

Układy nieliniowych równań algebraicznych

Omówimy wybrane metody wyznaczania przybliżonych rozwiązań algebraicznych układów nieliniowych postaci:

$$\begin{cases} f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \\ f_2(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \\ \vdots \\ f_i(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \\ \vdots \\ f_n(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \end{cases} \quad (1)$$

W zwartej formie: $F(x) = 0$. Gdy $n=1$ układ zawiera pojedyncze równanie z jedną niewiadomą $f(x) = 0$ rozumiame wreszcie podział kursu Informatyka 2. Gdy $F(x) = Ax - b$ mamy do czynienia z układem równań liniowych.

Należy zwrócić uwagę na następujące cechy nieliniowych równań algebraicznych:

- 1) Nie istnieje ogólna metoda wyznaczania rozwiązań równań nieliniowych. Nie ma ogólnych twierdzeń gwarantujących istnienie rozwiązania. Z reguły istnieje więcej niż jedno rozwiązanie (vide chociażby r -mie kwadratowe).
- 2) Nie istnieją ogólne algorytmy „dokładne”, tj. pozwalające otrzymać rozwiązanie „idealne” w skończonej liczbie kroków i operacji arytmetycznych. Innymi słowy, w przypadku zadań nieliniowych jesteśmy skazani na algorytmy iteracyjne.

(2)

W zastosowaniach dość często mamy do czynienia z układami nieliniowymi o następującej postaci:

$$F(x) \equiv \underbrace{Ax}_{\substack{\rightarrow \text{część liniowa} \\ (A - \text{znana macierz})}} - \underbrace{N(x)}_{\rightarrow \text{część nieliniowa}} = 0 \quad (2)$$

Załóżmy, że macierz A jest nonsingularna. Naturalnym pomysłem na organizację procesu iteracyjnego prowadzącego do rozwiązania (2) jest metoda iteracji prostej. Mianowicie, możemy napisać:

$$Ax - N(x) = 0 \Rightarrow Ax = N(x) \\ \Downarrow \\ Ax^{n+1} = N(x^n), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (3)$$

W każdej iteracji należy rozwiązać układ liniowy z macierzą A (np. metodą eliminacji Gaussa). Ponieważ macierz A jest stała, dla umiarkowanych rozmiarów układu warto jest raz jeszcze dokonać dekompozycji L.U. Otrzymujemy wówczas metodę...

$$A = LU \Rightarrow \text{dla } n = 0, 1, 2, \dots \text{ aż do zbieżności} \\ \begin{cases} Ly = N(x^n) \\ Ux^{n+1} = y \end{cases} \quad (4)$$

Ponieważ istnieje A^{-1} metodę iteracji prostej można zapisać też w formie „standardowej”:

$$x^{n+1} = A^{-1} N(x^n) \quad (5)$$

co jest szczególnym przypadkiem procesu iteracyjnego

$$x^{n+1} = G(x^n) \quad (6)$$

(3)

Proces (6) jest zbieżny do rozróżniacza (punktu stałego), czyli takiego $x_* \in \mathbb{R}^n$, że $x_* \equiv g(x_*)$ tylko wtedy, gdy punkt x_* jest atraktorem procesu (6). Ma to miejsce gdy promień spektralny macierzy Jacobiego odurorowania $g: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ obliczonej w x_* jest mniejszy od jedności;

Mamy zatem:

$$Dg(x_*) = \begin{bmatrix} \frac{\partial g_1}{\partial x_1} & \frac{\partial g_1}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial g_1}{\partial x_n} \\ \frac{\partial g_2}{\partial x_1} & \frac{\partial g_2}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial g_2}{\partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial g_n}{\partial x_1} & \frac{\partial g_n}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial g_n}{\partial x_n} \end{bmatrix} (x_*) \quad (7)$$

$$\text{lub } [Dg(x_*)]_{ij} = \frac{\partial g_i}{\partial x_j}(x_*), \quad x_* = [x_{1*}, x_{2*}, \dots, x_{n*}]^T$$

i warunkiem koniecznym zbieżności jest

$$\rho[Dg(x_*)] < 1 \quad (8)$$

Przypomnijmy, że promieniem spektralnym nazywamy najmniejszą liczbę nieujemną dodatnią ρ taką, że moduł każdej wartości własnej $|\lambda|$ tej macierzy spełnia nierówność $|\lambda| \leq \rho$.

Podany warunek jest warunkiem koniecznym. Typowo, metoda iteracyjna dla układu nieliniowego charakteryzuje się ponadto jedynie lokalną zbieżnością. Oznacza to, że zbieżność procesu (6) (lub (5)) może nastąpić jedynie wówczas, gdy wektor startowy x^0 jest położony ostatecznie blisko rozróżniacza x_* . Jest to sytuacja analogiczna gale w przypadku pojedynczego r-mia (vide notatki wykładowe do kursu Informatyka 2), tyle, że na ogół występuje w „ostrejszej” formie.

