

Matematika pro chemické inženýry

Drahoslava Janovská

5. Numerické řešení nelineárních rovnic

Newtonova metoda pro řešení jedné nelineární rovnice, Newtonova metoda pro soustavy nelineárních rovnic. Nelineární regrese.



EVROPSKÁ UNIE
Evropské strukturální a investiční fondy
Operační program Výzkum, vývoj a vzdělávání



Povinná látka. Bude v písemkách a bude se zkoušet při ústní zkoušce (žádné označení)

- ★ Příklady k procvičení - dobrovolné
- ★ Pro studenty, kteří chtějí vědět víc. Tato látka se nebude přednášet, nebude v písemkách, nebude se zkoušet.

Obsah

- 1 Numerické řešení nelineárních rovnic**
 - Řešení rovnic o jedné neznámé
 - Metoda bisekce
 - Newtonova metoda
- 2 Numerické řešení soustav nelineárních rovnic**
 - Newtonova metoda pro soustavy nelineárních rovnic
- 3 Nelineární regrese**
 - Nelineární metoda nejmenších čtverců
 - Gaussova-Newtonova metoda
- 4 Literatura k dalšímu studiu**

Numerické řešení nelineárních rovnic

Numerické řešení nelineárních algebraických rovnic patří spolu s řešením lineárních algebraických rovnic k důležitým problémům numerické analýzy. Nelineární rovnice se vyskytují v nejrůznějších inženýrských aplikacích, jmenujme např.

- výpočet složité chemické rovnováhy,
- řešení protiproudých separačních zařízení, jako jsou např. rektifikační či absorpční kolony,
- výpočet stacionární simulace systému zařízení,
- náhrada parabolických nebo eliptických rovnic metodou konečných diferencí,
- výpočet stacionárních stavů dynamických modelů popsaných obyčejnými diferenciálními rovnicemi.

Řešení rovnic o jedné neznámé

Pro řešení rovnice

$$f(x) = 0 \tag{1}$$

bylo vyvinuto mnoho různých iteračních metod. Podstata těchto metod je následující:

Předpokládejme, že známe dostatečně malý interval, ve kterém leží **jediný kořen** $x = x^*$ rovnice (1). Zvolíme v tomto intervalu **počáteční odhad** x_0 (blízký k x^*) a sestrojíme posloupnost bodů $x_1, x_2, \dots, x_n, \dots$ podle rekurentního předpisu

$$x_k = \phi_k(x_0, x_1, \dots, x_{k-1}). \tag{2}$$

Rekurentní předpis (2) budeme konstruovat tak, aby za jistých předpokladů posloupnost $\{x_n\}$ konvergovala k x^* .

Různou volbou funkce ϕ_k (závisející na funkci f) dostáváme různé iterační metody.

★ Volba funkce ϕ

Funkci $\phi(x)$ volíme často tak, aby **hledané řešení x^* bylo také pevným bodem funkce ϕ** , tedy aby bylo řešením rovnice

$$x = \phi(x), \quad (3)$$

přičemž posloupnost $\{x_k\}$ konstruujeme podle vztahu

$$x_k = \phi(x_{k-1}), \quad k = 1, 2, \dots \quad (4)$$

Funkce ϕ se zde se vzrůstajícím indexem iterace nemění; **metody** tohoto typu nazýváme **stacionární**.

Je-li funkce ϕ **diferencovatelná**, platí-li

$$|\phi'(x^*)| \leq K < 1 \quad (5)$$

a je-li ϕ' **spojitá**, je $|\phi'(x)| < 1$ i pro nějaké okolí řešení x^* a **postupně aproximace (4) budou konvergovat**, zvolíme-li x_0 blízko x^* . **Čím menší bude K , tím rychlejší bude konvergence**.

Chceme-li **řešení x^* s přesností ϵ** , potom pro ukončení iteračního procesu (4) lze použít kritéria

$$\frac{K}{1-K} |x_k - x_{k-1}| < \epsilon. \quad (6)$$



Měřítkem rychlosti konvergence iteračního procesu (4) může být také řád konvergence. Připomeňme, že iterace (4) je řádu m , jestliže

$$\phi'(x^*) = \phi''(x^*) = \dots = \phi^{(m-1)}(x^*) = 0, \quad \phi^{(m)}(x^*) \neq 0. \quad (7)$$

