

6. gaia

Ekuazio ez-linealen sistemen ebazpena

Ikasgai honetan aldagai anitzeko problemekin arituko gara, eta gure helburua ekuazio ez-linealen sistematik ebaztea izango da, algoritmo lokalen bidez. Newton-en metodoarekin hasiko gara eta haren inplementazioa eta ezaugarriak aztertuko ditugu.

6.1. Newton-en metodoa

Izan bedi $\mathbf{f} : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ funtzioa eta $\mathbf{f} \in C^1$ (hots, lehenengo ordenako deribatu partzial guztiak funtzio jarraituak dira), non f_1, \dots, f_n bere osagaiak baitira. Ebatzi behar dugun ekuazioa zera da:

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{0} \tag{6.1}$$

Aldagai bateko funtzioen kasurako bezala, hemen ere metodo iteratibo bat erabiliko dugu $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^n$ puntu batetik abiatuz. Demagun k -garren iterazioan dagoela prozesu hori; orduan, puntu horren inguruan, hau da Tayloren lehenengo ordenako garapena:

$$\mathbf{M}_k(\mathbf{x}_k) = \mathbf{f}(\mathbf{x}_k) + \mathbf{J}(\mathbf{x}_k)(\mathbf{x} - \mathbf{x}_k),$$

non $\mathbf{J}(\mathbf{x}_k)$ matrizea \mathbf{f} -ren jacobiarra baita \mathbf{x}_k puntuan (hots, \mathbf{f} -ren lehenengo ordenako deribatua da puntu horretan); honela definitzen da:

$$\mathbf{J}(\mathbf{x}_k) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1}(\mathbf{x}_k) & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n}(\mathbf{x}_k) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_n}{\partial x_1}(\mathbf{x}_k) & \dots & \frac{\partial f_n}{\partial x_n}(\mathbf{x}_k) \end{bmatrix}$$

Jarraian, (6.1) ekuazioan $\mathbf{f}(\mathbf{x})$ -ren ordeaz \mathbf{x}_k -ren inguruko $\mathbf{M}_k(\mathbf{x}_k)$ hurbilpen lineala jarriko dugu, alegia:

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}_k) + \mathbf{J}(\mathbf{x}_k)(\mathbf{x} - \mathbf{x}_k) = \mathbf{0}.$$

Ekuazio horren soluzioa $\mathbf{x} = \mathbf{x}_k - \mathbf{J}(\mathbf{x}_k)^{-1}\mathbf{f}(\mathbf{x}_k)$ denez, hau da Newtonen metodoaren iterazioa:

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \mathbf{J}(\mathbf{x}_k)^{-1}\mathbf{f}(\mathbf{x}_k) \quad (6.2)$$

Newtonen $\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k$ urratsak $\mathbf{x}^* - \mathbf{x}_k$ -ren hurbilpen bat ematen digu.

Geometrikoki, aldagai bateko funtzioetarako, Newton-Raphsonen metodoan $f(x)$ -ren hurbilpena x_k puntuko zuzen ukitzailea zen. Ekuazio ez-linealen sistemetaranaizko, $f_i(x) = 0$ ekuazio bakoitza hurbiltzen da \mathbf{x}_k puntuko (hiper)plano ukitzaileaz, hots:

$$f_i(\mathbf{x}_k) + \nabla f_i(\mathbf{x}_k)(\mathbf{x} - \mathbf{x}_k) = 0$$

eta ekuazio ez-linealen sistemaren soluzioa, (6.2) -k definitutakoa, plano ukitzaile horien guztien ebakitze-puntua da.

6.1. Adibidea. Izan bitez funtzio hauek:

$$\begin{aligned} f_1(x, y) &= x^2 - 2x - y + 0.5 \\ f_2(x, y) &= x^2 + 4y^2 - 4. \end{aligned}$$

Gure helburua ekuazio-sistema hau ebaztea da:

$$\begin{aligned} f_1(x, y) &= 0 \\ f_2(x, y) &= 0. \end{aligned}$$

Ebazpena. $f_1(x, y) = 0$ eta $f_2(x, y) = 0$ ekuazioek XOY planoko bi kurba definitzen dituzte; beraz, sistema horren soluzioa bi kurben (\bar{x}, \bar{y}) ebakitze-puntu bat da. Sistemako kurbak oso ezagunak dira:

$$\begin{aligned} x^2 - 2x - y + 0.5 = 0 & \quad \text{parabola bat da,} \\ x^2 + 4y^2 - 4 = 0 & \quad \text{elipse bat da.} \end{aligned}$$

Sistema horrek bi soluzio (bi ebakitze-puntu) ematen ditu, $(-0.2, 1.0)$ eta $(1.9, 0.3)$ puntuetatik hurbil daudenak.

Newtonen metodoan, $(x_0, y_0) = (0, 1)$ puntutik abiatzen bagara, zera dugu:

$$\begin{aligned} \nabla f_1(x, y) = (2x - 2, -1) & \Rightarrow \nabla f_1(0, 1) = (-2, -1) \\ \nabla f_2(x, y) = (2x, 8y) & \Rightarrow \nabla f_2(0, 1) = (0, 8) \end{aligned}$$

Ondorioz, hauek dira ukitzaileen ekuazioak:

$$\begin{aligned} f_1(0, 1) + \nabla f_1(x_0, y_0) \begin{bmatrix} x - x_0 \\ y - y_0 \end{bmatrix} = 0 & \Rightarrow -0.5 + (-2, -1) \begin{bmatrix} x - 0 \\ y - 1 \end{bmatrix} = 0 \\ f_2(0, 1) + \nabla f_2(x_0, y_0) \begin{bmatrix} x - x_0 \\ y - y_0 \end{bmatrix} = 0 & \Rightarrow 0 + (0, 8) \begin{bmatrix} x - 0 \\ y - 1 \end{bmatrix} = 0 \end{aligned}$$

horrek sistema hau inplikutzen du:

$$\begin{aligned} -2x - y + 0.5 &= 0 \\ y - 1 &= 0 \end{aligned}$$

eta ebatziz, hau lortzen dugu:

$$x = -0.25 \quad y = 1$$

eta (6.2) iterazioaz $(x_1, y_1) = (-0.25, 1)$ dugu.

Prozesu hori jarraituz, lau iteraziotan $(x_4, y_4) = (-0.2223147, 0.9938121)$ dugu, eta $f_1(x_4, y_4) = 0.000241126$ eta $f_2(x_4, y_4) = 0.000073786$.

Hau izango da errorean tamaina:

$$\|(f_1(x_4, y_4), f_2(x_4, y_4))\|_\infty = \|(0.000241126, 0.000073786)\|_\infty = 0.000241126.$$

Jarritako errorearen tolerantzia maximoa 0.001 izan bada, soluzio hori onargarria da. \square

6.1. algoritmoa. Newtonen metodoa, ekuazio ez-linealen sistemetarako.

0 urratsa. SARRERA. Sartu: $\mathbf{f}(\mathbf{x})$, \mathbf{x}_0 (hasierako puntua) $ze > 0$ (zehaztasun erlatiboa), $emax > 0$ (errorearen tolerantzia) eta $imax$ (iterazioen kopuru maximoa). Jarri $k = 0$

1 urratsa. Kalkulatu $\mathbf{f}(\mathbf{x}_k)$ eta $\mathbf{J}(\mathbf{x}_k)$.

2 urratsa. Ebatzi sistema lineal hau:

$$\mathbf{J}(\mathbf{x}_k)\mathbf{p}_k = -\mathbf{f}(\mathbf{x}_k). \quad (6.3)$$

3 urratsa. Kalkulatu hurrengo puntua:

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \mathbf{p}_k$$

4 urratsa. Baldin $\|\mathbf{p}_k\|/\|\mathbf{x}_{k+1}\| < ze$ edo $\|\mathbf{f}(\mathbf{x}_{k+1})\| < emax$ edo $k \geq imax$ bada, gelditu egiten da. Bestela, $k = k + 1$ egiten da eta 1 urratsera goaz.

5 urratsa. IRTEERA. Emaitza: \mathbf{x}_{k+1} .

Algoritmo horren 2. urratsean (6.20) Newtonen sistema ebatzi behar dugu. Urrats horretan, LU deskonposizioa edo QR faktORIZAZIOA erabil ditzakegu.

6.2. Adibidea. Izan bedi $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} x + y - 3 \\ x^2 + y^2 - 9 \end{bmatrix}$. Ebatzi $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ sistema.