(4)

W dalszej części omówimy dwa sposoby wyznaczania przybliżonego rozwiązania równania $F(x)=0$, a mianowicie:

- metoda Newtona-Raphsona
- metoda Broydena

Metoda Newtona-Raphsona

Metoda NR jest uogólnieniem metody stycznych na przypadku wielowymiarowy. Przypomnijmy konstrukcję tej ostatniej koncentrując się na podejściu analitycznym. Niech $x^n \in \mathbb{R}$ oznacza przybliżenie rozwiązania równania $f(x)=0$ w kroku n -tym. W kroku $n+1$ -szym poszukujemy x^{n+1} w formie

$$x^{n+1} = x^n + \epsilon^n$$

gdzie ϵ^n jest mierzalną poprawką. W idealnej sytuacji wektora x^n o wielkość ϵ^n prowadzi do wyznaczenia rozwiązania x_* , tj. $f(x^n + \epsilon^n) = 0$. Stosując rozwinięcie w szeregu potęgowy otrzymujemy:

$$0 = f(x^n + \epsilon^n) = f(x^n) + f'(x^n)\epsilon^n + \frac{1}{2}f''(x^n)\epsilon^n^2 + \dots$$

Standardową metodę stycznych otrzymamy obcinając to rozwinięcie po członie liniowym, pisząc:

$$f(x^n) + f'(x^n)\epsilon^n = 0$$

skąd

$$\epsilon^n = - \frac{f(x^n)}{f'(x^n)} \equiv - \frac{f_n}{f'_n}$$

Ostatecznie otrzymujemy znaną z Informatyki 2 formułę

$$x^{n+1} = x^n - \frac{f(x^n)}{f'(x^n)} \quad (9)$$

(5)

Opisany sposób konstruacji procesu iteracyjnego można uogólnić na przypadek wielowymiarowy. Niech wektor \mathbf{x}^k będzie ostatnim przybliżeniem rozwiązania \mathbf{x}_* . Napiszemy dla f_i rozwinięcie w szeregi potęgowy ($i=1,2,\dots,n$):

$$f_i(\mathbf{x}^k + \mathbf{\varepsilon}^k) \equiv f_i(x_1^k + \varepsilon_1^k, x_2^k + \varepsilon_2^k, \dots, x_n^k + \varepsilon_n^k) =$$

$$= f_i(x_1^k, x_2^k, \dots, x_n^k) + \sum_{j=1}^n \frac{\partial f_i}{\partial x_j}(\mathbf{x}^k) \varepsilon_j^k + \underbrace{O(\mathbf{\varepsilon}^k)}_{\text{składniki wyższego rzędu}} \quad (10)$$

i przyrównujemy do zera odnuczając składowe wyższego rzędu.

Otrzymujemy liniowy układ równań dla poprawek $\varepsilon_1^k, \dots, \varepsilon_n^k$:

$$\sum_{j=1}^n \frac{\partial f_i}{\partial x_j}(\mathbf{x}^k) \varepsilon_j^k = -f_i(\mathbf{x}^k), \quad i=1,2,\dots,n \quad (11)$$

W zapisie macierowo-wektorowym ...

$$\mathbf{DF}(\mathbf{x}^k) \mathbf{\varepsilon}^k = -\mathbf{F}(\mathbf{x}^k) \quad (12)$$

macierz Jacobiego $\mathbf{F}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ obliczona w \mathbf{x}^k \rightarrow wektor poprawek $[\varepsilon_1^k, \varepsilon_2^k, \dots, \varepsilon_n^k]^T$

Podsumowując, algorytm Newtona-Raphsona przebiega następująco:

START: wybierz \mathbf{x}^0 ; oblicz $\mathbf{F}(\mathbf{x}^0)$;

DLA $k=0,1,2,\dots$ aż do zbieżności:

- zbuduj macierz Jacobiego $\mathbf{DF}(\mathbf{x}^k)$
- rozwiąż układ liniowy $\mathbf{DF}(\mathbf{x}^k) \mathbf{\varepsilon}^k = -\mathbf{F}(\mathbf{x}^k)$
- oblicz nowe przybliżenie $\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k + \mathbf{\varepsilon}^k$
- sprawdź kryterium zbieżności - jeśli nie spełnione kontynuuj.

Ćwiczenie: zaproponuj kryterium (kryteria) zbieżności.

(6)

Uwagi:

- 1) w teorii metody N-R pokazuje się, że w otoczeniu rozwiązania x_* osiąga ona „nominalnie” kwadratową zbieżność czyli

$$\|x^{k+1} - x_*\|_2 \leq C \|x^k - x_*\|_2^2 \leftarrow \text{kwadratowa zbieżność!}$$

gdzie C jest pewną dodatnią stałą. Aby tak było muszą być spełnione jednaki pewne warunki:

- 1) pochodne drugiego rzędu $\frac{\partial^2 f_i}{\partial x_j \partial x_k}$ muszą być ograniczone

co do modułu w otoczeniu x_*

- 2) macierz Jacobiego $DF(x_*)$ musi być nieosobliwa.