Má-li funkce $\phi(x)$ v okolí x^* m spojitých derivací, potom zbytek po $(m-1)$ -ním členu Taylorova rozvoje dává:

$$x_k - x^* = \frac{1}{m!} (x_{k-1} - x^*)^m \phi^{(m)}(\xi_k).$$

Označme $M_m = \max |\phi^{(m)}(x)|$ v okolí x^* , pak

$$|x_k - x^*| \leq \frac{M_m}{m!} |x_{k-1} - x^*|^m. \quad (8)$$

Jestliže je

$$|x_0 - x^*| < 1 \quad \text{a} \quad \frac{M_m}{m!} |x_0 - x^*| = \omega < 1,$$

potom (po úpravách) dostaneme

$$|x_k - x^*| \leq \omega \frac{m^{k-1}}{m-1}, \quad (9)$$

což představuje vysokou rychlost konvergence x_k k x^* .

Metoda bisekce

Zkoumejme nejprve **metody, které nám dovolí určit přibližnou polohu řešení**, tedy **separační interval**, v němž se řešení určitě nachází.

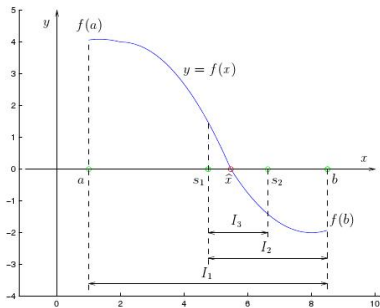
Je-li funkce $f(x)$ v rovnici (1) spojitá na intervalu $\langle a, b \rangle$, potom stačí najít dva body $s_1, s_2 \in (a, b)$, $s_2 - s_1 = r > 0$, takové, že $f(s_1)f(s_2) < 0$, tj. funkce f má v těchto bodech různé znaménko. Ze spojitosti potom plyne, že mezi s_1 a s_2 leží alespoň jeden bod s tak, že $f(s) = 0$.

Nejjednodušší metoda ... **metoda bisekce**:
Necht

$$\hat{x} := \frac{s_1 + s_2}{2} \quad \dots \text{střed intervalu } (s_1, s_2).$$

Pak je buď $f(s_1) \cdot f(\hat{x}) < 0$ nebo $f(\hat{x}) \cdot f(s_2) < 0$.
V prvním případě zmenšíme separační interval na interval $\langle s_1, \hat{x} \rangle$, v druhém případě na $\langle \hat{x}, s_2 \rangle$.
Položíme $s_3 =$ střed nového separačního intervalu, atd. Po n půlení intervalu platí pro výsledný separační interval $|s_1 - s_2| = 2^{-n}r$.

Po 10 půlení se tedy původní interval zmenší více než 1000krát.



Newtonova metoda

Jednou z nejužívanějších metod pro řešení nelineární rovnice o jedné neznámé $f(x) = 0$ je **Newtonova metoda – metoda tečen**.

Připomeňme nejprve separační interval:

Interval $\langle a, b \rangle$ se nazývá **separačním intervalem pro rovnici $f(x) = 0$** , jestliže v tomto intervalu leží právě jeden kořen $x = x^*$ této rovnice.

Předpokládejme, že funkce f je spojitá a dvakrát spojitě diferencovatelná na intervalu $\langle a, b \rangle$. Necht dále

(a) $f(a) \cdot f(b) < 0$,

(b) $f'(x) \neq 0 \forall x \in \langle a, b \rangle$,

(c) $f''(x) \neq 0 \forall x \in \langle a, b \rangle$,

(d) za nultou aproximaci x_0 kořene x^* volíme ten z krajních bodů a, b , pro který platí

$$f(x_0) \cdot f''(x_0) > 0.$$

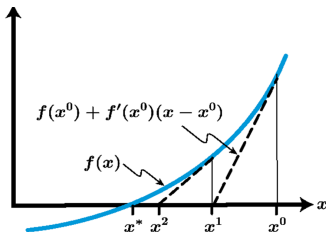
Poznamenejme, že **interval $\langle a, b \rangle$ je separační, právě když jsou splněny podmínky (a) a (b), podmínky (c) a (d) zaručují konvergenci Newtonovy metody ke kořeni x^* .**

Zvolme tedy nultou aproximaci x_0 . Geometricky lze Newtonovu metodu popsat takto: V bodě $[x_0, f(x_0)]$ sestrojíme tečnu ke grafu funkce $f(x)$. První iterace je pak průsečík této tečny s osou x . Tedy pro první iteraci máme

$$x_1 = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)}.$$

Nyní sestrojíme tečnu v bodě $[x_1, f(x_1)]$ a průsečík této tečny s osou x bude aproximace x_2 kořene x^* , atd. Obecně pro $(n + 1)$ -ní iteraci je