Ebazpena. Sistema horrek $(3, 0)^t$ eta $(0, 3)^t$ erroak ditu. Izan bedi $\mathbf{x}_0 = (1, 5)^t$. Orduan, hauek dira Newtonen lehenengo bi iterazioak:

$$\mathbf{J}(\mathbf{x}_0)\mathbf{p}_0 = -\mathbf{f}(\mathbf{x}_0) \Rightarrow \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 10 \end{bmatrix} \mathbf{p}_0 = -\begin{bmatrix} 3 \\ 17 \end{bmatrix} \Rightarrow \mathbf{p}_0 = \begin{bmatrix} -13/8 \\ -11/8 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{x}_1 = \mathbf{x}_0 + \mathbf{p}_0 = (-0.625, 3.625)^t,$$

$$\mathbf{J}(\mathbf{x}_1)\mathbf{p}_1 = -\mathbf{f}(\mathbf{x}_1) \Rightarrow \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -5/4 & 29/4 \end{bmatrix} \mathbf{p}_1 = -\begin{bmatrix} 0 \\ 145/32 \end{bmatrix} \Rightarrow \mathbf{p}_1 = \begin{bmatrix} 145/272 \\ -145/272 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{x}_2 = \mathbf{x}_1 + \mathbf{p}_1 = (-0.092, 3.092)^t.$$

Ikus dezakegunez, $(0, 3)^t$ soluziotik nahiko hurbil dago \mathbf{x}_2 . \square

6.1.1. Newtonen metodoaren konbergentzia lokala

6.1. Lema. Izan bedi $\mathbf{f} : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ etengabe diferentziagarria $\mathcal{D} \subset \mathbb{R}^n$ multzo konberu irekian. Orduan, hau betetzen da $\mathbf{x}, \mathbf{x} + \mathbf{p} \in \mathcal{D}$ guztietarako:

$$\mathbf{f}(\mathbf{x} + \mathbf{p}) - \mathbf{f}(\mathbf{x}) = \int_0^1 \mathbf{J}(\mathbf{x} + t\mathbf{p})\mathbf{p} dt \equiv \int_{\mathbf{x}}^{\mathbf{x}+\mathbf{p}} \mathbf{f}'(z) dz. \quad (6.4)$$

6.1. Definizioa. Izan bedi $\mathbf{G} : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^{m \times n}$, $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$. Orduan, \mathbf{G} funtzio bektoriala \mathbf{x} puntuko γ -Lipschitz jarraitua dela esango dugu, $\mathcal{D} \subset \mathbb{R}^n$ multzo irekia, $\mathbf{x} \in \mathcal{D}$, eta γ konstante bat existitzen badira, non $\mathbf{v} \in \mathcal{D}$ guztietarako hau betetzen baita:

$$\|\mathbf{G}(\mathbf{v}) - \mathbf{G}(\mathbf{x})\| \leq \gamma \|\mathbf{v} - \mathbf{x}\|. \quad (6.5)$$

Hori gertatzen denean, honela adieraziko dugu: $\mathbf{G} \in Lip_\gamma(\mathcal{D})$.

6.2. Lema. Izan bedi $\mathbf{f} : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ etengabe diferentziagarria $\mathcal{D} \subset \mathbb{R}^n$ multzo konberu irekian, eta izan bedi \mathbf{J} γ -Lipschitz jarraitua $\mathbf{x} \in \mathcal{D}$ puntuaren \mathcal{D} ingurunean, hots $\mathbf{J} \in Lip_\gamma(\mathcal{D})$, bektore-norma bat eta berak eragindako matrize-norma erabiliz. Orduan, hau betetzen da $\mathbf{x} + \mathbf{p} \in \mathcal{D}$ guztietarako:

$$\|\mathbf{f}(\mathbf{x} + \mathbf{p}) - \mathbf{f}(\mathbf{x}) - \mathbf{J}(\mathbf{x})\mathbf{p}\| \leq \frac{\gamma}{2} \|\mathbf{p}\|^2. \quad (6.6)$$

Frogantza. Aurreko Lemaren arabera,

$$\begin{aligned} \mathbf{f}(\mathbf{x} + \mathbf{p}) - \mathbf{f}(\mathbf{x}) - \mathbf{J}(\mathbf{x})\mathbf{p} &= \int_0^1 \mathbf{J}(\mathbf{x} + t\mathbf{p})\mathbf{p} dt - \mathbf{J}(\mathbf{x})\mathbf{p} \\ &= \int_0^1 (\mathbf{J}(\mathbf{x} + t\mathbf{p}) - \mathbf{J}(\mathbf{x}))\mathbf{p} dt. \end{aligned}$$

Orain, eragindako matrize-normaren definizioa eta \mathbf{J} -ren γ -Lipschitz jarraitutasuna erabiliz \mathbf{x} -ren \mathcal{D} ingurunean, hau dugu:

$$\begin{aligned} \|\mathbf{f}(\mathbf{x} + \mathbf{p}) - \mathbf{f}(\mathbf{x}) - \mathbf{J}(\mathbf{x})\mathbf{p}\| &\leq \int_0^1 \|(\mathbf{J}(\mathbf{x} + t\mathbf{p}) - \mathbf{J}(\mathbf{x}))\| \cdot \|\mathbf{p}\| dt \\ &\leq \int_0^1 \gamma \|t\mathbf{p}\| \cdot \|\mathbf{p}\| dt \\ &= \gamma \|\mathbf{p}\|^2 \int_0^1 t dt \\ &= \frac{\gamma}{2} \|\mathbf{p}\|^2. \quad \square \end{aligned}$$

Jarraian, ekuazio ez-linealen sistematarako, Newtonen metodoaren konbergentzia koadratiko lokala frogatuko dugu. Orain, \mathbf{x} -ren r erradioko ingurunea $\mathcal{B}_r(\mathbf{x}) = \{\bar{\mathbf{x}} \in \mathbb{R}^n \mid \|\bar{\mathbf{x}} - \mathbf{x}\| < r\}$ dugu. Ohartu $\mathbf{J} \in Lip_\gamma(\mathcal{B}_r(\mathbf{x}))$ adierazpenak zera esan nahi duela: \mathbf{J} γ -Lipschitz jarraitua dela $\mathbf{x} \in \mathcal{D}$ puntuaren $\mathcal{B}_r(\mathbf{x})$ ingurunean.

6.1. Teorema. *Izan bedi $\mathbf{f} : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ etengabe diferentziagarria $\mathcal{D} \subset \mathbb{R}^n$ multzo konbexu irekian. Demagun $\mathbf{x}^* \in \mathbb{R}^n$ eta $r, \beta > 0$ existitzen direla, non $\mathcal{B}_r(\mathbf{x}^*) \subset \mathcal{D}$, $\mathbf{f}(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}$, $\mathbf{J}(\mathbf{x}^*)^{-1}$ existitzen baita, $\|\mathbf{J}(\mathbf{x}^*)^{-1}\| \leq \beta$ izanik, eta $\mathbf{J} \in Lip_\gamma(\mathcal{B}_r(\mathbf{x}^*))$. Orduan, $\varepsilon > 0$ dago, non $\mathbf{x}_0 \in \mathcal{B}_\varepsilon(\mathbf{x}^*)$ guztietarako, ondorengo adierazpenak sortutako $\{\mathbf{x}_k\}$ segida ondo definituta baitago eta \mathbf{x}^* -era jotzen baitu:*

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \mathbf{J}(\mathbf{x}_k)^{-1} \mathbf{f}(\mathbf{x}_k), \quad k = 0, 1, \dots$$

eta, gainera,

$$\|\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}^*\| \leq \beta\gamma \|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*\|^2, \quad k = 0, 1, \dots \quad (6.7)$$

Frogantza. ε aukeratuko dugu $\mathbf{J}(\mathbf{x})$ ez-singularra izateko $\mathbf{x} \in \mathcal{B}_\varepsilon(\mathbf{x}^*)$ guztietan. Jarraian, eredu lineal honek:

$$\mathbf{M}_k(x) = \mathbf{f}(\mathbf{x}_k) + \mathbf{J}(\mathbf{x}_k)(\mathbf{x} - \mathbf{x}_k),$$

sortutako errorea $O(\|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*\|^2)$ denez gero, konbergentzia koadratikoa dela frogatuko dugu.

