left\| (\nabla^2 f(x^*))^{-1} \right\|^2 \left\| \Delta(x_c) \right\|.$$

Από τα παραπάνω και από την (5.12) έχουμε

$$\left\| e_+ \right\| \leq K \left\| e_c \right\|^2 + 16 \left\| (\nabla^2 f(x^*))^{-1} \right\|^2 \left\| \nabla^2 f(x^*) \right\| \left\| \Delta(x_c) \right\| \left\| e_c \right\| + 4 \left\| (\nabla^2 f(x^*))^{-1} \right\| \left\| \varepsilon_g(x_c) \right\|.$$

Θέτοντας

$$\bar{K} = K + 16 \left\| (\nabla^2 f(x^*))^{-1} \right\|^2 \left\| \nabla^2 f(x^*) \right\| + 4 \left\| (\nabla^2 f(x^*))^{-1} \right\|$$

ολοκληρώνεται η απόδειξη. \square

Όπως και στην περίπτωση των εξισώσεων, από την (5.14) προκύπτει ότι δεν μπορούμε να ελπίζουμε ότι θα βρούμε ένα ελάχιστο με μεγαλύτερη ακρίβεια από αυτή που μπορούμε να υπολογίζουμε την ∇f . Στις περισσότερες υποθέσεις από την επανάληψη θα προκύψει ένα $\|e\|$ ίδιου μεγέθους με το ε_g . Η ταχύτητα σύγκλισης θα εξαρτηθεί από την ακρίβεια του Εσσιανού.

Το αποτέλεσμα στη μέθοδο της χορδής απεικονίζει το τελευταίο σημείο. Στη μέθοδο της χορδής υλοποιούμε και υπολογίζουμε την παραγοντοποίηση Cholesky του $\nabla^2 f(x_0)$ και χρησιμοποιούμε αυτή την παραγοντοποίηση για να υπολογίσουμε όλα τα επακόλουθα βήματα της μεθόδου Newton. Οπότε

$$x_+ = x_c - (\nabla^2 f(x_0))^{-1} \nabla f(x_c)$$

και

$$\|\Delta(x_c)\| \leq \gamma \|x_0 - x_c\| \leq \gamma (\|e_0\| + \|e_c\|). \quad (5.16)$$

Αλγοριθμικά η μέθοδος της χορδής διαφέρει από τη μέθοδο Newton μόνο στο ότι ο υπολογισμός και η παραγωγή του Εσσιανού γίνεται εκτός του βρόχου της επανάληψης.

ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΣ 5.3.1 chord (x, f, τ)

1. $r_0 = \|\nabla f(x)\|$
2. Υπολόγισε $\nabla^2 f(x)$
3. Παραγώγισε $\nabla^2 f(x) = LL^T$
4. Καθώς $\|\nabla f(x)\| > \tau_r r_0 + \tau_\alpha$ κάνε

(α) Λύσε $LL^T s = -\nabla f(x)$

(β) $x = x + s$

(γ) Υπολόγισε $\nabla f(x)$

Η θεωρία σύγκλισης επαληθεύεται από το θεώρημα 5.3.2 με $\varepsilon_g = 0$ και $\Delta = O(\|e_0\|)$.

ΘΕΩΡΗΜΑ 5.3.2

Έστω ότι ισχύουν οι βασικές υποθέσεις. Τότε υπάρχουν $K_C > 0$ και $\delta > 0$ τέτοια ώστε αν $x_0 \in B(\delta)$ η οι επαναλήψεις της μεθόδου της χορδής συγκλίνουν τετραγωνικά στο x^* και

$$\|e_{n+1}\| \leq K_C \|e_0\| \|e_n\|. \quad (5.17)$$

ΑΠΟΔΕΙΞΗ

Έστω δ αρκετά μικρό ώστε τα συμπεράσματα του θεωρήματος 5.3.1 να ισχύουν. Υποθέτουμε $e_n, e_0 \in B(\delta)$. Συνδυάζοντας τις (5.14) και (5.16) έχουμε ότι

$$\|e_{n+1}\| \leq \bar{K} (\|e_n\| (1 + \gamma) + \gamma \|e_0\|) \|e_n\| \leq \bar{K} (1 + 2\gamma) \delta \|e_n\|$$