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}, \quad n = 1, 2, \dots$$



Předepíšeme-li si předem přesnost výpočtu, například $\varepsilon = 10^{-4}$, pak skončíme tehdy, bude-li

$$|x_{n+1} - x_n| < \text{const} \cdot 10^{-4}.$$

★ Kvadratická konvergence Newtonovy metody

Hledáme řešení rovnice $f(x) = 0$ a necht α je tento kořen, tedy $f(\alpha) = 0$.

Počáteční aproximace ... x_0

$(k + 1)$ -ní krok ... $x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}$, $k = 1, 2, \dots$

Chyba výpočtu v k -tém kroku: $e_k = \alpha - x_k \Rightarrow \alpha = x_k + e_k$.

Provedme Taylorův rozvoj funkce f v bodě x_k :

$$f(x) = f(x_k) + f'(x_k)(x - x_k) + \frac{f''(x_k)}{2!}(x - x_k)^2 + \mathcal{O}(x - x_k)^3,$$

Položme $x := \alpha$ a $x - x_k = \alpha - x_k = e_k$. Pak

$$0 = f(\alpha) = f(x_k + e_k) = f(x_k) + f'(x_k) \cdot e_k + \frac{1}{2} f''(x_k) \cdot e_k^2 + \mathcal{O}(e_k^3)$$

$$-f(x_k) = f'(x_k) \cdot e_k + \frac{1}{2} f''(x_k) \cdot e_k^2 + \mathcal{O}(e_k^3) \quad | : f'(x_k) \neq 0$$

$$\underbrace{-\frac{f(x_k)}{f'(x_k)}}_{x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}} = e_k + \frac{1}{2} \frac{f''(x_k)}{f'(x_k)} e_k^2 + \mathcal{O}(e_k^3)$$



Dostaneme

$$e_{k+1} = \alpha - x_{k+1} = \alpha - \left(x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)} \right) = \underbrace{\alpha - x_k}_{e_k} + \frac{f(x_k)}{f'(x_k)} \Rightarrow$$

$$e_{k+1} = e_k + \frac{f(x_k)}{f'(x_k)} = e_k - e_k - \frac{1}{2} \frac{f''(x_k)}{f'(x_k)} \cdot e_k^2 + \mathcal{O}(e_k^3)$$

Tedy

$$e_{k+1}^1 = -\frac{1}{2} \frac{f''(x_k)}{f'(x_k)} \cdot e_k^2 + \mathcal{O}(e_k^3), \Rightarrow$$

metoda konverguje kvadraticky, tj. počet správných desetinných míst se s každou iterací zdvojnásobí.

Poznámka Připomeňme, že $\mathcal{O}(e_k^3)$ charakterizuje zbytek Taylorova rozvoje funkce f v bodě x_k :

$$\exists \text{konst. } \alpha > 0, A > 0 : |\text{zbytek}| \leq A \cdot e_k^3 \quad \forall |e_k| < \alpha.$$

★ Příklady k procvičení

- 1 Ověřte, že interval $\langle 1; \sqrt{3} \rangle$ je separačním intervalem pro řešení rovnice

$$x + \operatorname{arctg} x - 2 = 0$$

a že v tomto intervalu lze k řešení použít Newtonovu metodu. Zvolte nultou aproximaci x_0 a vypočtěte alespoň jednu další aproximaci řešení.

- 2 Ověřte, že interval $\langle \frac{\pi}{2}; \pi \rangle$ je separačním intervalem pro řešení rovnice

$$x = 6 \sin x$$

a že v tomto intervalu lze k řešení této rovnice použít Newtonovu metodu. Zvolte nultou aproximaci x_0 a vypočtěte jednu další aproximaci Newtonovou metodou. Kolik dalších reálných řešení má tato rovnice?

- 3 Pomocí vhodného obrázku zjistěte, kolik kořenů má rovnice

$$x \ln x - 3 = 0$$

a pro největší kořen určete separační interval o délce nejvýše 1 a počáteční aproximaci x_0 pro Newtonovu metodu. Vypočtěte alespoň jednu další aproximaci Newtonovou metodou.