W praktyce „kwadratowa zbieżność” oznacza „szybka zbieżność”.

Ciekawostka: proces iteracyjny Newtona - Raphsona można zapisać w formie iteracji prostej $x^{k+1} = g(x^k)$.

Łatwo więc:

$$x^{k+1} = x^k - [DF(x^k)]^{-1} F(x^k)$$

$$\forall k \rightarrow \infty \text{ i } x^k \rightarrow x_*$$

$$x_* = x_* - [DF(x_*)]^{-1} F(x_*)$$

stąd wynika, że $g(x) = x - [DF(x)]^{-1} F(x)$

Pomnożymy obustronnie przez $DF(x)$:

$$DF(x) g(x) = [DF(x)]x - F(x)$$

Odcieramy macierze Jacobiego transformacji po lewej i prawej stronie powyższej równości. Otrzymujemy...

$$D^2 F(x) g(x) + DF(x) Dg(x) = [D^2 F(x)]x + DF(x) - DF(x)$$

3-indeksowa
macierz pochodnych

Podstawmy $x = x_*$, wykonując $g(x_*) = x_*$...

$$\frac{\partial^2 f_i}{\partial x_j \partial x_k}$$

Otrzymamy równość $DF(x_*) Dg(x_*) = 0$

(7)

Jeśli w $x=x_*$ $DF(x_*)$ jest nieosobliwa, to otrzymana równość implikuje, że $DG(x_*) \equiv 0$. Wynika stąd, że promień spektralny $DG(x_*)$ jest równy zero! Właściwość ta jest ściśle związana z cechą kwadratowej błędności metody Newtona-Raphsona.

Przykład 1

$$\begin{cases} f_1(x_1, x_2) = x_1^2 + 2x_2^2 - 4 = 0 \\ f_2(x_1, x_2) = x_1^2 x_2 - x_2^3 + 1 = 0 \end{cases}$$

$$DF(x) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2}{\partial x_2} \end{bmatrix} (x_1, x_2) = \begin{bmatrix} 2x_1 & 4x_2 \\ 2x_1 x_2 & x_1^2 - 3x_2^2 \end{bmatrix}$$

Układ liniowy dla $[E_1^k, E_2^k]$ ma postać:

$$\begin{bmatrix} 2x_1^k & 4x_2^k \\ 2x_1^k x_2^k & (x_1^k)^2 - 3(x_2^k)^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_1^k \\ E_2^k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 - (x_1^k)^2 - 2(x_2^k)^2 \\ -1 + (x_2^k)^3 - (x_1^k)^2 x_2^k \end{bmatrix}$$

Ćwiczenie: czy wybór $x^0 \equiv [x_1^0, x_2^0] = [0, 0]$ jest dopuszczalny?

Przykład 2:

Poszukajmy metody N-R pierwiastków liczby zespolonej $c = c_1 + i c_2$

$$f(z) \equiv z^2 - c = 0 \Leftrightarrow \begin{cases} x_1^2 - x_2^2 - c_1 = 0 \leftarrow f_1(x_1, x_2) = 0 \\ x_1 x_2 - c_2 = 0 \leftarrow f_2(x_1, x_2) = 0. \end{cases}$$

$$z^2 = (x_1 + i x_2)^2 = x_1^2 - x_2^2 + i x_1 x_2$$

$$DF(x_1, x_2) = \begin{bmatrix} 2x_1 & -2x_2 \\ x_2 & x_1 \end{bmatrix} \Rightarrow \det DF(x_1, x_2) = 2(x_1^2 + x_2^2) \neq 0 \text{ jeśli } (x_1, x_2) \neq (0, 0)$$

Ćwiczenie: Rozwiąż analitycznie układ dla E_1^k i E_2^k i napisz jawny zapis procesu N-R!

(8)

Wady metody N-R:

1. Konieczność obliczenia macierzy Jacobiego - teoretycznie potrzebna jest analityczna forma funkcji $f_1(x), \dots, f_n(x)$.
2. Lokalna zbieżność wymaga nielubly bardzo dobrej lokalizacji wstępnej rozbieżności - wymagani często trudne do spełnienia.

