

## Symbolisch/numerisches Lösen von Gleichungssystemen

Zusammenfassung der letzten Woche

Zur Berechnung von  $x^{(k+1)}$  ist auch bei Quasi-Newtonverfahren ein lineares Gleichungssystem zu lösen,

$$A_k s^{(k)} = -F(x^{(k)}), \quad x^{(k+1)} := x^{(k)} + s^{(k)}.$$

Hier lässt sich das Gleichungssystem bequem lösen, weil sich die inverse Matrix  $A_k^{-1}$  auch durch Aufdatieren berechnen lässt. So kann man bei Rang-1-Verfahren, etwa beim Broyden-Verfahren, die inverse Matrix mit dem folgenden Lemma iterativ berechnen.

**Lemma** (Sherman-Morrison)

Sei  $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$  nicht-singulär,  $u, v \in \mathbb{C}^n$ . Dann gilt

$$A + uv^H \text{ nicht-singulär} \Leftrightarrow 1 + v^H A^{-1} u \neq 0.$$

Falls  $A + uv^H$  nicht-singulär ist, dann gilt

$$\left( A + uv^H \right)^{-1} = A^{-1} - \frac{1}{1 + v^H A^{-1} u} \left( A^{-1} uv^H A^{-1} \right).$$

**Bemerkung.**

Jedes Quasi-Newton-Verfahren bricht entweder nach  $k$  Schritten ab (mit  $x^{(k)} = x^*$ ) oder konvergiert überlinear, d.h.,

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\|x^{(k+1)} - x^*\|}{\|x^{(k)} - x^*\|} = 0.$$

### 6.3 Einbettungsverfahren

Will man  $F = 0$  für  $F : D \rightarrow \mathbb{C}^n$  mit  $D \subseteq \mathbb{C}^n$  direkt mit einem iterativen Verfahren, z.B. mit dem Newton-Verfahren, lösen, hat man das Problem, geeignete Startwerte zu finden. Hier kann man sich mit Einbettungsverfahren helfen. Man bettet  $F$  ein in eine Familie  $H$  von Abbildungen,

$$H : D \times [0, 1] \rightarrow \mathbb{C}^n,$$

mit

$$\begin{aligned}H(x, 0) &= F_0(x), \quad \forall x \in D, \\H(x, 1) &= F(x), \quad \forall x \in D,\end{aligned}$$

wobei man davon ausgeht, dass die Lösungen von  $F_0$  in  $D$  bekannt sind. Von jeder Lösung  $\xi_0^{(k)} \in D$  von  $F_0 = 0$  geht (unter geeigneten Voraussetzungen an  $H$ ) ein Pfad  $\{\xi^{(k)}(t) \mid 0 \leq t \leq 1\}$  aus mit  $\xi^{(k)}(0) = \xi_0^{(k)}$  und man hofft, mit  $\lim_{t \rightarrow 1} \xi^{(k)}(t)$  alle Lösungen von  $F = 0$  in  $D$  zu finden.

Durch Diskretisieren, etwa

$$t_0 := 0, \quad t_{i+1} := t_i + h, \quad h > 0 \text{ genügend klein,}$$

bekommt man statt eines Kontinuums an Gleichungssystemen  $H(x, t) = 0$ ,  $t \in [0, 1]$ , nur endlich viele Systeme  $H(x, t_i) = 0$  und man kann dann die gefundenen Näherungen des Systems  $H(x, t_i) = 0$  als Startwerte nehmen zur Berechnung der (Näherungen an die) Nullstellen von  $H(x, t_{i+1})$ .

Probleme:

- a) Was ist die richtige Anzahl von Lösungspfaden?
- b) Welche Komplikationen treten beim Verfolgen eines Pfads auf?