Numerické řešení soustav nelineárních rovnic

Velmi častou úlohou vznikající při řešení praktických problémů chemického inženýrství je úloha nalézt n neznámých x_1, x_2, \dots, x_n , které vyhovují nelineárním rovnicím

$$\begin{aligned} f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) &= 0 \\ f_2(x_1, x_2, \dots, x_n) &= 0 \\ &\vdots \\ f_n(x_1, x_2, \dots, x_n) &= 0. \end{aligned} \tag{10}$$

Pro řešení soustav nelineárních rovnic byla vyvinuta celá řada iteračních metod typu

$$\mathbf{x}_{k+1} = \Phi(\mathbf{x}_k), \quad k = 0, 1, \dots, \tag{11}$$

kde \mathbf{x}_k je k -tá aproximace vektoru neznámých $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T$.
Nejpoužívanější je **Newtonova metoda**.

Newtonova metoda pro soustavy nelineárních rovnic

Označme $\mathbf{f} = (f_1, \dots, f_n)^T$, $f_i : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, $i = 1, \dots, n$. Definujme si Jacobiho matici funkcí f_i (parciální derivace vyčíslujeme v bodě \mathbf{x}) :

$$\mathbf{J}(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1} & \cdots & & \\ \vdots & & & \\ \frac{\partial f_n}{\partial x_1} & \frac{\partial f_n}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_n}{\partial x_n} \end{pmatrix}. \quad (12)$$

Pro Newtonovu metodu volíme v rovnici (11) Φ jako

$$\Phi(\mathbf{x}) = \mathbf{x} - \lambda \mathbf{J}^{-1}(\mathbf{x})\mathbf{f}(\mathbf{x}).$$

Tedy

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \lambda_k \mathbf{J}^{-1}(\mathbf{x}_k)\mathbf{f}(\mathbf{x}_k). \quad (13)$$

Po vynásobení maticí $\mathbf{J}(\mathbf{x}_k)$ máme konečně tvar Newtonovy metody, v jakém je prakticky používána:

$$\mathbf{J}(\mathbf{x}_k)\Delta\mathbf{x}_k = -\mathbf{f}(\mathbf{x}_k) \quad (14)$$

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \lambda_k \Delta\mathbf{x}_k. \quad (15)$$

Poznámky

- Vztah (14) představuje soustavu n lineárních algebraických rovnic pro n proměnných (přírůstků) $\Delta \mathbf{x}_k$, kterou řešíme metodami lineární algebry.
- Hodnotu λ_k volíme obvykle rovnou jedné, testujeme však, zda došlo ke **snížení reziduí**, tj. zda platí

$$\sum_{i=1}^n f_i^2(\mathbf{x}_{k+1}) < \sum_{i=1}^n f_i^2(\mathbf{x}_k).$$

Není-li tato podmínka splněna, λ_k zmenšíme.

- Newtonova metoda pro systém rovnic je také metodou druhého řádu. Metoda konverguje ke kořenu \mathbf{x}^* , pro nějž je $\mathbf{J}(\mathbf{x}^*)$ regulární, bylo-li zvoleno počáteční přiblížení \mathbf{x}_0 už dostatečně blízko tomuto kořenu \mathbf{x}^* .
- **Geometricky v \mathbb{R}^2** : Mějme soustavu dvou rovnic o dvou neznámých x, y :

$$f_1(x, y) = 0$$

$$f_2(x, y) = 0$$

a necht (x_k, y_k) je aproximace kořene (α, β) . Body $(x_k, y_k, f_1(x_k, y_k))$ a $(x_k, y_k, f_2(x_k, y_k))$ vedeme tečnou rovinu ke grafům funkce $f_1(x, y)$ a $f_2(x, y)$. Tečné roviny protnou rovinu $z = 0$ ve dvou průsečnicích, jejichž průsečík je další aproximací (x_{k+1}, y_{k+1}) kořene (α, β) .