Izan bedi

$$\varepsilon = \min \left\{ r, \frac{1}{2\beta\gamma} \right\}. \quad (6.8)$$

k -ren gaineko indukzioz (6.7) betetzen dela frogatuko dugu, eta hau ere bai:

$$\|\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}^*\| \leq \frac{1}{2} \|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*\|$$

eta, beraz,

$$\mathbf{x}_{k+1} \in \mathcal{B}_\varepsilon(\mathbf{x}^*). \quad (6.9)$$

Lehendabizi, $\mathbf{J}(\mathbf{x}_0)$ ez dela singularra ikusiko dugu. Erabiltzen baditugu $\|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}^*\| \leq \varepsilon$, \mathbf{J} -ren Lipschitz jarraitutasuna \mathbf{x}^* puntuan eta (6.8), hau lortzen dugu:

$$\begin{aligned} \|\mathbf{J}(\mathbf{x}^*)^{-1}[\mathbf{J}(\mathbf{x}_0) - \mathbf{J}(\mathbf{x}^*)]\| &\leq \|\mathbf{J}(\mathbf{x}^*)^{-1}\| \cdot \|\mathbf{J}(\mathbf{x}_0) - \mathbf{J}(\mathbf{x}^*)\| \\ &\leq \beta\gamma\|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}^*\| \leq \beta \cdot \gamma \cdot \varepsilon \leq 1/2. \end{aligned}$$

Horregatik eta matrize-normaren jarraitutasunagatik, $\mathbf{J}(\mathbf{x}_0)$ ez dela singularra ateratzen da eta alderantzizkoaren normak hau betetzen duela frogatu daiteke (ikus [7] 3.1.4. Teor.):

$$\begin{aligned} \|\mathbf{J}(\mathbf{x}_0)^{-1}\| &\leq \frac{\|\mathbf{J}(\mathbf{x}^*)^{-1}\|}{1 - \|\mathbf{J}(\mathbf{x}^*)^{-1}[\mathbf{J}(\mathbf{x}_0) - \mathbf{J}(\mathbf{x}^*)]\|} \\ &\leq 2\|\mathbf{J}(\mathbf{x}^*)^{-1}\| \\ &\leq 2 \cdot \beta \end{aligned} \tag{6.10}$$

Beraz, \mathbf{x}_1 ondo definituta dago eta hau betetzen du:

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}^* &= \mathbf{x}_0 - \mathbf{x}^* - \mathbf{J}(\mathbf{x}_0)^{-1}\mathbf{f}(\mathbf{x}_0) \\ &= \mathbf{x}_0 - \mathbf{x}^* - \mathbf{J}(\mathbf{x}_0)^{-1}[\mathbf{f}(\mathbf{x}_0) - \mathbf{f}(\mathbf{x}^*)] \\ &= \mathbf{J}(\mathbf{x}_0)^{-1}[\mathbf{f}(\mathbf{x}^*) - \mathbf{f}(\mathbf{x}_0) - \mathbf{J}(\mathbf{x}_0)(\mathbf{x}^* - \mathbf{x}_0)]. \end{aligned}$$

Ohartu parentesien arteko gaia $\mathbf{f}(\mathbf{x}^*)$ -ren eta $\mathbf{M}_0(\mathbf{x}^*)$ ereduaren arteko kendura dela. Beraz, 6.2. Lema eta (6.10) erabiliz, hau dugu:

$$\begin{aligned} \|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}^*\| &\leq \|\mathbf{J}(\mathbf{x}_0)^{-1}\| \cdot \|\mathbf{f}(\mathbf{x}^*) - \mathbf{f}(\mathbf{x}_0) - \mathbf{J}(\mathbf{x}_0)(\mathbf{x}^* - \mathbf{x}_0)\| \\ &\leq 2 \cdot \beta \cdot \frac{\gamma}{2} \|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}^*\|^2 \\ &= \beta \cdot \gamma \|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}^*\|^2. \end{aligned}$$

Horrek (6.7) frogatzen du. Gainera, $\|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}^*\| \leq 1/(2\beta\gamma)$ denez, hau lortzen dugu:

$$\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}^*\| \leq \frac{1}{2} \|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}^*\|,$$

horrek (6.9) frogatzen du eta $k = 0$ kasua osatzen du. Indukzioaren beste urratsak frogatzeko, antzeko era batean jokatzeko da. \square

6.2. Newtonen metodoaren aldaketak

Newtonen metodorako aldaera batzuk existitzen dira; metodoari elkartutako sistemaren definizioan eta ebazpenean desberdintzen dira. Horien guztien helburua da algoritmoaren fase hori murriztea eta, horretarako, matrize jacobiarra hurbiltzen da era desberdinetan.

6.2.1. Diferentzia finituzko Newtonen metodoa

Jacobiarraren adierazpen analitikoa kalkulatu ezin denean, Newtonen metodoaren aldaera honek matrize jacobiarra ordezkatzan du bere diferentzia finituzko hurbilpenaz.

6.2. Teorema. *Izan bitez $\mathbf{f} : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ eta \mathbf{x}^* 6.1. Teoremaren hipotesiak betetzen dituztenak. Orduan, $\varepsilon, h > 0$ existitzen dira, non baldin $\{h_k\}$ segida erreala, $0 < |h_k| \leq h$, eta $\mathbf{x}_0 \in \mathcal{B}_\varepsilon(\mathbf{x}^*)$ badira, ondorengo adierazpenak sortutako $\{\mathbf{x}_k\}$ segida ondo definituta dago eta \mathbf{x}^* -ra jotzen du linealki:*

$$\mathbf{a}_j^{(k)} = \frac{\mathbf{f}(\mathbf{x}_k + h_k \mathbf{e}_j) - \mathbf{f}(\mathbf{x}_k)}{h_k}, \quad j = 1, \dots, n,$$

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \mathbf{A}_k^{-1} \mathbf{f}(\mathbf{x}_k), \quad k = 0, 1, \dots,$$

($\mathbf{a}_j^{(k)}$ bektorea \mathbf{A}_k -ren j -garren zutabea da).

Baldin hau betetzen bada:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} h_k = 0,$$

konbergentzia superlineala da.

Baldin c_1 konstante bat badago hau betetzen duena:

$$|h_k| \leq c_1 \|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*\|_1,$$

edo, baliokideki, c_2 konstante bat badago hau betetzen duena:

$$|h_k| \leq c_2 \|\mathbf{f}(\mathbf{x}_k)\|_1,$$

orduan, konbergentzia koadratikoa da.

Teorema honen frogantza 6.1. teoremakoaren antzekoa da, eta [7] erreferentzian aurki daiteke.

Edonola ere, iterazio bakoitzean $\mathbf{J}(\mathbf{x})$ -ren hurbilpen hori egiteko, $n^2 + n$ funtzio-balioztatzea egin behar dugu (n^2 , jacobiarra kalkulatzeko, eta n , funtzioaren balioa kalkulatzeko), eta sistema lineala ebazteko $O(n^3)$ eragiketa gehiago.

Honako hau da h parametroa aukeratzeko era arrazonagarri bat. $\mathbf{f}(\mathbf{x})$ t digitu zuzenekin kalkula daitekeenean, orduan, $\mathbf{f}(\mathbf{x} + h\mathbf{e}_j)$ eta $\mathbf{f}(\mathbf{x})$ desberdinak izan beharko lirarteke azken $t/2$ digitu horietan. Hain zuzen ere, $\mathbf{f}(\mathbf{x})$ -ren kalkuluaren errore erlatiboa η balitz, hau lortu beharko genuke:

$$\frac{\|\mathbf{f}(\mathbf{x} + h\mathbf{e}_j) - \mathbf{f}(\mathbf{x})\|}{\|\mathbf{f}(\mathbf{x})\|} \leq \sqrt{\eta}, \quad j = 1, \dots, n. \quad (6.11)$$

Ez badugu informazio hoberik, (6.11) lortzeko era arrazonagarri bat x_j osagai bakoitza honela perturbatzea da:

$$h_j = \sqrt{\eta} \cdot x_j, \quad (6.12)$$

eta gero, \mathbf{a}_j zutabe bakoitza honela kalkulatzeko:

$$\mathbf{a}_j = \frac{\mathbf{f}(\mathbf{x} + h_j \mathbf{e}_j) - \mathbf{f}(\mathbf{x})}{h_j}. \quad (6.13)$$

Gainera, $\mathbf{f}(\mathbf{x})$ formula batez ematen denean, $\eta = \varepsilon_M$ (makinarene errorea) hartzea ere arrazonagarria da. Ondorengo adibidean, Newtonen metodoan deribatuak diferentzia finituen bidez (d.d.f.) kalkulatu dira, hots (6.12)-(6.13) erabiliz $\eta = \varepsilon_M$ -rekin, eta baita deribatu analitikoak (d.a.) erabiliz ere, emaitzak hasierako puntu berdinetik abiatuz konparatu dira. Ikus daitekeenez, emaitzak ia berdinak dira, eta hori da praktikan gertatu ohi dena. Hori dela eta, software pakete batzuek ez dute behar deribatu analitikorik; haiek beti erabiltzen dituzte diferentzia finituak.

6.3. Adibidea. Izan bedi $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} x_1^2 + x_2^2 - 2 \\ e^{x_1-1} + x_2^3 - 2 \end{bmatrix}$. Ebatzi $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = 0$, $\mathbf{x}_0 = [2, 3]^t$ hartuz. Dakigunez $\mathbf{x}^* = [1, 1]^t$.