Οπότε, αν δ είναι αρκετά μικρό ώστε

$$\bar{K} (1 + 2\gamma) \delta = \eta < 1$$

Τότε η μέθοδος της χορδής συγκλίνει γραμμικά στο x^* . Η γραμμική σύγκλιση σημαίνει ότι $\|e_n\| < \|e_0\|$ και κατά συνέπεια η (2.17) ισχύει για $K_C = \bar{K} (1 + 2\gamma)$. \square

Σαν μια εφαρμογή του θεωρήματος 5.3.2, αναλύουμε τις επιπτώσεις μιας προσέγγισης διαφορών του Εσσιανού πίνακα. Για παράδειγμα, για να κατασκευάσουμε ένα Εσσιανό πίνακα, του οποίου οι στήλες είναι $\nabla^2 f(x) e_j$, όπου e_j είναι το μοναδιαίο διάνυσμα με j -οστό στοιχείο το 1 και όλα τα υπόλοιπα 0, θα μπορούσαμε να προσεγγίσουμε τους πολλαπλασιασμούς πίνακας-διάνυσμα $\nabla^2 f(x) e_j$ με προς τα εμπρός διαφορές και μετά να κάνουμε συμμετρικό τον πίνακα που προέκυπτε. Ορίζουμε

$$\nabla_h^2 f(x) = (A_h + A_h^T) / 2 \nabla^2 f(x^*) \quad (5.19)$$

όπου A_h είναι ο πίνακας του οποίου η j -οστή στήλη είναι $D_h^2 f(x : e_j)$. $D_h^2 f(x : w)$ είναι η προσέγγιση διαφορών του Εσσιανού $\nabla^2 f(x)$ σε ένα διάνυσμα w , ορίζεται να είναι

$$D_h^2 f(x : w) = \begin{cases} 0, & w = 0 \\ \frac{\nabla f(x + hw / \|w\|) - \nabla f(x)}{h / \|w\|}, & w \neq 0 \end{cases} \quad (5.20)$$

Μπορούμε επίσης να γράψουμε

$$D_h^2 f(x : w) = D_h(\nabla f)(x : w)$$

όπου ο συμβολισμός D_h είναι η άμεση αριθμητική παράγωγος. Αν $\|x\|$ είναι πολύ μεγάλο, τότε για το σφάλμα στον υπολογισμό του αθροίσματος $x + hw/\|w\|$ θα πρέπει να λάβουμε υπόψη την επιλογή του h .

Ας επισημάνουμε ότι το $D_h^2 f(x:w)$ δεν είναι γραμμικός χάρτης και ότι είναι γενικά το ίδιο με $\nabla_h^2 f(x)w$.

Αν υπολογίσουμε $\nabla f(x) + \varepsilon_g(x)$ και τα σφάλματα της κλίσης ικανοποιούν την ανισότητα

$$\|\varepsilon_g(x)\| \leq \bar{\varepsilon}$$

για όλα τα x , τότε η διαφορά του Εσσιανού είναι $\nabla_h(\nabla f + \varepsilon_g)$ και ικανοποιεί

$$\|\nabla^2 f(x) - \nabla_h(\nabla f + \varepsilon_g)(x)\| = O(h + \bar{\varepsilon}/h). \quad (5.21)$$

Έτσι, η επιλογή $h \approx \sqrt{\bar{\varepsilon}}$ είναι η βέλτιστη με την έννοια ότι ελαχιστοποιεί την ποσότητα του σφάλματος στην (5.21).