★ Příklad

Budeme hledat řešení soustavy

$$\begin{aligned} f_1(\mathbf{x}) &= 16x_1^4 + 16x_2^4 + x_3^4 - 16 = 0 \\ f_2(\mathbf{x}) &= x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 - 3 = 0 \\ f_3(\mathbf{x}) &= x_1^3 - x_2 = 0. \end{aligned} \tag{16}$$

Zvolme $\mathbf{x}_0 = (1, 1, 1)$ za počáteční přiblížení. Potom platí

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}_0) = \begin{pmatrix} 17 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{J}(\mathbf{x}_0) = \begin{pmatrix} 64 & 64 & 4 \\ 2 & 2 & 2 \\ 3 & -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{J}(\mathbf{x}_0)^{-1} = \begin{pmatrix} 1/240 & -1/120 & 1/4 \\ 1/80 & -1/40 & -1/4 \\ -1/60 & 8/15 & 0 \end{pmatrix}.$$

$$\mathbf{x}_1 = \mathbf{x}_0 - \mathbf{J}^{-1}(\mathbf{x}_0)\mathbf{f}(\mathbf{x}_0) = \left(\frac{223}{240}, \frac{63}{80}, \frac{79}{60} \right).$$

Pro přehlednost jsou všechny iterace uvedeny v následující tabulce. Čtvrté přiblížení je už s přesností na 6 desetinných míst.

Iterace v příkladu (16)

Newtonova metoda pro soustavu (16)

k	$x_1^{(k)}$	$x_2^{(k)}$	$x_3^{(k)}$	$f_1(\mathbf{x}_k)$	$f_2(\mathbf{x}_k)$	$f_3(\mathbf{x}_k)$
0	1	1	1	17	0	0
1	0,929167	0,787500	1,283333	4,791917	0,130451	0,014697
2	0,887075	0,693176	1,320865	0,645310	0,012077	0,004864
3	0,878244	0,677195	1,330610	0,001845	0,000428	0,000207
4	0,877966	0,676757	1,330855	0,000015	0,000000	0,000000
5	0,877966	0,676757	1,330855	0,000000	0,000000	0,000000

Nelineární metoda nejmenších čtverců

Obecná lineární regrese aproximuje řešení pomocí lineárního modelu tvaru

$$y \approx a_0 f_1(x) + a_1 f_2(x) + \dots + a_m f_m(x),$$

kde $f_1(x), f_2(x), \dots, f_m(x)$ je $m + 1$ básových funkcí, a_0, a_1, \dots, a_m jsou neznámé parametry. Připomeňme, že rovnice je lineární vzhledem k parametrům a_0, a_1, \dots, a_m .

Bázové funkce mohou být nelineární, jako např. v případě polynomiální regrese, kdy $f_j(x) = x^j$. Zvolíme-li za básové funkce siny a cosiny, dostaneme Fourierovu aproximaci ve tvaru

$$y \approx a_0 + a_1 \sin(\omega x) + a_2 \cos(\omega x).$$

Gaussova-Newtonova metoda

Stejně jako v případě lineární regrese je nelineární regrese založena na určení hodnot parametrů modelu, které minimalizují součet čtverců odchylek nebo zbytků. V tomto případě však k nalezení aproximace využijeme iterační metody.

Konkrétně budeme aplikovat **Gaussovou-Newtonovou metodou**, která pomocí **Taylorova rozvoje vyjádří původní nelineární rovnici v přibližném lineárním tvaru**. Pak pro nový odhad parametrů lze použít **metodu nejmenších čtverců k hledání minima součtů**.

Gaussova-Newtonova metoda - idea

Uvažujme množinu dat $S = \{(x_i, y_i), i = 1, 2, \dots, N\}$ a předpokládejme, že náš model závisí na parametrech a_0, a_1, \dots, a_m ve tvaru $y = f(x; a_0, a_1, \dots, a_m)$. Vztah mezi daty a nelineárním modelem vyjádříme jako

$$y_i = f(x_i; a_0, a_1, \dots, a_m) + e_i, \quad i = 1, 2, \dots, N,$$

kde e_i představuje náhodnou chybu.

Abychom zjednodušili zápis, vynecháme v zápisu závislost na parametrech a budeme jednoduše psát

$$y_i = f(x_i) + e_i, \quad i = 1, 2, \dots, N. \quad (17)$$

Tento nelineární model rozvineme v parametrech a_0, a_1, \dots, a_m do Taylorova polynomu prvního stupně.

Pro vzniklé iterace musíme zadat počáteční odhad parametrů. Používáme počáteční odhad jako bod rozvoje na počátku a v dalších krocích nejnovější odhad parametrů jako následné body v nichž počítáme další rozvoj.

Notace: (x_j, y_j) ... množina dat, index j ... j -tá iterace.