Modyfikacje N-R - redukcja kosztów związanych z obliczaniem pochodnych i macierzy Jacobiego

1. Numeryczne różniczkowanie funkcji $f_i(x_1, \dots, x_n)$ ($i=1, \dots, n$) w celu obliczenia macierzy $DF(x^k)$:

$$[DF(x^k)]_{ij} \approx \frac{1}{h_j} [f_i(x_1^k, \dots, x_{j-1}^k, x_j^k + h_j, x_{j+1}^k, \dots, x_n^k) - f_i(x^k)]$$

np. tak! Liczba h_j - mała (ale nie za mała!) np. 10^{-3}

2. Stosowanie aktualizacji macierzy Jacobiego co pewną liczbę kroków:

- obliczamy $DF(x^k)$
- iterujemy $x^{k+l+1} = x^{k+l} - [DF(x^k)]^{-1} F(x^{k+l})$
 $l = 0, \dots, L-1$

- obliczamy $DF(x^{k+L})$ itd.

Cena - utrata kwadratowej zbieżności

Modyfikacja metody N-R - pokonywanie ograniczeń lokalnej zbieżności

1. Metoda Newtona-Raphsona z podziałami

Idea: wyznaczamy nowe przybliżenie x^{m+1} ze wzoru

$$x^{m+1} = x^m + \lambda \varepsilon^m$$

gdzie $\lambda \in (0, 1]$ dobrana jest tak, aby zapewnić, że $\|F(x^{m+1})\|_2 \leq \|F(x^m)\|_2$

(9)

Metoda N-R z podrelaksacją - c.d.

Wg standardowej metody N-R dla układu $F(x) = 0$ mamy
 $x^{n+1} = x^n + \varepsilon^n$, gdzie $\varepsilon^n = -[DF(x^n)]^{-1}F(x^n)$.

Ornierzmy dla uproszczenia $s = x^n$. Mamy

$$\varepsilon = -[DF(s)]^{-1}F(s)$$

Zdefiniujmy funkcję $g(s) := \frac{1}{2} \|F(s)\|_2^2 = \frac{1}{2} F^T(s)F(s)$

Zminimalizujemy $g(s)$ względem kierunku zadanego przez wektor ε . Zauważmy, że $g(s)$ istotnie porządkiem maleje:

$$\underbrace{D_\varepsilon g(s)}_{\text{pochodna kierunkowa}} \equiv (\nabla g)^T \varepsilon = -\{[DF(s)]^T F(s)\}^T [DF(s)]^{-1} F(s) =$$

$$(\nabla g(s) = [DF(s)]^T F(s) - \text{dlaczego?!})$$

$$= -F^T(s) \underbrace{DF(s) \cdot [DF(s)]^{-1}}_I F(s) = -2g(s) < 0!$$

Dobierzmy także λ , że $g(s + \lambda \varepsilon)$ jest najmniejsza. W praktyce to niemykalnie (w prosty sposób!), ale możemy pokusić się o aproksymację $g(s + \lambda \varepsilon)$ przez funkcję kwadratową i ją zminimalizować! Szukamy zatem $h(\lambda) = h_0 + h_1 \lambda + h_2 \lambda^2$ takiej, że:

$$h(0) = h_0 = g(s) = \frac{1}{2} F^T(s)F(s)$$

$$h(1) = h_0 + h_1 + h_2 = g(s + \varepsilon) = \frac{1}{2} F^T(s + \varepsilon)F(s + \varepsilon)$$

$$h'(0) = (\nabla g)^T \varepsilon = -2g(s) = -F^T(s)F(s)$$

$$\hookrightarrow h_1$$

(10)

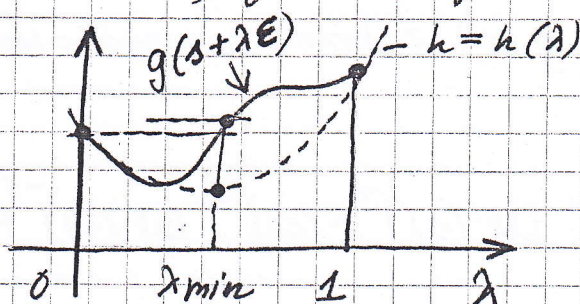
Łatwo sprawdzić, że:

$$h(\lambda) = g(s) - 2g(s)\lambda + [g(s) + g(s+\epsilon)]\lambda^2$$

i poszukiwane minimum osiągnięte jest dla

$$\lambda_{\min} = \frac{g(s)}{g(s) + g(s+\epsilon)}$$

W praktyce wybór $\lambda = \lambda_{\min}$ nie gwarantuje, że $g(s + \lambda_{\min}\epsilon)$ jest mniejsze od $g(s)$.



Stosowany bywa trik zwany strategią Armijo-Goldsteina:

za kolejne przybliżenie przyjmujemy

$$x^{n+1} = x^n + \lambda_* \epsilon^n$$

gdzie λ_* to najbliższy numer z zeru $1, \frac{1}{2}, \frac{1}{4}, \frac{1}{8}, \dots$

taki, że:

$$g(s) - g(s + \lambda_* \epsilon) \geq \frac{1}{2} \lambda_* g(s)$$

Innymi słowy, realizujemy petle:

dla $k = 0, 1, 2, \dots$:

$$\lambda_* = \frac{1}{2^k}$$

$$\text{aż } g(s + \lambda_* \epsilon) \leq (1 - \frac{1}{2} \lambda_*) g(s)$$

(z powyższej formuły wynika, że parametr podrelaksacji przyjmuje maksymalną wartość równą 1 tylko wtedy gdy $\|F(x^{n+1})\|_2$ jest nie większa niż 50% normy $\|F(x^n)\|_2$.)