ΘΕΩΡΗΜΑ 5.3.4

Έστω ότι ισχύουν οι βασικές υποθέσεις. Τότε υπάρχουν $\delta, \bar{\varepsilon}$ και $K_D > 0$ τέτοια ώστε αν $x_c \in B(\delta), \|\varepsilon_g\| \leq \bar{\varepsilon}_c$ για όλα τα $x \in B(\delta)$ και

$$h \geq M \sqrt{\|\varepsilon_g(x_c)\|}$$

τότε

$$x_+ = x_c - (\nabla_{h_c}(\nabla f(x_c) + \varepsilon_g(x_c)))^{-1}(\nabla f(x_c) + \varepsilon_g(x_c))$$

ικανοποιεί

$$\|e_+\| \leq K_D(\bar{\varepsilon}_c + (\bar{\varepsilon}_c + h)\|e_c\|)$$

5.4 Τερματισμός των επαναλήψεων

Δεν είναι ασφαλές να τερματίζουμε τις επαναλήψεις όταν η διαφορά $f(x_c) - f(x_+)$ είναι μικρή και τα μη συμπεράσματα μπορούν να μπορούν να διεξαχθούν με ασφάλεια από την εξέταση των διαφορών των τιμών της συνάρτησης σε διαδοχικές επαναλήψεις. Ενώ κάποιοι αλγόριθμοι δύσκολων προβλημάτων τερματίζουν όταν διαδοχικές τιμές της συνάρτησης είναι κοντά, αυτό είναι μια πράξη απελπισίας. Για παράδειγμα, αν

$$f(x_n) = -\sum_{j=1}^n j^{-1}$$

τότε $f(x_n) \rightarrow -\infty$ αλλά $f(x_{n+1}) - f(x_n) = -1/(n+1) \rightarrow 0$.

Αν ισχύουν οι βασικές υποθέσεις, μπορούμε να τερματίσουμε τις επαναλήψεις όταν η νόρμα της ∇f είναι αρκετά μικρή σε σχέση με την $\nabla f(x_0)$. Η ιδέα ότι αν ο $\nabla^2 f(x^*)$ είναι καλά ορισμένος, τότε η μικρή νόρμα της κλίσης συνεπάγεται μικρό σφάλμα της νόρμας. Επίσης, για κάθε επαναληπτική μέθοδο που βασίζεται στην κλίση ο τερματισμός όταν προκύπτουν μικρές κλίσεις είναι λογικός. Στην ειδική περίπτωση της μεθόδου του Newton η νόρμα είναι ένας πολύ καλός δείκτης σφάλματος αν είμαστε σε θέση να συνυπολογίσουμε το επιπρόσθετο κόστος μιας επιπλέον επανάληψης, τότε μπορούμε να εισάγουμε ένα λεπτό όριο για το σφάλμα.

Λήμμα 5.4.1

Ας υποθέσουμε ότι ισχύουν οι βασικές υποθέσεις. Έστω $\delta > 0$ να είναι αρκετά μικρό ώστε τα συμπεράσματα του λήμματος 5.2.1 να ισχύουν για $x \in B(\delta)$. Τότε για όλα τα $x \in B(\delta)$

$$\frac{\|e\|}{4\|e_0\|\kappa(\nabla^2 f(x^*))} \leq \frac{\|\nabla f(x)\|}{\|\nabla f(x_0)\|} \leq \frac{4\kappa(\nabla^2 f(x^*))\|e\|}{\|e_0\|}. \quad (5.22)$$

Η σημασία της (5.22) είναι ότι, σε ένα συνεχή πολλαπλασιαστική η νόρμα της σχετικής κλίσης είναι ίδια με τη νόρμα του σχετικού σφάλματος. Το γεγονός αυτό ικανοποιεί κατά μέρος τη συνθήκη τερματισμού (5.12).

Στην ειδική περίπτωση της μεθόδου του Newton μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε το μέγεθος του βήματος σαν μια εκτίμηση του σφάλματος επειδή από το θεώρημα 5.2.1 έχουμε ότι

$$\|e_c\| = \|s\| + O(\|e_c\|^2). \quad (5.23)$$

Οπότε κοντά στη λύση το s και το e_c έχουν σχεδόν το ίδιο μέγεθος. Το κόστος από τη χρήση της (5.23) είναι ότι όλες οι μεταβλητές που χρειάζονται για να υπολογίσουμε το $x_+ = x_c + s$ έχουν υπολογιστεί. Αν τερματίσουμε τις