Gaussova-Newtonova metoda - dva parametry

Uvažujme **dva parametry** a_0, a_1 . Pro $(j + 1)$ -ní iteraci Taylorova polynomu prvního stupně v bodě (x_i, a_0, a_1) máme

$$f(x_i)_{j+1} = f(x_i)_j + \frac{\partial f(x_i)}{\partial a_0} \Delta a_0 + \frac{\partial f(x_i)}{\partial a_1} \Delta a_1, \quad i = 1, 2, \dots, N, \quad (18)$$

kde $j = 0, 1, 2, \dots$.

Jako počáteční aproximaci j_0 využijeme k vyčíslení f a partiálních derivací počáteční hodnoty a_0, a_1 . Ukažme si tento **první krok**. Necht $a_{0,0}$ a $a_{1,0}$ jsou počáteční hodnoty parametrů a_0 a a_1 . Pak

$$f(x_i)_{j+1} = f(x_i; a_{0,0}, a_{1,0})_j + \frac{\partial f(x_i; a_{0,0}, a_{1,0})}{\partial a_0} \Delta a_0 + \frac{\partial f(x_i; a_{0,0}, a_{1,0})}{\partial a_1} \Delta a_1. \quad (19)$$

Hodnoty Δa_0 a Δa_1 se v každém kroku výpočtu určí metodou nejmenších čtverců. Představují přírůstky přidané k poslednímu odhadu parametrů, abychom dostali nové odhady parametrů. **Rovnice (19) představuje linearizaci originálního modelu vzhledem k parametrům.**

Dosadíme pravou stranu rovnice (18) do rovnice (17) a po úpravě dostaneme

$$y_i - f(x_i)_j = \frac{\partial f(x_i)}{\partial a_0} \Delta a_0 + \frac{\partial f(x_i)}{\partial a_1} \Delta a_1 + e_i, \quad i = 1, 2, \dots, N. \quad (20)$$

Rovnice (20) reprezentuje soustavu lineárních algebraických rovnic, kterou maticově zapíšeme jako

$$\begin{bmatrix} y_1 - f(x_1) \\ y_2 - f(x_2) \\ \vdots \\ y_N - f(x_N) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial f(x_1)}{\partial a_0} & \frac{\partial f(x_1)}{\partial a_1} \\ \frac{\partial f(x_2)}{\partial a_0} & \frac{\partial f(x_2)}{\partial a_1} \\ \vdots & \vdots \\ \frac{\partial f(x_N)}{\partial a_0} & \frac{\partial f(x_N)}{\partial a_1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta a_0 \\ \Delta a_1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} e_1 \\ e_2 \\ \vdots \\ e_N \end{bmatrix}.$$

kde matice soustavy je Jacobiova matice.

Normální rovnice

Zapomeneme chybové členy. Dostaneme přeuročenou soustavu lineárních rovnic, kterou řešíme metodou nejmenších čtverců, konkrétně určíme soustavu normálních rovnic.

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial f(x_1)}{\partial a_0} & \frac{\partial f(x_1)}{\partial a_1} \\ \frac{\partial f(x_2)}{\partial a_0} & \frac{\partial f(x_2)}{\partial a_1} \\ \vdots & \vdots \\ \frac{\partial f(x_N)}{\partial a_0} & \frac{\partial f(x_N)}{\partial a_1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta a_0 \\ \Delta a_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 - f(x_1) \\ y_2 - f(x_2) \\ \vdots \\ y_N - f(x_N) \end{bmatrix}.$$

Označme

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} \frac{\partial f(x_1)}{\partial a_0} & \frac{\partial f(x_1)}{\partial a_1} \\ \frac{\partial f(x_2)}{\partial a_0} & \frac{\partial f(x_2)}{\partial a_1} \\ \vdots & \vdots \\ \frac{\partial f(x_N)}{\partial a_0} & \frac{\partial f(x_N)}{\partial a_1} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{z} = \begin{bmatrix} \Delta a_0 \\ \Delta a_1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} y_1 - f(x_1) \\ y_2 - f(x_2) \\ \vdots \\ y_N - f(x_N) \end{bmatrix}.$$

Soustava normálních rovnic:

$$\mathbf{A}^T \mathbf{A} \mathbf{z} = \mathbf{A}^T \mathbf{b}.$$

Nyní aktualizujeme složky vektoru \mathbf{z}

$$\mathbf{a}_{0,j+1} = \mathbf{a}_{0,j} + \Delta \mathbf{a}_0, \quad \mathbf{a}_{1,j+1} = \mathbf{a}_{1,j} + \Delta \mathbf{a}_1,$$