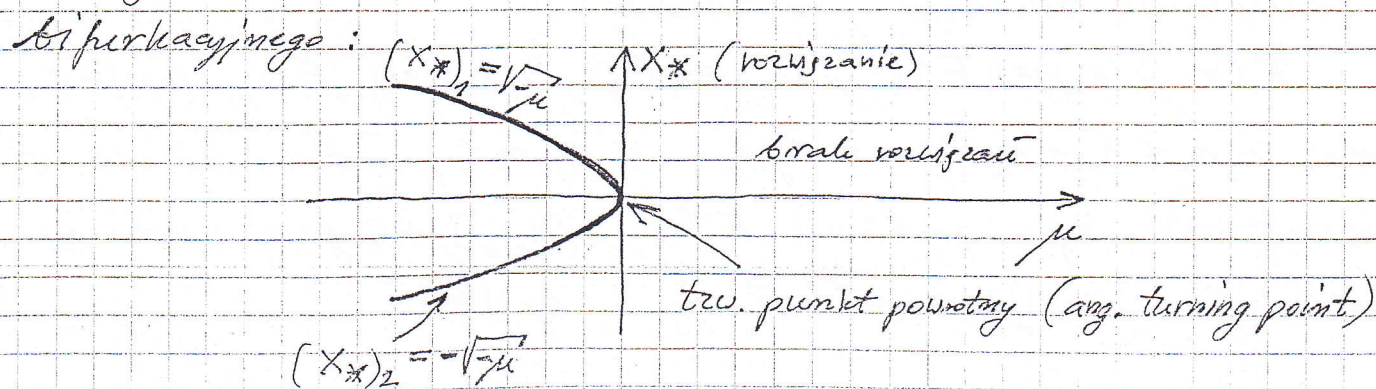
2. Kontynuacja po parametry

W zastosowaniach technicznych i naukowych nieliniowe układy równań mają typowo pewną liczbę parametrów. Oznaczmy $\mu = \{\mu_1, \dots, \mu_k\}$ listę tych parametrów. Sparametryzowany układ nieliniowy może być zapisany zwięźle jako $F(x, \mu) = 0$. Jeśli istnieje (przynajmniej lokalnie) jednoznaczna zależność rozwiązania od parametrów tj. odwzorowanie $x = x(\mu)$ to mówimy o gałęzi rozwiązań układu. Wzdłuż każdej z gałęzi rozwiązanie x zależy w sposób ciągły (a może i różniczkowalny) od parametrów μ .

W typowym przypadku, istnienie jednoznacznie określonej zależności $x = x(\mu)$ jest zagwarantowane tylko lokalnie (wynika to z fundamentalnego twierdzenia o odwzorowaniu uwikłanym). Jednoznaczność i/lub istnienie gałęzi rozwiązań są utracone jeśli μ przyjmuje tzw. wartość bifurkacyjną (czyli zachodzi bifurkacja). Zjawisko to można zademonstrować na prostych przykładach.

Rozważmy równanie kwadratowe postaci $f(x) = x^2 + \mu = 0$. Równanie to posiada 2 rozwiązania ^{nieczyłiste} dla każdej liczby rzeczywistej $\mu < 0$, jedno ($x_* = 0$) dla $\mu = 0$ i żadnego dla $\mu > 0$.

Mozemy zilustrować ten fakt za pomocą tzw. diagramu



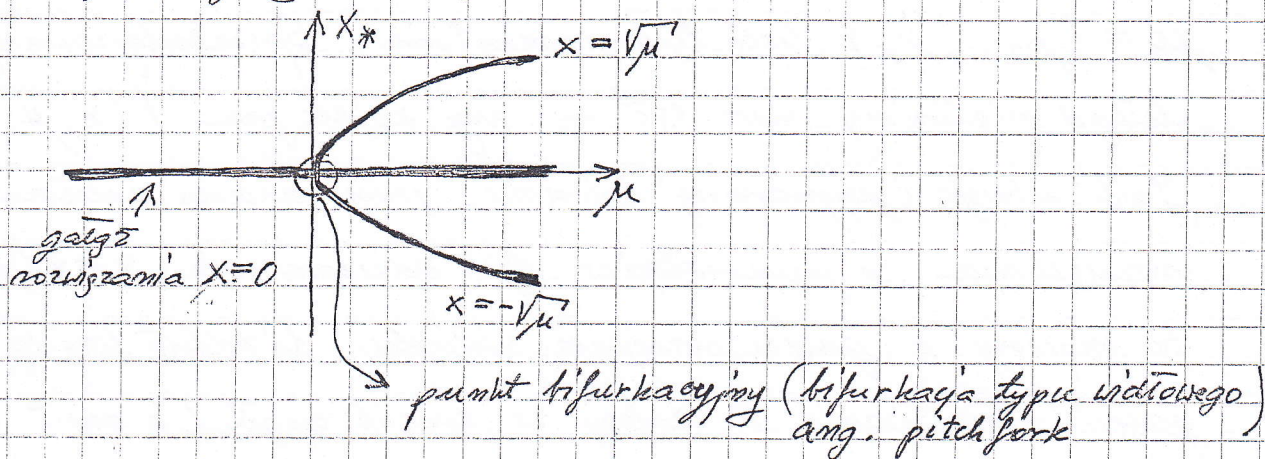
(12)