επαναλήψεις όταν το $\|s\|$ είναι μικρότερο από την επιθυμητή ανοχή και πάρουμε το x_+ σαν το τελικό αποτέλεσμα τότε επιτυγχάνουμε μεγαλύτερη ακρίβεια από όση ζητήσαμε. Μια δυνατότητα είναι να τερματίσουμε την επανάληψη όταν $\|s\| = O(\sqrt{\tau_s})$ για κάποιο $\tau_s > 0$. Αυτό, μαζί με την (5.23) μας δίνει ότι $\|e_c\| = O(\sqrt{\tau_s})$ και χρησιμοποιώντας το θεώρημα 5.2.1 έχουμε

$$\|e_c\| = \|s\| + o(\|e_c\|) \quad \text{και} \quad \|e_+\| = o(\|e_c\|). \quad (5.24)$$

Για μια υπεργραμμικά συγκλίνουσα μέθοδο, όπως η μέθοδος της χορδής, το να παίρνουμε αποφάσεις τερματισμού των επαναλήψεων βασιζόμενοι στη νόρμα του βήματος είναι περιέχει μεγαλύτερο ρίσκο. Το σχετικό σφάλμα στην εκτίμηση του $\|e_c\|$ από το $\|s\|$ είναι

$$\frac{\| \|e_c\| - \|s\| \|}{\|e_c\|} \leq \frac{\|e_c + s\|}{\|e_c\|} = \frac{\|e_+\|}{\|e_c\|}.$$

Οπότε η εκτίμηση των σφαλμάτων σε βήματα είναι επιθυμητή μόνο αν η σύγκλιση είναι γρήγορη. Μπορούμε προχωρήσουμε αν εκτιμήσουμε το ρ του παράγοντα σύγκλισης οποίος ικανοποιεί

$$\|e_+\| \leq \rho \|e_c\|$$

Σε αυτή την περίπτωση

$$(1 - \rho)\|e_c\| \leq \|e_c\| - \|e_+\| \leq \|e_c - e_+\| = \|s\|$$

Οπότε

$$\|e_+\| \leq \rho \|e_c\| \leq \frac{\rho}{1 - \rho} \|s\|. \quad (5.26)$$

Έτσι, αν ο παράγοντας σύγκλισης μπορεί να εκτιμηθεί από το ρ και

$$\|s\| < (1 - \rho)\tau_s / \rho$$

τότε $\|e_+\| < \tau_s$. Αυτή η προσέγγιση χρησιμοποιείται στους κώδικες ODE και DAE αλλά απαιτεί καλή εκτίμηση του παράγοντα σύγκλισης και δεν ενδείκνυται για γραμμικά συγκλίνουσες μεθόδους βελτιστοποίησης. Ο κίνδυνος είναι ότι αν η σύγκλιση είναι αργή τότε ο προσεγγιστικός παράγοντας σύγκλισης μπορεί να μην είναι μια καλή εκτίμηση και να προκαλέσει πρόωρο τερματισμό των επαναλήψεων.

Δεν είναι σύνηθες για εκτιμήσεις της f και της ∇f να έχουν μεγάλο κόστος και η βελτιστοποίηση συνήθως προβλέπει ένα σταθερό αριθμό επαναλήψεων.

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

1. K. Atkinson, Wiley, (1989) *An Introduction to Numerical Analysis*
2. C.T. Kelley, SIAM publications, (1995) *Iterative methods for Linear and Non-Linear equations*
3. R. Bulirsch, J. Stoer, Springer, (1993) *Introduction to Numerical Analysis*
4. G. Dahlquist, and A. Bjorck, Prentice Hall, (1974) *Numerical Methods*
5. Walter Gautsi, *Numerical Analysis-An Introduction*
6. A. Quarteroni, R. Sacco, and F. Saleri, Springer, (2007) *Numerical Mathematics*
7. Α. Μπακοπουλος, Ι. Χρυσοβέργης, Εκδόσεις Συμεών, (1999) *Εισαγωγή στην Αριθμητική Ανάλυση*
8. Γ. Σ. Παπαγεωργίου, Χ. ΓΡ. Τσίτουρας, Εκδόσεις Συμεών, (2004) *Αριθμητική Ανάλυση με εφαρμογές σε Matlab και Mathematica*