Ebazpena. Kalkuluak 14 digitu esangarriekiko ordenagailu batean egin dira. Ondorioz, $\eta = \varepsilon_M = 10^{-14}$ dugu; beraz, $h_j = 10^{-7}|x_j|$.

Newtonen metodoa d.a. erabiliz	\mathbf{x}_k	Newtonen metodoa d.d.f. erabiliz
$[2, 3]^t$	\mathbf{x}_0	$[2, 3]^t$
$\begin{bmatrix} 0.57465515807608 \\ 2.1168965612826 \end{bmatrix}$	\mathbf{x}_1	$\begin{bmatrix} 0.57465515450268 \\ 2.1168966735234 \end{bmatrix}$
$\begin{bmatrix} 0.31178766389307 \\ 1.5241979559460 \end{bmatrix}$	\mathbf{x}_2	$\begin{bmatrix} 0.31178738552306 \\ 1.5241981016335 \end{bmatrix}$
$\begin{bmatrix} 1.4841388323960 \\ 1.1464779176945 \end{bmatrix}$	\mathbf{x}_3	$\begin{bmatrix} 1.4841386151178 \\ 1.1464781318492 \end{bmatrix}$
$\begin{bmatrix} 1.0592959013664 \\ 1.0348194625183 \end{bmatrix}$	\mathbf{x}_4	$\begin{bmatrix} 1.0592958450507 \\ 1.0348195092235 \end{bmatrix}$
$\begin{bmatrix} 1.0008031050945 \\ 1.0014625483617 \end{bmatrix}$	\mathbf{x}_5	$\begin{bmatrix} 1.0008031056081 \\ 1.0014625533494 \end{bmatrix}$
$\begin{bmatrix} 0.99999872187461 \\ 1.0000026672636 \end{bmatrix}$	\mathbf{x}_6	$\begin{bmatrix} 0.99999872173640 \\ 1.0000026674316 \end{bmatrix}$
$\begin{bmatrix} 0.9999999999548 \\ 1.0000000000089 \end{bmatrix}$	\mathbf{x}_7	$\begin{bmatrix} 0.9999999999535 \\ 1.0000000000091 \end{bmatrix}$
4	$[\mathbf{J}(\mathbf{x}_0)]_{11}$	4.0000003309615
6	$[\mathbf{J}(\mathbf{x}_0)]_{12}$	6.0000002122252
2.7182818284590	$[\mathbf{J}(\mathbf{x}_0)]_{21}$	2.7182824169358
27	$[\mathbf{J}(\mathbf{x}_0)]_{22}$	27.000002470838

6.2.2. Newtonen metodo aldatua

Lehenengo aldaera matrize jacobiar berdina, $\mathbf{J}(\mathbf{x}_0)$, prozesu iteratibo osoan izatean datza, edo, iterazio kopuru finko batean zehar, gutxienez.

6.2.3. Jacobiren aldaera

Aldaera honetan, diagonal nagusiko gaien bidez hurbiltzen da matrize jacobiarra. Hots,

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \mathbf{D}_k^{-1} \mathbf{f}(\mathbf{x}_k),$$

non $\mathbf{D}_k = \text{diag}\{d_{11}^{(k)}, \dots, d_{nn}^{(k)}\}$ eta $d_{ii}^{(k)} = [\mathbf{J}(\mathbf{x}_k)]_{ii}$, $i = 1, \dots, n$. Ikus daitekeenez, sistema linealetarako Jacobiren metodoaren antzekoa da. Diagonalean ez dauden gaiak txikiak badira diagonaleko gaiekiko (hots, diagonal menperatzailea bada), interesgarria izango da metodo hau.

6.2.4. Gauss-Seidelen aldaera

Aldaera honetan, matrize jacobiarra bere diagonalarekin eta diagonalaren azpiko azpimatrizarekin hurbiltzen da (diagonalaren gaineko gaiak ez dira erabiltzen). Hots,

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \mathbf{L}_k^{-1} \mathbf{f}(\mathbf{x}_k),$$

non $[\mathbf{L}_k]_{ij} = [\mathbf{J}(\mathbf{x}_k)]_{ij}$, $i \geq j$. Iterazio bakoitzean $\mathbf{L}_k \mathbf{p}_k = -\mathbf{f}(\mathbf{x}_k)$ sistema ebatziko da aurrerantz eta, gero, $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \mathbf{p}_k$ egingo da.

6.3. Quasi-Newton metodoak

Diferentzia finituzko Newtonen metodoko iterazio bakoitzean, $\mathbf{J}(\mathbf{x})$ -ren hurbilpena egiteko, $n^2 + n$ funtzio-balioztatze egin behar ditugu (n^2 , jacobiarra kalkulatzeko, eta n , funtzioaren balioa kalkulatzeko) eta sistema lineala ebazteko $O(n^3)$ eragiketa gehiago. Ahalegin konputazionalaren kopuru hori handiegia da, n txikia izan ezean.

Atal honetan ikusiko dugu sistema ez-linealak ebazteko ebakitzaille metodoaren hedatze arrakastatsuen. Metodo honek iterazio bakoitzean n funtzio balioztatze bakarrik behar izango ditu, eta $O(n^2)$ eragiketa aritmetiko.

Gogora dezagun ebakitzaillearen metodoan, Newtonen metodoaren $f'(x_1)$ -en ordeztu, adierazpen hau erabiltzen genuela:

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

Aldagai anitzeko $\mathbf{f}(\mathbf{x})$ funtzioaren deribatua \mathbf{x}_1 puntuan, $\mathbf{J}(\mathbf{x}_1)$, \mathbf{A}_1 matrizeaz ordezkatzeko da propietate honekin:

$$\mathbf{A}_1(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0) = \mathbf{f}(\mathbf{x}_1) - \mathbf{f}(\mathbf{x}_0).$$

Berdintza horri *ebakitzaillearen ekuazio* deritzogu. Gainera, $\mathbf{s}_k = \mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k$ notazioa erabiliko dugu k -garren iterazioari dagokion urratsa adierazteko, eta $\mathbf{y}_k = \mathbf{f}(\mathbf{x}_{k+1}) - \mathbf{f}(\mathbf{x}_k)$ notazioa urrats horri dagokion funtzioaren balioaren aldakuntza emateko. Beraz, k -garren iterazioan, \mathbf{A}_{k+1} matrizeak ebakitzaillearen ekuazio hau bete behar du:

$$\mathbf{A}_{k+1} \mathbf{s}_k = \mathbf{y}_k. \tag{6.14}$$

(6.14) ekuazioa ez da nahiko espezifikatzeko \mathbf{A}_{k+1} bakar bat $n > 1$ denean. Egia esan, (6.14) n ekuazioko eta n^2 ezezaguneko sistema bat da. Horregatik, ebakitzaille hurbilpen arrakastatsu bat eraikitzea da posibilitate horien artean hautatzeko irizpide egokiena aukeratzea.

Quasi-Newton metodoek $\{\mathbf{A}_k\}$ segida bat eraikitzen dute, non \mathbf{A}_k matrizeak $\mathbf{J}(\mathbf{x}_k)$ matrize jacobiarra ahalik eta hoberen hurbiltzen baitu. Alegia, k -garren iterazioan $\mathbf{f}(\mathbf{x})$ ordezkatzeko dugu hurbilpen lineal honekin:

$$\mathbf{M}_k(\mathbf{x}) = \mathbf{f}(\mathbf{x}_k) + \mathbf{A}_k(\mathbf{x} - \mathbf{x}_k),$$

zeina eredu afina baita.