Iterační proces ukončíme je-li například relativní chyba menší než zadaná tolerance tol:

$$\left| \frac{\mathbf{a}_{0,j+1} - \mathbf{a}_{0,j}}{\mathbf{a}_{0,j+1}} \right| < \text{tol} \quad \text{a} \quad \left| \frac{\mathbf{a}_{1,j+1} - \mathbf{a}_{1,j}}{\mathbf{a}_{1,j+1}} \right| < \text{tol}.$$

Součet čtverců residuí je

$$\sum_{i=1}^n |y_i - f(x_i; \mathbf{a}_0, \mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_m)|^2.$$

Příklad

Mějme funkci $y = f(x; a_0, a_1) = a_0(1 - e^{-a_1x})$ a data

x	0,25	0,75	1,25	1,75	2,25
y	0,28	0,57	0,68	0,74	0,79

Pro počáteční odhad $a_0 = 1$, $a_1 = 1$ vypočtěte první krok Gaussovy-Newtonovy metody.

Vypočteme parciální derivace f vzhledem k parametrům a_0 , a_1 :

$$\frac{\partial f}{\partial a_0} = 1 - e^{-a_1x}, \quad \frac{\partial f}{\partial a_1} = a_0 x e^{-a_1x}.$$

Nyní vyčíslíme parciální derivace pro daná data, abychom dostali matici **A** (zaokrouhlujeme na čtyři desetinná místa):

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} \frac{\partial f(x_1)}{\partial a_0} & \frac{\partial f(x_1)}{\partial a_1} \\ \frac{\partial f(x_2)}{\partial a_0} & \frac{\partial f(x_2)}{\partial a_1} \\ \frac{\partial f(x_3)}{\partial a_0} & \frac{\partial f(x_3)}{\partial a_1} \\ \frac{\partial f(x_4)}{\partial a_0} & \frac{\partial f(x_4)}{\partial a_1} \\ \frac{\partial f(x_5)}{\partial a_0} & \frac{\partial f(x_5)}{\partial a_1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0,2212 & 0,1947 \\ 0,5276 & 0,3543 \\ 0,7135 & 0,3581 \\ 0,8262 & 0,3041 \\ 0,8946 & 0,2371 \end{bmatrix}.$$

$$\mathbf{b} = \begin{bmatrix} y_1 - f(x_1) \\ y_2 - f(x_2) \\ y_3 - f(x_3) \\ y_4 - f(x_4) \\ y_5 - f(x_5) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0,28 - 0,2212 \\ 0,57 - 0,5276 \\ 0,68 - 0,7135 \\ 0,74 - 0,8262 \\ 0,79 - 0,8946 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0,0588 \\ 0,0424 \\ -0,0335 \\ -0,0862 \\ -0,1046 \end{bmatrix}.$$

Nyní vyřešíme normální rovnice $\mathbf{A}^T \mathbf{A} \mathbf{z} = \mathbf{A}^T \mathbf{b}$ pro $\mathbf{z} = \begin{bmatrix} \Delta a_0 \\ \Delta a_1 \end{bmatrix}$. Dostaneme

$$\begin{bmatrix} \Delta a_0 \\ \Delta a_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -0,2714 \\ 0,5019 \end{bmatrix}.$$

Upravíme počáteční podmínku a získáme první iteraci

$$\begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -0,2714 \\ 0,5019 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0,7285 \\ 1,5019 \end{bmatrix}.$$

Celý proces opakujeme s počáteční podmínkou $\begin{bmatrix} 0,7285 \\ 1,5019 \end{bmatrix}$.

Literatura k dalšímu studiu

- Chapra S.: Applied Numerical Methods with MATLAB for Engineers and Scientists, Second Edition, McGraw-Hill, 2008.
- Kubíček M., Dubcová M., Janovská D.: Numerické metody a algoritmy. VŠCHT Praha, 2005 (second edition).
- Příklad P.: Numerické metody matematické analýzy. SNTL, Praha 1988.
- Shampine L. F., Allen R, C, Jr., and Pruess S.: Fundamentals of Numerical Computing. J. Wiley, New York 1997.
- Turzík D. et al: Matematika II. VŠCHT Praha, 2002.
- Upreti S. R.: Process Modeling and Simulation for Chemical Engineers. John Wiley & Sons Ltd. 2017.
- Vitásek E.: Numerické metody. SNTL, Praha 1987.