Zu a) Die Anzahl der Lösungen (in  $D$  bzw. in  $\mathbb{C}^n$ ) kann man nur grob abschätzen. Etwa hat das Gleichungssystem für  $x_1, \dots, x_n, \lambda$

$$\begin{array}{rcccccl} (a_{11} - \lambda)x_1 & + a_{12}x_2 & & + \dots & + a_{1n}x_n & = 0 \\ a_{21}x_1 & & + (a_{21} - \lambda)x_2 & + \dots & + a_{2n}x_n & = 0 \\ \vdots & & & \ddots & \vdots & \\ a_{n1}x_1 & + \dots & & & + (a_{nn} - \lambda)x_n & = 0 \\ x_1^2 & + x_2^2 & & + \dots & + x_n^2 & = 1 \end{array}$$

nach dem Satz von Bezout höchstens  $2^{n+1}$  Nullstellen. Gilt  $a_{ij} = a_{ji} \in \mathbb{R}$  für alle  $i, j \in \{1, \dots, n\}$ , dann gibt es nur  $n$  Lösungen für  $\lambda$  und pro Eigenwert  $\lambda$  zwei (Eigen)vektoren  $\pm(x_1, \dots, x_n)$ . Die Schranke nach Bezout ist daher sehr pessimistisch. Bessere Abschätzungen erhält man mit den BKK-Schranke (nach Bernstein, Kushnirenko und Khovanskii). Details zur BKK-Schranke z.B. in der Arbeit von B. Huber und B. Sturmfels: *A polyhedral method for solving sparse polynomial systems, Math. Comp., 64 (1995)*.

Zu b) Es können Verzweigungspunkte auftreten, bei denen sich Pfade kreuzen oder zu nahe beieinander liegen. Bei der Pfadverfolgung kann passieren, dass man auf einen anderen Pfad gerät. In Umkehrpunkten kann man die Punkte eines Pfades nicht mehr als  $(\xi_i^{(k)}(t), \dots, \xi_n^{(k)}(t))$  ausdrücken, also nicht mehr als Funktionen von  $t$ .

Allgemeine Voraussetzung an die Einbettung  $H$ :

$$\text{Rang } H'(x, t) = n \quad \text{für alle } (x, t) \in D \times [0, 1]. \quad (1)$$

Damit ist der Satz über implizite Funktionen anwendbar in jedem Punkt  $(x, t) \in D \times [0, 1]$ .

**Beispiel.** Sind etwa die Spalten 2 bis  $n + 1$  von  $H'(\xi_i, t_i)$  linear unabhängig, dann existiert eine Umgebung um  $(\xi_i, t_i)$  und in dieser Umgebung stetig differenzierbare Funktionen  $g_2, \dots, g_{n+1}$  mit

$$H(s, g_2(s), \dots, g_{n+1}(s)) = 0 \quad \text{für genügend kleines } |s - \xi_i|$$

und  $g_k(\xi_{i1}) = \xi_{ik}$ ,  $k = 2, \dots, n$ , und  $g_{n+1}(\xi_{i1}) = t_i$  mit  $\xi_i = (\xi_{i1}, \xi_{i2}, \dots, \xi_{in})$ .

**Bemerkung.** Wenn in

$$H'(x, t) = \begin{pmatrix} \frac{\partial h_1}{\partial x_1}(x, t) & \frac{\partial h_1}{\partial x_2}(x, t) & \dots & \frac{\partial h_1}{\partial x_n}(x, t) & \frac{\partial h_1}{\partial t}(x, t) \\ \frac{\partial h_2}{\partial x_1}(x, t) & \frac{\partial h_2}{\partial x_2}(x, t) & \dots & \frac{\partial h_2}{\partial x_n}(x, t) & \frac{\partial h_2}{\partial t}(x, t) \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ \frac{\partial h_n}{\partial x_1}(x, t) & \frac{\partial h_n}{\partial x_2}(x, t) & \dots & \frac{\partial h_n}{\partial x_n}(x, t) & \frac{\partial h_n}{\partial t}(x, t) \end{pmatrix}$$

immer die ersten  $n$  Spalten linear unabhängig sind, dann ist die Parametrisierung nach  $t$  immer möglich, d.h., kein Pfad hat Umkehrpunkte.

Es gibt verschiedene Einbettungsmethoden.