6.3.1. Broyden-en metodoa

Broydenek ideia erraz bat erabili zuen \mathbf{A}_{k+1} -en hurbilpen egokia lortzeko (ikus [4]): iterazio berrian, \mathbf{A}_k matrizeak jacobiarrari buruz ematen digun informazio gehiena gordetzea. Alegia, \mathbf{A}_{k+1} aukeratzeko orduan, saiatuko gara minimizatzen eredu afinaren aldakuntza k -garren eredu afinarekiko, hots:

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_{k+1}(\mathbf{x}) - \mathbf{M}_k(\mathbf{x}) &= [\mathbf{f}(\mathbf{x}_{k+1}) + \mathbf{A}_{k+1}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{k+1})] - [\mathbf{f}(\mathbf{x}_k) + \mathbf{A}_k(\mathbf{x} - \mathbf{x}_k)] \\ &= (\mathbf{f}(\mathbf{x}_{k+1}) - \mathbf{f}(\mathbf{x}_k) - \mathbf{A}_k(\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k)) + (\mathbf{A}_{k+1} - \mathbf{A}_k)(\mathbf{x} - \mathbf{x}_k). \end{aligned}$$

Lehenengo parentesiaren gaiak konstanteak direnez, minimizatu behar duguna hau izango da:

$$(\mathbf{A}_{k+1} - \mathbf{A}_k)(\mathbf{x} - \mathbf{x}_k).$$

Orain, $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ guztietarako, beti adieraz dezakegu honela $\mathbf{x} - \mathbf{x}_k$ kendura:

$$\mathbf{x} - \mathbf{x}_k = \alpha \mathbf{s}_k + \mathbf{t},$$

non $\mathbf{s}_k = \mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k (\neq \mathbf{0})$ eta $\mathbf{t}^t \mathbf{s}_k = 0$ (hots, $\mathbf{t} \in \mathbb{R}^n$ da $\mathbf{s}_k \in \mathbb{R}^n$ bektorearekiko $n - 1$ dimentsioko azpiespazio ortogonalaren edozein bektore). Ondorioz, $\mathbf{M}_{k+1}(\mathbf{x}) - \mathbf{M}_k(\mathbf{x})$ minimizatzeke, hau minimizatu behar dugu:

$$\alpha(\mathbf{A}_{k+1} - \mathbf{A}_k)\mathbf{s}_k + (\mathbf{A}_{k+1} - \mathbf{A}_k)\mathbf{t}. \quad (6.15)$$

Lehenengo gaiaz ezin dugu ezer egin, zeren (6.14), ebakitzaileren ekuazioaren arabera, hau gertatzen baita:

$$(\mathbf{A}_{k+1} - \mathbf{A}_k)\mathbf{s}_k = \mathbf{y}_k - \mathbf{A}_k\mathbf{s}_k, \quad (6.16)$$

hau da, emaitza-bektorea konstantea da (k -garren iterazioan datu horiek guztiak finkatuta daude). Orain, (6.15) adierazpenaren bigarren gaiaz, hau eska dezakegu:

$$(\mathbf{A}_{k+1} - \mathbf{A}_k)\mathbf{t} = \mathbf{0} \quad \forall \mathbf{t} \in \mathbb{R}^n \text{ non } \mathbf{t}^t \mathbf{s}_k = 0 \text{ baita.}$$

Hori lor dezakegu \mathbf{A}_{k+1} egoki bat aukeratuz. Berdintza horrek hau izatea exijitzen du:

$$\mathbf{A}_{k+1} - \mathbf{A}_k = \mathbf{u}\mathbf{s}_k^t, \quad (6.17)$$

non $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^n$. Alegia, $\mathbf{A}_{k+1} - \mathbf{A}_k$ bat heinakoa izan behar du. Orain, (6.14) ebakitzaileren ekuazioa betetzea, (6.16) betetzearen baliokidea da eta, orduan, \mathbf{u} bektoreak hau bete behar du:

$$(\mathbf{u}\mathbf{s}_k^t)\mathbf{s}_k = \mathbf{y}_k - \mathbf{A}_k\mathbf{s}_k,$$

ondorioz, ebakitzaileren ekuazioa betetzeko hau izango dugu:

$$\mathbf{u} = \frac{\mathbf{y}_k - \mathbf{A}_k\mathbf{s}_k}{\mathbf{s}_k^t \mathbf{s}_k}.$$

Beraz, \mathbf{u} hori (6.17) ekuazioan ordezkatur eta \mathbf{A}_{k+1} bakanduz, hau lortzen da:

$$\mathbf{A}_{k+1} = \mathbf{A}_k + \frac{\mathbf{y}_k - \mathbf{A}_k \mathbf{s}_k}{\mathbf{s}_k^t \mathbf{s}_k} \mathbf{s}_k^t. \quad (6.18)$$

Ondorioz, (6.18) eguneratzeak ondoz ondoko bi eredu afinen diferentzia txikiagotzen du, eta ebakitzaileren ekuazioa betetzen du.

Newtonen sistema hurbilduaren ebazpena

Bat heineko Broydenen eguneratzea erabiltzen badugu, (6.18), n funtzio balioztatze bakarrik erabili behar dugu iterazio bakoitzean (diferentzia finituen kasuan, $n^2 + n$ behar ditugu). Bestalde, $\mathbf{J}(\mathbf{x}_k)\mathbf{p} = -\mathbf{f}(\mathbf{x}_k)$ Newtonen sistemaren ordezkatur, sistema hau ebatzi behar dugu:

$$\mathbf{A}_k \mathbf{p} = -\mathbf{f}(\mathbf{x}_k),$$

eta sistema hori ebazteko, $O(n^3)$ eragiketak erabili behar ditugu oraindik. Arazo hori gainditzeko, matrizeen propietate bat erabiliz, formula erraz baten bidez lortuko dugu \mathbf{A}_k -ren alderantzizkoa.

6.3. Lema. (*Sherman-Morrison-Woodbury*) Izan bitez $\mathbf{u}, \mathbf{v} \in \mathbb{R}^n$ bektoreak eta demagun $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ matrizea ez dela singularra. Orduan, $\mathbf{A} + \mathbf{u}\mathbf{v}^t$ ez da singularra, baldin eta soilik baldin hau betetzen bada:

$$\sigma = 1 + \mathbf{v}^t \mathbf{A}^{-1} \mathbf{u} \neq 0.$$

Gainera, hau betetzen da:

$$(\mathbf{A} + \mathbf{u}\mathbf{v}^t)^{-1} = \mathbf{A}^{-1} - \frac{1}{\sigma} \mathbf{A}^{-1} \mathbf{u}\mathbf{v}^t \mathbf{A}^{-1}.$$

Lema hori (6.18) adierazpenari zuzenean aplikatzeak hau ematen digu:

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_{k+1}^{-1} &= (\mathbf{A}_k + \mathbf{u}\mathbf{s}_k^t)^{-1} = \mathbf{A}_k^{-1} - \frac{\mathbf{A}_k^{-1} \mathbf{u}\mathbf{s}_k^t \mathbf{A}_k^{-1}}{1 + \mathbf{s}_k^t \mathbf{A}_k^{-1} \mathbf{u}} \\ &= \mathbf{A}_k^{-1} - \frac{\mathbf{A}_k^{-1} \left(\frac{\mathbf{y}_k - \mathbf{A}_k \mathbf{s}_k}{\mathbf{s}_k^t \mathbf{s}_k} \right) \mathbf{s}_k^t \mathbf{A}_k^{-1}}{1 + \mathbf{s}_k^t \mathbf{A}_k^{-1} \left(\frac{\mathbf{y}_k - \mathbf{A}_k \mathbf{s}_k}{\mathbf{s}_k^t \mathbf{s}_k} \right)} \\ &= \mathbf{A}_k^{-1} - \frac{(\mathbf{A}_k^{-1} \mathbf{y}_k - \mathbf{s}_k) \mathbf{s}_k^t \mathbf{A}_k^{-1}}{\mathbf{s}_k^t \mathbf{s}_k + \mathbf{s}_k^t \mathbf{A}_k^{-1} \mathbf{y}_k - \mathbf{s}_k^t \mathbf{s}_k} \end{aligned}$$

eta, azkenik, *Broydenen alderantzizko formula* hau lortzen da:

$$\mathbf{A}_{k+1}^{-1} = \mathbf{A}_k^{-1} + \frac{(\mathbf{s}_k - \mathbf{A}_k^{-1} \mathbf{y}_k) \mathbf{s}_k^t \mathbf{A}_k^{-1}}{\mathbf{s}_k^t \mathbf{A}_k^{-1} \mathbf{y}_k}. \quad (6.19)$$

Adierazpen horrek $O(n^2)$ eragiketa behar ditu eta, $\mathbf{s}_k = -\mathbf{A}_k^{-1} \mathbf{f}(\mathbf{x}_k)$ kalkulatzeko, $O(n^2)$ eragiketa egin behar ditugu. Beraz, $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \mathbf{A}_k^{-1} \mathbf{f}(\mathbf{x}_k)$ iterazio berria kalkulatzeko, guztira $O(n^2)$ eragiketa egin behar ditugu, $O(n^3)$ erabili beharrean.

Froga daiteke Broydenen metodoaren konbergentzia lokala superlineala dela; ikus [7].

6.2. algoritmoa. Quasi-Newton metodoa, Broydenen eguneratzeaz.

0 urratsa. SARRERA. Sartu: $\mathbf{f}(\mathbf{x})$, \mathbf{x}_0 (hasierako puntua), \mathbf{A}_0^{-1} ($=\mathbf{J}(\mathbf{x}_0)^{-1}$ izan daiteke), $ze > 0$ (zehaztasun erlatiboa), $emax > 0$ (errorearen tolerantzia) eta $imax$ (iterazioen kopuru maximoa). Jarri $k = 0$.

1 urratsa. Kalkulatu $\mathbf{f}(\mathbf{x}_k)$.

