

3.3 Kvasi-Newton -menetelmät

Käytännössä derivaatan $f'(x_k)$ laskeminen voi olla vaikeaa tai kohtuuttoman kallista.

Newtonin iteraatiota muutetaan approksimoimalla derivaattaa erotusosamäärällä:

Algoritmi 3.3.1 Sekanttimenetelmä

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)(x_k - x_{k-1})}{f(x_k) - f(x_{k-1})}, \quad k = 1, 2, \dots$$

Tarvitaan siis kaksi alkuarvausta iteraation käynnistämiseksi.

Suppenemisnopeus on $\frac{1+\sqrt{5}}{2} \approx 1.62$.

—

Newton: $f'(x_*) = 0$

$$x_{k+1} - x_* = \frac{f''(\xi_k)}{2f'(\xi_k)} (x_k - x_*)^2$$

$\underbrace{\hspace{10em}}_{\text{lähestyy nollaa, kun } x_k \rightarrow x_*}$

Taylor: $f'(x_k) = \underbrace{f'(x_*)}_{=0 \text{ (oletus)}} + (x_k - x_*) f''(\eta_k)$

$$= (x_k - x_*) f''(\eta_k)$$

$$\Rightarrow x_{k+1} - x_* = \frac{f''(\xi_k)}{2f'(\eta_k)} (x_k - x_*) \quad \text{lineaarinen!}$$

Esimerkki: $f(x) \equiv x^2 = 0$ $f'(x) = 2x$

$$\text{Newton: } x_{k+1} = x_k - \frac{x_k^2}{2x_k} = \frac{1}{2} x_k$$

$$f(x) \equiv x^j = 0 \quad \Rightarrow \quad x_{k+1} = \frac{j-1}{j} x_k$$

Käntöpiisteiteraatioista : $x_{k+1} = \varphi(x_k)$

Tehtävällä $f(x) = 0$ on monia käntöpiiste-esityksiä :

$$\varphi(x) \equiv x + f(x) = x$$

$$\varphi(x) \equiv x - f(x) = x$$

Toisalta : $x = \varphi(x)$: lle

$$f(x) \equiv x - \varphi(x) = 0$$

$$f(x) \equiv \exp(x - \varphi(x)) - 1 = 0$$

Kaikille : $f(x) = 0$, jos ja vain jos $\varphi(x) = x$:

Esimerkki : Newton : $\varphi(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)}$

Huomaa! $\varphi(x) = x$, jos $f(x) = 0$
(olettaen $f'(x) \neq 0$)

Riittävä ehto suppenemiselle :

Lause Merkitään käntöpiistettä x_* . Oletetaan, että $\varphi \in C^1$ ja $|\varphi'(x)| < 1$ välillä $[x_* - \delta, x_* + \delta]$. Jos alkuarvaus x_0 on tällä välillä, niin käntöpiisteiteraatio suppenee.

Todistus Taylor : $x_{k+1} = \varphi(x_k)$

$$= \varphi(x_*) + (x_k - x_*) \varphi'(\xi_k)$$

$$= x_* + (x_k - x_*) \varphi'(\xi_k),$$

Vähennetään x_* puolittain ja

$$\xi_k \in [x_k, x_*].$$

merkitään $e_k = x_k - x_*$.

Saadaan : $e_{k+1} = e_k \varphi'(\xi_k) \Rightarrow |e_{k+1}| \leq |\varphi'(\xi_k)| |e_k|$

□

Vahvempi tulos: Kääntöpuoleiteraatio suppenee, jos φ on kontrakto, eli on olemassa vakio $L < 1$ s.e. kaikille x, y pätee $|\varphi(x) - \varphi(y)| \leq L|x - y|$.

Lause Oletaan φ kontrakto koko reaalitakselilla. Tällöin kääntöpuole x_* on yksikäsitteinen ja kääntöpuoleiteraatio suppenee m.v. alkuearvauksella x_0 .

Todistus Näytetään, että jono $\{x_k\}_{k=0}^{\infty}$ on Cauchyn jono.

$$\text{Oletaan } k > j : |x_k - x_j| \leq |x_k - x_{k-1}| + |x_{k-1} - x_{k-2}| + \dots + |x_{j+1} - x_j|$$

$$|x_m - x_{m-1}| = |\varphi(x_{m-1}) - \varphi(x_{m-2})| \leq L|x_{m-1} - x_{m-2}| \leq L^{m-1}|x_1 - x_0|$$

$$\Rightarrow |x_k - x_j| \leq L^j \frac{1 - L^{k-j}}{1 - L} |x_1 - x_0|$$

$$\text{Jos } k > N, j > N, \text{ niin } |x_k - x_j| \leq L^N \frac{1}{1 - L} |x_1 - x_0| \xrightarrow{N \rightarrow \infty} 0 \text{ (Cauchy!)}$$

Kääntöpuoleen olemassaolo seuraa kontraktoin jatkuvuudesta. Sen yksikäsitteisyys taas osoitetaan vastaolelualla:

$$|x_* - y_*| = |\varphi(x_*) - \varphi(y_*)| \leq L|x_* - y_*|$$

Kahden kääntöpuoleen erotus

$$\text{RR, } L < 1 \text{ ellei } x_* = y_*.$$

□