Rozważmy teraz $f(x) = x^3 - \mu x = (x^2 - \mu)x$.

Dla $\mu \leq 0$ mamy jedno rozwiązanie $(x_*)_1 = 0$, a dla

$\mu > 0$: trzy rozwiązania $(x_*)_1 = 0$, $(x_*)_2 = \sqrt{\mu}$ i $(x_*)_3 = -\sqrt{\mu}$

Diagram bifurkacyjny ma postać



Zatem, że potrzebujemy wyznaczyć rozwiązanie układu nieliniowego

$$F(x, \mu) = 0 \text{ dla danego układu wartości parametrów } \mu = \tilde{\mu}$$

Okazuje się jednak, że wybór odpowiedniego wektora startowego x^0 jest trudny do odgadnięcia - proces iteracyjny N-R odbywa „na manowce”!

Zatem dalej, że poszukiwane rozwiązanie $x(\tilde{\mu})$ należy do tej

samej gałęzi rozwiązań co rozwiązanie dla innego zestawu parametrów $\mu = \mu_0$ oraz $x(\mu_0)$ jest relatywnie łatwo

wyznaczyć (bo, na przykład, $F(x, \mu_0) = 0$ jest de facto

problemem liniowym). Zdefiniujemy „trajektorię” w przestrzeni

parametrów łączącą punkt μ_0 z punktem docelowym $\tilde{\mu}$; tj.

talne odniesienie $\mu = \mu(s)$, $s \in [0, 1]$, że $\mu(0) = \mu_0$ i

$\mu(1) = \tilde{\mu}$. Idea kontynuacji po parametrze s polega na

rozwiązaniu sekwencji problemów

$$F(x, \mu(s_1)) = 0, F(x, \mu(s_2)) = 0, F(x, \mu(s_3)) = 0, \dots, F(x, \mu(s_j)) = 0, \dots$$

dla $0 = s_0 < s_1 < s_2 < \dots < s_j < \dots < s_M = 1$, w taki sposób, że

rozwiązanie x_{j-1} problemu $F(x, \mu(s_{j-1})) = 0$ jest wektorem

startowym dla problemu $F(x, \mu(s_j)) = 0$.

Co gdy problem nieliniowy jest porobiony parametrami nadających się do zorganizowania kontynuacji? Możemy wprowadzić taki parametr sztucznie stosując metodę homotopii. Niech zatem $F(x) = 0$ będzie problemem docelowym, a $F_0(x) = 0$ — problemem pomocniczym łatwym do rozwiązania. Konstrukujemy problem sparametryzowany postaci

$$G(x, \mu) := (1 - \mu)F_0(x) + \mu F(x) \quad \mu \in [0, 1]$$

czyli taki, że $G(x, 0) \equiv F_0(x)$ oraz $G(x, 1) \equiv F(x)$, a następnie stosujemy technikę kontynuacji parametryzowanej.

Zauważmy, że możemy ulepszyć metodę określania wektora startowego do następnego etapu kontynuacji. Jeśli zmienimy μ o niewielki przyrost $\Delta\mu$ to na regularnej gałęzi rozwiązania wektor x zmieni się o niewielki przyrost E taki, że:

$$G(x + E, \mu + \Delta\mu) = 0$$

Rozwijając w szeregi potęgowe otrzymamy

$$\underbrace{DG(x, \mu)}_{\text{macierz Jacobiego ze względu na } x} E + \underbrace{\Delta\mu \cdot \frac{\partial}{\partial \mu} G(x, \mu)}_{\text{wektor pochodnych ze względu na } \mu} = 0$$