2 urratsa. Kalkulatu hau:

$$\mathbf{s}_k = -\mathbf{A}_k^{-1} \mathbf{f}(\mathbf{x}_k). \quad (6.20)$$

3 urratsa. Kalkulatu honako puntu hau:

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \mathbf{s}_k.$$

4 urratsa. Baldin $\|\mathbf{s}_k\|/\|\mathbf{x}_{k+1}\| < ze$ edo $\|\mathbf{f}(\mathbf{x}_{k+1})\| < emax$ edo $k \geq imax$ bada, gelditu egiten da. Bestela, hurrengo urratsera doa.

5 urratsa. Kalkula ezazu \mathbf{A}_{k+1}^{-1} honela:

$$\mathbf{A}_{k+1}^{-1} = \mathbf{A}_k^{-1} + \frac{(\mathbf{s}_k - \mathbf{A}_k^{-1} \mathbf{y}_k) \mathbf{s}_k^t \mathbf{A}_k^{-1}}{\mathbf{s}_k^t \mathbf{A}_k^{-1} \mathbf{y}_k}.$$

6 urratsa. Egin $k = k + 1$ eta joan 1 urratsera.

7 urratsa. IRTEERA. Emaitza: \mathbf{x}_{k+1} .

6.4. Adibidea. Izan bedi

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} x_1 + x_2 - 3 \\ x_1^2 + x_2^2 - 9 \end{bmatrix},$$

zeinak $[0, 3]^t$ eta $[3, 0]^t$ erroak baititu. Izan bedi $\mathbf{x}_0 = [1, 5]^t$ eta aplikatu aurreko algoritmoa hau hartuz:

$$\mathbf{A}_0^{-1} = \mathbf{J}(\mathbf{x}_0)^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 10 \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} 1.2500 & -0.1250 \\ -0.2500 & 0.1250 \end{bmatrix}$$

Ebazpena. Algoritmoaren 1. eta 2. urratsa egiten dira:

$$\mathbf{s}_0 = -\mathbf{A}_0^{-1}\mathbf{f}(\mathbf{x}_0) = -\begin{bmatrix} 1.2500 & -0.1250 \\ -0.2500 & 0.1250 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 3 \\ 17 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1.625 \\ -1.375 \end{bmatrix},$$

3.ak zera ematen digu:

$$\mathbf{x}_1 = \mathbf{x}_0 + \mathbf{s}_0 = \begin{bmatrix} 1 \\ 5 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -1.625 \\ -1.375 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -0.625 \\ 3.625 \end{bmatrix}$$

4.aren bidez, erraz ikus daiteke soluzioa oraindik ez dugula aurkitu hemen:

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}_1) = \begin{bmatrix} 0 \\ 4.53125 \end{bmatrix}.$$

Beraz, algoritmoaren 5. urratsa burutzerakoan, emaitza hauek lortzen dira:

$$\mathbf{y}_0 = \mathbf{f}(\mathbf{x}_1) - \mathbf{f}(\mathbf{x}_0) = \begin{bmatrix} 0 \\ 4.53125 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 3 \\ 17 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -3 \\ -12.46875 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{z} = -\mathbf{A}_0^{-1}\mathbf{y}_0 = -\begin{bmatrix} 1.2500 & -0.1250 \\ -0.2500 & 0.1250 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -3 \\ -12.46875 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2.19141 \\ 0.80859 \end{bmatrix}$$

$$p = -\mathbf{s}_0^t \mathbf{z} = -\begin{bmatrix} -1.625 \\ -1.375 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2.19141 \\ 0.80859 \end{bmatrix} = 4.6729$$

$$\mathbf{C} = \frac{(\mathbf{s}_0 + \mathbf{z})\mathbf{s}_0^t \mathbf{A}_0^{-1}}{p} = \frac{\left(\begin{bmatrix} -1.625 \\ -1.375 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 2.19141 \\ 0.80859 \end{bmatrix} \right) \begin{bmatrix} -1.625 & -1.375 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1.2500 & -0.1250 \\ -0.2500 & 0.1250 \end{bmatrix}}{4.6729}$$

$$= \begin{bmatrix} -0.2045 & 0.0038 \\ 0.2045 & -0.0038 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{A}_1^{-1} = \mathbf{A}_0^{-1} + \mathbf{C} = \begin{bmatrix} 1.2500 & -0.1250 \\ -0.2500 & 0.1250 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -0.2045 & 0.0038 \\ 0.2045 & -0.0038 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1.0455 & -0.1212 \\ -0.0455 & 0.1212 \end{bmatrix}.$$

Berrir 2. urratsa aplikatuz, zera lortzen da:

$$\mathbf{s}_1 = -\mathbf{A}_1^{-1}\mathbf{f}(\mathbf{x}_1) = -\begin{bmatrix} 1.0455 & -0.1212 \\ -0.0455 & 0.1212 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 4.53125 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.5492 \\ -0.5492 \end{bmatrix}$$

Eta 3. urratsaren bitartez, hau:

$$\mathbf{x}_2 = \mathbf{x}_1 + \mathbf{s}_1 = \begin{bmatrix} -0.625 \\ 3.625 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0.5492 \\ -0.5492 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -0.07575 \\ 3.07575 \end{bmatrix}$$

Ikus dezakegunez, $\mathbf{x}_2 \approx [0 \ 3]^t$. \square

Praktikan, inplementazio hau ondo dabil, baina desabantaila bat dauka: nekez detektatzen da \mathbf{A}_{k+1} en baldintzapen txarra. \mathbf{A}_k -ren \mathbf{QR} faktORIZAZIOAK arazo hori ez duenez eta erabiltzen dituen eragiketen kopurua antzekoa denez ($O(n^2)$), gaur egun, (6.19) formula ordezkatu egin du. Metodo horretan, $\mathbf{A}_k = \mathbf{QR}$ faktORIZAZIOA dugunez, erraz lortzen da $\mathbf{A}_{k+1} = \mathbf{A}_k + \mathbf{u}^t \mathbf{s}_k = \overline{\mathbf{Q}} \overline{\mathbf{R}}$. Horretarako, Givens-en errotazioak (transformazio ortogonalak) erabiltzen dira, ikus [13].

6.4. Metodo globalak

Orain arte erabilitako metodoak lokalak izan dira, hots, \mathbf{x}_0 hasierako puntuak \mathbf{x}^* errotik nahiko hurbil egon behar du, metodo horiek konbergenteak izateko. Baina, hori gertatzen ez denean, zein metodo erabil dezakegu?

Izan bedi $F(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}\|\mathbf{f}(\mathbf{x})\|_2^2$ funtzioa. Orduan, $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ -ren erroak eta $\{\min_{\mathbf{x}} F(\mathbf{x})\}$ problemaren soluzioak berdinak dira.

Bestalde, $F \in C^1$ denean, \mathbf{d} norabidearekiko F -ren deribatua \mathbf{x} puntuan $\nabla F(\mathbf{x})\mathbf{d}$ da. Gainera, $F(\mathbf{x} + \mathbf{d})$ -ren bigarren ordenako Tayloren garapena hau da:

$$F(\mathbf{x} + \lambda\mathbf{d}) = F(\mathbf{x}) + \lambda\nabla F(\mathbf{x})\mathbf{d} + O(\lambda^2\|\mathbf{d}\|_2^2).$$

Horren ondorioz, $F(\mathbf{x} + \lambda\mathbf{d}) < F(\mathbf{x})$ beteko da $\nabla F(\mathbf{x})\mathbf{d} < 0$ denean (hots, \mathbf{d} norabide beherakorra denean) eta λ nahiko txikia bada $O(\lambda^2\|\mathbf{d}\|_2^2) < \lambda\nabla F(\mathbf{x})\mathbf{d}$ bete dadin.

6.4.1. Gradientearen metodoa

Dakigunez, $\nabla F(\mathbf{x})\mathbf{d} = \|\nabla F(\mathbf{x})\|_2\|\mathbf{d}\|_2\cos(\theta)$ dugu (θ da $\nabla F(\mathbf{x})$ eta \mathbf{d} bektoreen arteko angelua), eta $\|\mathbf{d}\|_2 = 1$ bada, $\nabla F(\mathbf{x})\mathbf{d}$ biderkadurak balio txikiena hartuko du $\theta = -\pi$ denean, hots, $\mathbf{d} = -\nabla F(\mathbf{x})^t/\|\nabla F(\mathbf{x})\|_2$ denean. Horrelako norabidea aukeratzen denean, *gradientearen metodoa* (edo *beherapen azkarreneko metodoa*) dugu. Orduan, $\mathbf{d} = -\nabla F(\mathbf{x})^t/\|\nabla F(\mathbf{x})\|_2$ norabidean F funtzioaren balioa txikiagotzen da, $\nabla F(\mathbf{x}) \neq \mathbf{0}$ izanik, eta honela aurkitzen da norabide horretan eman behar duen urratsaren luzera, alegia, α -rako aukera zehatzena ($\alpha > 0$ izanik):

$$\min_{\alpha} F(\mathbf{x} + \lambda\mathbf{d}),$$

baina, orokorki, kalkulu hori garestiegia da beste metodo ez-zehatz eta eraginkor batzuekin konparatzen badugu. Aurretiko metodo horrek F -ren minimo batera jotzen du konbergentzia linealarekin, eta, batzuetan oso astiro, lineala da.