1) Die konvex-lineare Einbettung:

$$H(x, t) := (1 - t)\gamma F_0(x) + t f(x) \quad \gamma \in \mathbb{R} \setminus \{0\}.$$

2) Die polyedrische Einbettung:

Die Polynome  $f_1, \dots, f_n \in K[x_1, \dots, x_n]$  (mit  $F = (f_1, \dots, f_n)^T$ ) mögen die Darstellung

$$f_i = \sum_{\alpha \in A_i} a_\alpha^{(i)} x^\alpha$$

haben mit  $A_i \subset \mathbb{N}_0^n$ . Mit gewissen Funktionen  $\omega_i : A_i \rightarrow \mathbb{Z}$  setzt man dann

$$H(x, t) := \begin{pmatrix} h_1(x, t) \\ h_2(x, t) \\ \vdots \\ h_n(x, t) \end{pmatrix}$$

mit  $h_i(x, t) = \sum_{\alpha \in A_i} a_\alpha^{(i)} x^\alpha \cdot t^{\omega_i(\alpha)}$ .

3) Die koeffizientenparametrisierende Einbettung:

Hier nimmt man die  $f_i$  wie in 2) an, wählt aber von  $t$  abhängige Parameter  $a_\alpha^{(i)}(t)$ , so dass  $a_\alpha^{(i)}(1) = a_\alpha^{(i)}$ . Das Ausgangssystem  $h_i(x, 0) := \sum_{\alpha \in A_i} a_\alpha^{(i)}(0)x^\alpha$  sei leicht lösbar und habe die richtige Anzahl von Lösungen.

Die klassische Fortsetzungsmethode besteht darin, bei bekanntem  $(\xi_i, t_i)$  auf  $H(x, t) = 0$  zu  $t_{i+1} = t_i + h$  das passende  $\xi_{i+1}$  mit dem Newton-Verfahren zu suchen. Also

$$x^{(0)} := \xi_i, \quad x^{(\nu+1)} := x^{(\nu)} - H_x(x^{(\nu)})^{-1} H(x^{(\nu)}, t_{i+1}), \quad \nu = 0, 1, \dots$$

(In der Praxis begnügt man sich mit endlich vielen Iterationsschritten, etwa nur 3, und nimmt dann statt des Grenzwerts  $\xi_{i+1}$  den Näherungswert  $x^{(3)}$ .)

Zur Diskussion der tangentialen Fortsetzung vereinfachen wir zunächst die Schreibweise. Statt  $H(x, t)$  mit  $x = (x_1, \dots, x_n)$  schreiben wir mit  $x_{n+1} := t$  einfach  $H(x_1, \dots, x_{n+1})$  oder, solange keine Missverständnisse möglich sind, nur  $H(x)$ . Analog ist jetzt  $t_i$  die letzte Komponente von  $\xi_i$  usw.

Bei der tangentialen Fortsetzung nutzt man aus, dass der Tangentenraum wegen (1) eindimensional ist. Man wählt  $v_i \in \mathbb{C}^{n+1}$  so, dass

$$H'(\xi_i)v_i = 0, \quad \|v_i\| = 1,$$

gilt und das Vorzeichen von  $v_i$  so gewählt ist, dass  $v_{i-1}$  und  $v_i$  einen möglichst spitzen Winkel einschließen. Dann setzt man

$$\hat{\xi} := \xi_i + hv_i$$

und muss  $\Delta$  so finden, dass für  $\xi_{i+1} := \hat{\xi} + \Delta$  der Punkt  $\xi_{i+1}$  wieder auf  $H(x) = 0$  liegt. Das unterbestimmte Gleichungssystem  $H(\hat{\xi} + \Delta) = 0$  für  $\Delta$  (mit  $n$  Gleichungen für  $n + 1$  Variable) kann nicht mit dem Newtonverfahren gelöst werden. Setzt man aber anstelle der (hier nicht vorhandenen) Inversen der Funktionalmatrix die Pseudoinverse, so bekommt man die Iteration

$$\begin{aligned} x^{(0)} &:= \hat{\xi}, \\ x^{(\nu+1)} &:= x^{(\nu)} + \Delta_\nu \end{aligned}$$

mit

$$\Delta_\nu = -H'(x^{(\nu)})^+ \cdot H(x^{(\nu)}).$$

Auch hier begnügt man sich in der Praxis mit einigen Iterationsschritten und nimmt dann den erhaltenen Iterationswert anstelle des Grenzwerts  $\Delta$ .