Z definicji $G(x, \mu)$ wynika, że

$$DG(x, \mu) = \mu [DF(x) - DF_0(x)]$$

$$\text{oraz} \quad \frac{\partial}{\partial \mu} G(x, \mu) = F(x) - F_0(x)$$

Wektor startowy dla kolejnego kroku kontynuacji można określić jako $x + E$ (x jest tu rozwiązaniem uzyskanym w kroku poprzednim), gdzie E jest rozwiązaniem liniowego układu równań

$$[DF(x) - DF_0(x)] E = - \frac{\Delta\mu}{\mu} [F(x) - F_0(x)]$$

Uogólnienie metody siecznych - metoda Broydena

Przypomnijmy, że metoda siecznych dla pojedynczego równania nieliniowego $f(x)=0$ ma postać procesu iteracyjnego określonego wzorem:

$$x^{n+1} = x^n - \left[\frac{f(x^n) - f(x^{n-1})}{x^n - x^{n-1}} \right]^{-1} f(x^n) \quad (1)$$

Można napisać formułę

$$x^{n+1} = x^n - C_n^{-1} f(x^n) \quad (2)$$

$$\text{gdzie } C_n = [f(x^n) - f(x^{n-1})] / (x^n - x^{n-1}). \quad (3)$$

Koncepcja metody Broydena polega na wprowadzeniu procesu iteracyjnego wzorem, stanowiącym n -wymiarowy analogon formuły metody siecznych. Postulujemy mianowicie wzór

$$x^{n+1} = x^n - C_n^{-1} F(x^n) \quad (4)$$

gdzie C_n jest macierzą (aproksymującą macierz Jacobiego) taką, że:

$$F(x^n) - F(x^{n-1}) = C_n (x^n - x^{n-1}) \quad (5)$$

W przeciwieństwie do przypadku jednowymiarowego, formuła (5) nie określa macierzy C_n jednoznacznie. Broyden założył

że dla dowolnego wektora v prostopadłego do wektora $\Delta x^n = x^n - x^{n-1}$ (tj. $(\Delta x^n)^T v = 0$)

spełniona jest równość $C_n v = C_{n-1} v$. Wówczas macierze C_n określone są przez następujący wzór rekurencyjny

$$C_n = C_{n-1} + \frac{\Delta F^n - C_{n-1} \Delta x^n}{\|\Delta x^n\|_2^2} (\Delta x^n)^T \quad (6)$$

(15)

gdzie $\Delta F^m = F(x^m) - F(x^{m-1})$.

Zauważmy, że macierz C_m określona jako suma macierzy C_{m-1} zmodyfikowanej o macierz postaci

$$\Delta C_m = \frac{1}{\|\Delta x^m\|_2^2} \underbrace{(\Delta F^m - C_{m-1} \Delta x^m)}_{\substack{\begin{bmatrix} \Delta F^m \\ -C_{m-1} \Delta x^m \end{bmatrix}_{n \times 1}}} \underbrace{(\Delta x^m)^T}_{\substack{[\Delta x^m]_{1 \times n}}}$$

Pamiętajmy, że iloczyn postaci ab^T (a, b to wektory kolumnowe) to macierz kwadratowa taka, że $(ab^T)_{ij} = a_i b_j$. Rząd tej macierzy wynosi 1 bowiem dla dowolnego wektora v iloczyn

$$(ab^T)v = a(b^T v) \equiv (b^T v)a$$

↓
liczba - iloczyn skalarny
wektorów b i v

jest wektorem równoległym do wektora a (czyli każdy wektor v jest transformowany na „kierunek” a)

Zauważmy, że macierz C_m spełnia postulowany warunek (5):

$$\begin{aligned} C_m \Delta x^m &= C_{m-1} \Delta x^m + \frac{1}{\|\Delta x^m\|_2^2} (\Delta F^m - C_{m-1} \Delta x^m) \underbrace{(\Delta x^m)^T \Delta x^m}_{\|\Delta x^m\|_2^2} = \\ &= C_{m-1} \Delta x^m + \Delta F^m - C_{m-1} \Delta x^m = \Delta F^m \end{aligned}$$

Reasumując, podstawowy wariant metody Broydena polega na prowadzeniu procesu iteracyjnego:

- 1) oblicz C_m z formuły (6)
- 2) wyznacz ε^m z układu liniowego $C_m \varepsilon^m = F(x^m)$
- 3) oblicz nowe przybliżenie $x^{m+1} = x^m - \varepsilon^m$

Dodatkowo, należy określić „startową” macierz C_0 .

W tej roli może wystąpić macierz Jacobiego $DF(x^0)$ (obliczona pmy. pomocy ścisłego (analitycznego) lub przybliżonego (numerycznego) różniczkowania).

Wadzą podstawowej metody Broydena jest konieczność rozwiązywania w każdym kroku liniowego układu równań. Okazuje się, że można tak reformułować algorytm, że konieczność rozwiązywania układu liniowego jest ucyelowana!

Jest to możliwe dzięki „cudownej” formule Shermana-Morrisona.