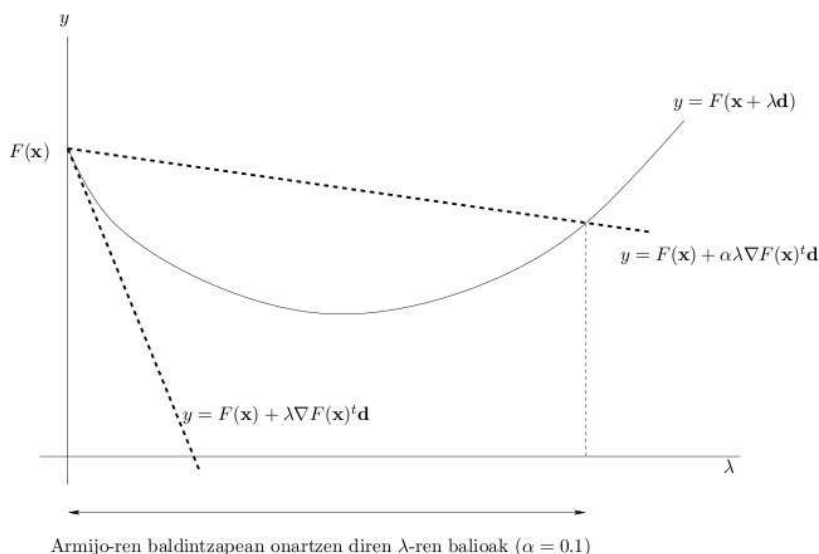
6.4.2. Konbergentzia globala: Armijo-Goldstein-en irizpideak

Armijoren baldintza erabiltzen da funtzioaren balioaren beherapen nahiko bat izateko. Alegia, $\alpha \in (0, 1)$ hartuz, eta $\lambda > 0$ -ri hau betetzea exijituz:

$$F(\mathbf{x} + \lambda\mathbf{d}) \leq F(\mathbf{x}) + \alpha\lambda\nabla F(\mathbf{x})\mathbf{d}. \quad (6.21)$$

Ikus 6.1. irudia.

Jakin badakigu λ nahiko txiki baterako $F(\mathbf{x} + \lambda\mathbf{d}) < F(\mathbf{x})$ betetzen dela, baina ez txikiegia; hori da, hain zuzen ere, Goldsteinen baldintzarekin saihesten dena. Baina, guk



6.1. irudia. Armijoren baldintza.

nahi dugu \mathbf{d} norabidean $\mathbf{x} + \lambda\mathbf{d}$ puntuko F -ren beherapena aurreko \mathbf{x} puntuan dugunaren ratio bat baino handiagoa izatea, hots:

$$\nabla F(\mathbf{x} + \lambda\mathbf{d})^t \mathbf{d} \geq \beta \nabla F(\mathbf{x}) \mathbf{d} \quad (6.22)$$

non $\beta \in (\alpha, 1)$ (ikus 6.2. irudia). Hori da Goldsteinen baldintza. Atzeranzko estrategia erabiltzen badugu, baldintza hori bide batez betetzen da.

Ondorengo teorema frogatzen du (ikus [26, 27]) \mathbf{d} norabide beherakor bat izanez gero, $\mathbf{x} + \lambda\mathbf{d}$ puntuak egonik, (6.21) eta (6.22) baldintzak betetzen dituztela.

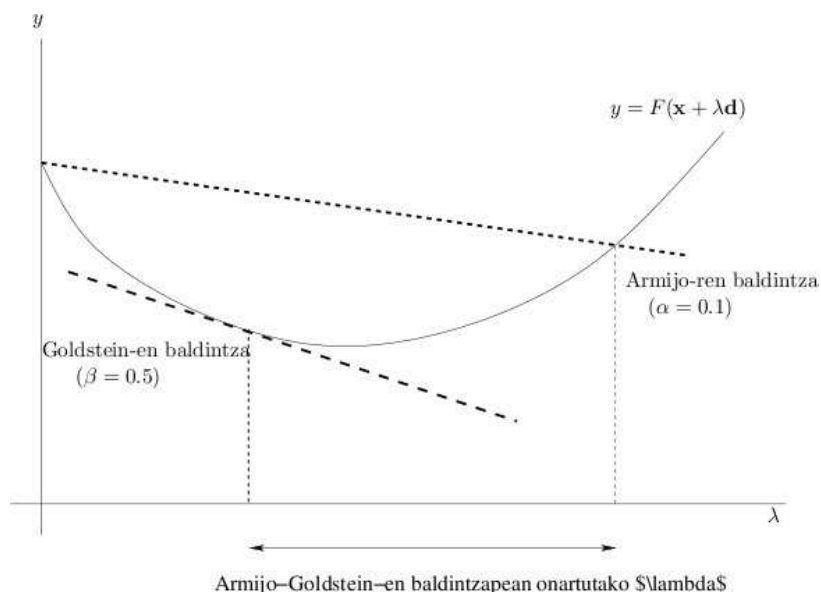
6.3. Teorema. *Izan bedi $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ etengabe diferentziagarria (hots, C^1 klasekoa). Izan bitez $\mathbf{x}_k, \mathbf{d}_k \in \mathbb{R}^n$, non $\nabla F(\mathbf{x}_k) \mathbf{d}_k < 0$ baita (hots, \mathbf{d}_k norabide beherakorra da), eta demagun $\{F(\mathbf{x}_k + \lambda\mathbf{d}_k) \mid \lambda > 0\}$ behe bornatua dela. Orduan, baldin $0 \leq \alpha \leq \beta < 1$, badaude $\lambda_u > \lambda_l > 0$ konstanteak, non $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \lambda_k \mathbf{d}_k$ puntuak (6.21) eta (6.22) baldintzak betetzen baitituzte, $\lambda_k \in (\lambda_l, \lambda_u)$ bada.*

[7] erreferentzian aurki daiteke teorema honen frogantza.

6.5. Adibidea. *Izan bitez $F(x_1, x_2) = x_1^4 + x_1^2 + x_2^2$, $\mathbf{x} = (x_1, x_2)^t = (1, 1)^t$, $\mathbf{d} = (-3, -1)^t$, eta $\alpha = 0.1$ (6.21) adierazpenean eta $\beta = 0.5$ (6.22) -n.*

Ebazpena. Hau dugunez:

$$\nabla F(\mathbf{x}) \mathbf{d} = (6, 2)(-3, -1)^t = -20 < 0,$$



6.2. irudia. Armijo-Goldsteinen baldintzak.

\mathbf{d} norabide beherakorra da \mathbf{x} horretan $F(\mathbf{x})$ -rako. Orain, demagun $\mathbf{x}(\lambda) = \mathbf{x} + \lambda\mathbf{d}$ dela. Baldin $\lambda = 1$ bada, $\bar{\mathbf{x}} = \mathbf{x}(1) = (-2, 0)^t$ dugu eta, orduan:

$$\nabla F(\bar{\mathbf{x}})\mathbf{d} = (-36, 0)(-3, -1)^t = 108 > -10 = \beta\nabla F(\mathbf{x})\mathbf{d}.$$

Beraz, $\bar{\mathbf{x}}$ (6.22) betetzen du, baina:

$$F(\bar{\mathbf{x}}) = 20 > 1 = F(\mathbf{x}) + \alpha\lambda\nabla F(\mathbf{x})\mathbf{d}$$

eta, ondorioz, ez du (6.21) betetzen. Halaber, $\lambda = 0.1$ bada, $\bar{\mathbf{x}} = \mathbf{x}(0.1) = (0.7, 0.9)^t$ puntuak (6.21) betetzen du, baina (6.22) ez. Aldiz, $\lambda = 0.5$ bada, $\bar{\mathbf{x}} = \mathbf{x}(0.5) = (-0.5, 0.5)^t$ bi baldintzak betetzen ditu, (6.21) eta (6.22). Beraz, 6.2. irudian $\lambda = 0.1$ eskualde onargarriaren ezkerraldean dago, $\lambda = 1$ eskualde horren eskuinaldean, eta $\lambda = 0.5$ eskualde onargarrian bertan. \square

6.4.3. Atzeranzko bilaketa lineala

Orain zehaztuko dugu nola aukeratu behar dugun λ_k . Gaur egungo estrategia da hasieran $\lambda_k = 1$ hartzea, eta $\mathbf{x}_k + \mathbf{d}_k$ ez bada onargarria, “atzera egitea” (hots, λ_k txikiagotzea) $\mathbf{x}_k + \lambda_k\mathbf{d}_k$ onargarri bat lortu arte. “Onargarriak” esan nahi du (6.21) eta (6.22) baldintzak betetzea. Bigarren baldintza betetzen da atzeranzko estrategia erabiltzeagatik, zeren horrek urrats txikiak saihesten baititu. Hori dela eta, ez da agertzen algoritmoan.