Załóżmy, że liczba $1 + v^T A^{-1} u \neq 0$ (u, v - pewne wektory, A - macierz, oczywiście nieosobliwa). Wówczas ma miejsce równość:

$$(A + uv^T)^{-1} = A^{-1} - \frac{1}{1 + v^T A^{-1} u} A^{-1} u v^T A^{-1}$$

Dowód: sprawdzimy, że prawa strona istotnie definiuje macierz odwrotną do $A + uv^T$:

$$\begin{aligned} (A + uv^T) \left(A^{-1} - \frac{1}{1 + v^T A^{-1} u} A^{-1} u v^T A^{-1} \right) &= \\ = I - \frac{1}{1 + v^T A^{-1} u} uv^T A^{-1} + uv^T A^{-1} - \frac{1}{1 + v^T A^{-1} u} \underbrace{uv^T A^{-1} uv^T A^{-1}}_{\text{liczba!}} &= \\ = I - \frac{1}{1 + v^T A^{-1} u} uv^T A^{-1} + uv^T A^{-1} - \frac{v^T A^{-1} u}{1 + v^T A^{-1} u} uv^T A^{-1} &= \\ = I + \underbrace{\left(1 - \frac{1}{1 + v^T A^{-1} u} - \frac{v^T A^{-1} u}{1 + v^T A^{-1} u} \right)}_0 uv^T A^{-1} &= I \end{aligned}$$

(17)

$$\begin{aligned}
& \left(A^{-1} - \frac{1}{1 + v^T A^{-1} u} A^{-1} u v^T A^{-1} \right) (A + u v^T) = \\
& = I + A^{-1} u v^T - \frac{1}{1 + v^T A^{-1} u} A^{-1} u v^T - \frac{1}{1 + v^T A^{-1} u} \underbrace{A^{-1} u v^T A^{-1} u v^T}_{\text{ciąba}} = \\
& = I + \underbrace{\left(1 - \frac{1}{1 + v^T A^{-1} u} - \frac{v^T A^{-1} u}{1 + v^T A^{-1} u} \right)}_0 A^{-1} u v^T = I
\end{aligned}$$

Zastosujemy formuły Shermana-Homisona do odwrócenia macierzy C_n . Zgodnie ze wzorem (6) macierz C_n jest określona w sposób umożliwiający zastosowanie formuły S-H; wystarczy bowiem przyjąć:

$$A = C_{n-1}, \quad u = \frac{1}{\|\Delta x^n\|_2^2} (\Delta F^n - C_{n-1} \Delta x^n), \quad v = \Delta x^n.$$

Mamy zatem:

$$C_n^{-1} = C_{n-1}^{-1} + \frac{1}{(\Delta x^n)^T C_{n-1}^{-1} \Delta F^n} (\Delta x^n - C_{n-1}^{-1} \Delta F^n) (\Delta x^n)^T C_{n-1}^{-1}$$

Wskazując, mamy bowiem

$$\begin{aligned}
1 + v^T A^{-1} u &= 1 + (\Delta x^n)^T C_{n-1}^{-1} \frac{1}{\|\Delta x^n\|_2^2} (\Delta F^n - C_{n-1} \Delta x^n) = \\
&= 1 + \frac{1}{\|\Delta x^n\|_2^2} (\Delta x^n)^T C_{n-1}^{-1} \Delta F^n - \frac{1}{\|\Delta x^n\|_2^2} (\Delta x^n)^T \underbrace{C_{n-1}^{-1} C_{n-1}}_I \Delta x^n = \\
&= 1 + \frac{1}{\|\Delta x^n\|_2^2} (\Delta x^n)^T C_{n-1}^{-1} \Delta F^n - 1 = \\
&= \frac{1}{\|\Delta x^n\|_2^2} (\Delta x^n)^T C_{n-1}^{-1} \Delta F^n
\end{aligned}$$

oraz ...

$$A^{-1}uv^T A^{-1} = C_{m-1}^{-1} \frac{1}{\|\Delta x^m\|_2^2} (\Delta F^m - C_{m-1} \Delta x^m)(\Delta x^m)^T C_{m-1}^{-1} =$$

$$= \frac{1}{\|\Delta x^m\|_2^2} (C_{m-1}^{-1} \Delta F^m - \Delta x^m)(\Delta x^m)^T C_{m-1}^{-1}$$

Uzyskałszy zatem rekurencyjną formułę pozwalającą na efektywne obliczanie odwrotności macierzy odwrotnych C_n^{-1} !

Podsumowując, algorytm Broydena to:

START: określ wektor startowy x^0 i macierz B_0 (np. jako macierz jednostkową I lub aproksymację macierzy odwrotnej do $DF(x^0)$).

DLA $k = 1, 2, 3 \dots$ aż do zbieżności:

- 1) $x^k = x^{k-1} - B_{k-1} F(x^{k-1})$
- 2) $h^k = x^k - x^{k-1}$; $g^k = F(x^k) - F(x^{k-1})$
- 3) $B_k = B_{k-1} + \frac{1}{(h^k)^T B_{k-1} g^k} (h^k - B_{k-1} g^k)(h^k)^T B_{k-1}$