6.3. algoritmoa. Atzeranzko bilaketa lineala.

0 urratsa. Eman $\alpha \in (0, 1/2)$, $0 < l < u < 1$ eta $\lambda_k = 1$;

1 urratsa. $F(\mathbf{x}_k + \lambda_k \mathbf{d}_k) > F(\mathbf{x}_k) + \alpha \lambda_k \nabla F(\mathbf{x}_k) \mathbf{d}_k$ gertatzen den bitartean, egin $\lambda_k := \rho \lambda_k$, non $\rho \in [l, u]$;

2 urratsa. $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \lambda_k \mathbf{d}_k$;

Praktikan, α nahiko txikia denez, funtzioaren balioari beheratze oso txikia eskatzen baitzaio, gure algoritmoan $\alpha = 10^{-4}$. Bertsekas-ek $\rho = 1/2$ hartzea proposatzen du (ikus [2]). Beraz, horrela bada, λ_k aukeratzeko $\{1, 2^{-1}, 2^{-2}, 2^{-3}, \dots\}$ segidari jarraituko diogu, eta helduko da 2^{-m} ($m \in \mathbb{N}$) balio batera, non hau betetzen baita (Armijoren baldintza) :

$$F(\mathbf{x}_k + \lambda_k \mathbf{d}_k) \leq F(\mathbf{x}_k) + 10^{-4} \lambda_k \nabla F(\mathbf{x}_k) \mathbf{d}_k$$

6.5. Minimo karratu ez-linealak

Honelako problemak dira:

$$\min f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^m r_j^2(\mathbf{x}),$$

non $r_j : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ funtzio leuna baita ($r_j \in C^1$) eta $m \geq n$. Gainera, r_j bakoitzari *hondar* deritzogu eta $\mathbf{r}(\mathbf{x}) = (r_1(\mathbf{x}), r_2(\mathbf{x}), \dots, r_m(\mathbf{x}))^t$ bektoreari *hondar-bektore* ; $f(\mathbf{x})$ honela idatz dezakegu:

$$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \|\mathbf{r}(\mathbf{x})\|^2.$$

Bestalde, $f(\mathbf{x})$ -ren deribatuak honela idatz daitezke \mathbf{r} funtzioaren matrize jacobiarren bitartez:

$$\mathbf{J}(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial r_1}{\partial x_1} & \frac{\partial r_1}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial r_1}{\partial x_n} \\ \frac{\partial r_2}{\partial x_1} & \frac{\partial r_2}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial r_2}{\partial x_n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \frac{\partial r_m}{\partial x_1} & \frac{\partial r_m}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial r_m}{\partial x_n} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \nabla r_1(\mathbf{x}) \\ \nabla r_2(\mathbf{x}) \\ \vdots \\ \nabla r_m(\mathbf{x}) \end{bmatrix}.$$

$$\nabla f(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^m r_j(\mathbf{x}) \nabla r_j(\mathbf{x}) = \mathbf{J}(\mathbf{x})^t \mathbf{r}(\mathbf{x}) \quad (6.23)$$

$$\begin{aligned} \nabla^2 f(\mathbf{x}) &= \sum_{j=1}^m \nabla r_j(\mathbf{x}) \nabla r_j(\mathbf{x})^t + \sum_{j=1}^m r_j(\mathbf{x}) \nabla^2 r_j(\mathbf{x}) \\ &= \mathbf{J}(\mathbf{x})^t \mathbf{J}(\mathbf{x}) + \sum_{j=1}^m r_j(\mathbf{x}) \nabla^2 r_j(\mathbf{x}). \end{aligned} \quad (6.24)$$

6.5.1. Gauss-Newtonen metodoa

f funtzioa deribagarria bada, bere minimoan $\nabla f(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ ekuazioa bete behar du. Gainera, baldintza hori \mathbf{x}^* puntuan betetzen bada eta $\nabla^2 f(\mathbf{x}^*)$ definitu positiboa bada (hori gertatzen da $J(\mathbf{x}^*)$ hein betekoa bada), orduan \mathbf{x}^* puntuan f funtzioak minimo bat heltzen du. Beraz, $\nabla f(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ sistema ez-lineala ebazteko Newtonen metodoa erabiltzen badugu, iterazio bakoitzean honelako sistema bat ebatzi beharko dugu:

$$\nabla^2 f(\mathbf{x})\mathbf{d} = -\nabla f(\mathbf{x}). \quad (6.25)$$

Gauss-Newtonen metodoa Newtonen metodoaren aldaera bezala ikus daiteke. Kasu honetan, \mathbf{d}_k bilaketa-norabidea kalkulatzeko (6.25) Newtonen sisteman, (6.24) deribatuaren bigarren batugaia (hots, $\sum_{j=1}^m r_j(\mathbf{x})\nabla^2 r_j(\mathbf{x})$) kendu eta gero sistema ebatziz lortzen da. Alegia, \mathbf{d}_k^{GN} kalkulaten da sistema hau ebatziz:

$$\mathbf{J}_k^t \mathbf{J}_k \mathbf{d} = -\mathbf{J}_k^t \mathbf{r}_k, \quad \text{non } \mathbf{J}_k = \mathbf{J}(\mathbf{x}_k) \text{ eta } \mathbf{r}_k = \mathbf{r}(\mathbf{x}_k). \quad (6.26)$$

Hauek dira metodo horren abantaila batzuk:

- $\nabla^2 f(\mathbf{x}_k) \approx \mathbf{J}_k^t \mathbf{J}_k$ hurbilpenak $\nabla^2 r_j(\mathbf{x})$ matrize hessianaren kalkulua saihesten du.
- Askotan, $\mathbf{J}^t \mathbf{J}$ gaia kendutako gaia baino askoz esangarriagoa da, bai r_j hondarrak txikiak direlako bai ia linealak direlako; eta, orduan, $\|\nabla^2 r_j\|$ txikia da. Hori dela eta, oso sarri, metodo honek Newtonen metodoaren ia portaera berdina du, eta konbergentzia lokal azkarra (ia koadratikoa). Izan ere, \mathbf{x}^* soluzioan hondar-bektorea nulua denean (hots, $\mathbf{r}(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}$), orduan, baldin \mathbf{x}_0 hasierako bektorea \mathbf{x}^* -tik nahiko hurbil badago, konbergentzia koadratikoa dela frogatu daiteke; ikus [7].
- \mathbf{J}_k hein betekoa denean eta $\nabla f(\mathbf{x}_k) \neq \mathbf{0}$, \mathbf{d}_k^{GN} norabidea norabide beherakorra da, zeren $\mathbf{J}_k^t \mathbf{J}_k$ definitu positiboa baita. Orduan, $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \lambda \mathbf{d}_k^{GN}$ kalkulatzeko bilaketa lineala erabil dezakegu λ egoki bat aurkituz (hots, Wolfe-n baldintzak egiaztatuz), non f -ren beherapena nahikoa baita.
- Bistan denez, \mathbf{d}_k^{GN} aurkitzeko (6.26) ekuazio normalak ditugu eta, dakigunez, baliokideak dira sistema hori ebaztea eta honako minimo karratu lineal hauen problema ebaztea:

$$\min_{\mathbf{d}} \|\mathbf{J}_k \mathbf{d} + \mathbf{r}_k\|^2.$$

Beraz, \mathbf{d}_k^{GN} norabidea kalkulatu dezakegu ikusitako QR faktORIZAZIOA erabiliz, eta horrela ez dugu izango $\mathbf{J}_k^t \mathbf{J}_k$ kalkulatzeko beharrik.

Metodo horrek desabantaila hauek ditu:

-
- Problemak nahiko ez-linealak direnean edo hondar nahiko handiak dituzenean, konbergentzia lineal lokala geldiro doa.
 - Problemak oso ez-linealak direnean edo hondar oso handiak dituzenean, ez da lokalki konbergente.
 - Ez dago ondo definituta \mathbf{J}_k jacobiarra zutabe hein betekoa ez denean.
 - Ez du globalki konbergentea izan behar.