1. Métodos para resolver sistemas de ecuaciones no lineales

1. Método de Newton

Nos ocupamos primero de describir el método de Newton para aproximar ceros o raíces de una función real diferenciable f. La idea del método es irse por la tangente (literalmente). Se inicia con un punto x_0, se traza la tangente a la gráfica de f en el punto $(x_0, f(x_0))$ (ver Figura 1) y se define x_1 como el punto de intersección de dicha tangente con el eje x (note que para esto se necesita que $f'(x_0) \neq 0$). Así,

$$f'(x_0) = \frac{0 - f(x_0)}{x_1 - x_0},$$

de donde

$$x_1 = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)} \tag{1}$$

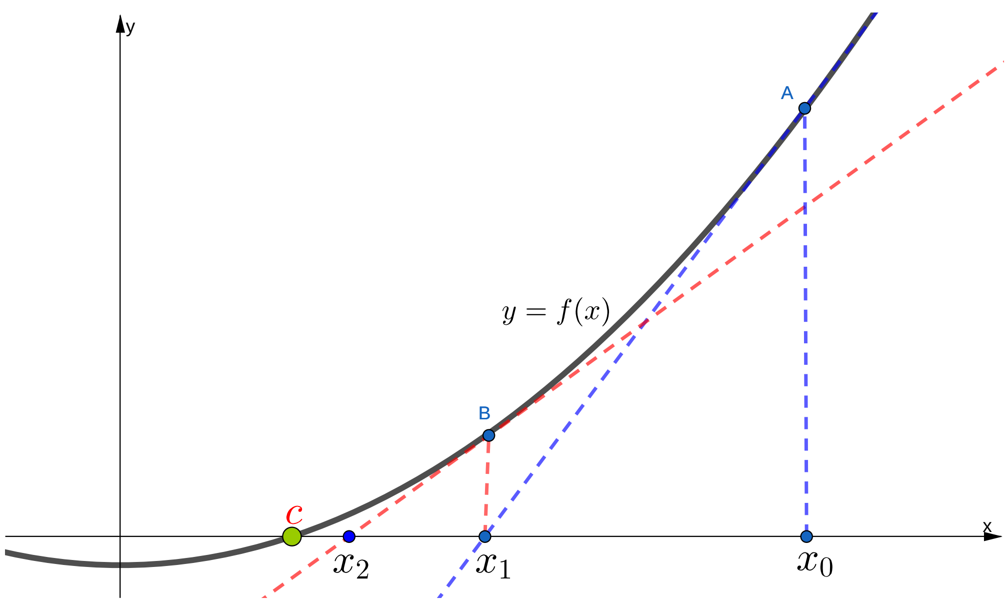

Figura 1

Luego se traza la tangente por el punto $(x_1, f(x_1))$ y se define x_2 como la intersección de esta tangente con el eje x, de donde

$$f'(x_1) = \frac{0 - f(x_1)}{x_2 - x_1},$$

de donde

$$x_2 = x_1 - \frac{f(x_1)}{f'(x_1)} \tag{2}$$

En general, a partir de x_k se obtiene x_{k+1} mediante la fórmula

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}, \qquad k = 0, 1, 2, \ldots \tag{3}$$

Aquí se ha asumido implicitamente que $f'(x_k) \neq 0$, es decir, que la tangente de la gráfica de f en $(x_k, f(x_k))$ no es horizontal. De hecho, se puede ilustrar con funciones cuyas gráficas tienen asíntotas horizontales, que el método de Newton no siempre converge (ver Figura 2).

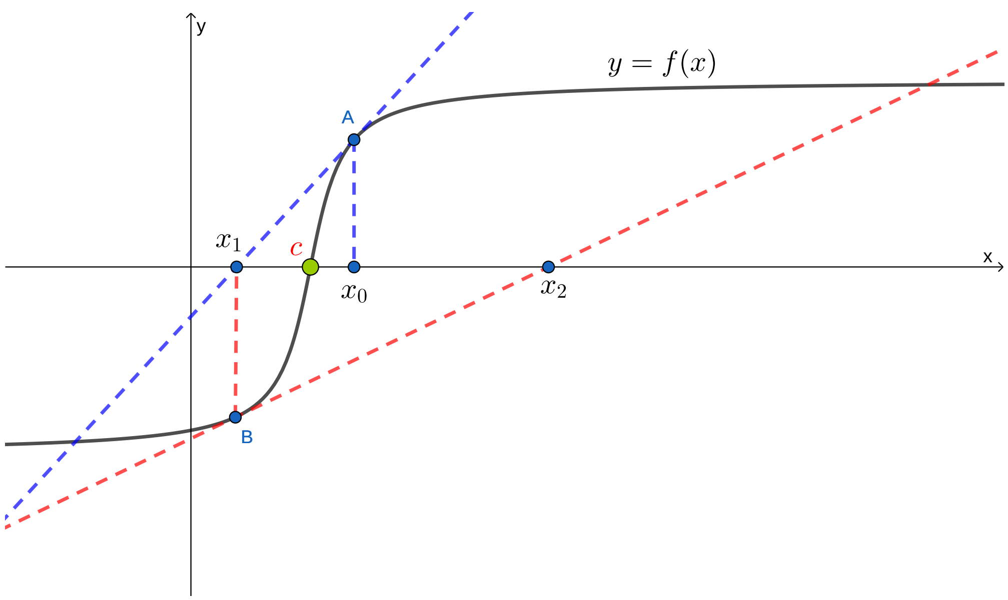

Figura 2

Corresponde ahora analizar la convergencia del método de Newton para lo cual se considera el error en la k-ésima iteración denotado por e_k y definido por

$$e_k = x_k - c$$

donde c es la raíz que se desea aproximar. Note que

$$e_{k+1} = x_{k+1} - c = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)} - c = e_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)},$$

por ende,

$$e_{k+1} = \frac{e_k f'(x_k) - f(x_k)}{f'(x_k)} \tag{4}$$

Si f es de clase C^1 y f' es diferenciable, podemos usar la expansión de

Taylor de $f(c)$ alrededor de $x = x_k$ para obtener

$$0 = f(c) = f(x_k) + (c - x_k) f'(x_k) + \frac{1}{2}(c - x_k)^2 f''(\xi_k) = f(x_k) - e_k f'(x_k) + \frac{1}{2} e_k^2 f''(\xi_k),$$

para algún ξ entre c y x_k. Luego,

$$e_k f'(x_k) - f(x_k) = \frac{1}{2} e_k^2 f''(\xi_k),$$

y al reemplazar en (4), resulta

$$e_{k+1} = \frac{1}{2} \frac{f''(\xi_k)}{f'(x_k)} e_k^2 \tag{5}$$

Además de estudiar la convergencia, también es relevante analizar que tan rápido converge el método. En este sentido, será de utilidad la siguiente definición.

Definición 1.1. Sea $(\mathcal{V}, ||\cdot||)$ un espacio normado y $\{x_k\}$ una sucesión en $\mathcal{V}$ tal que $\lim_{k\to\infty} = x$. Se dice que la sucesión $\{x_k\}$ converge a x con orden $q > 1$, si existe $\nu > 0$ tal que

$$\lim_{k\to\infty} \frac{||x_{k+1} - x||}{||x_k - x||^q} = \nu. \tag{6}$$

Si $q = 2$ decimos que la convergencia es de orden cuadrático.

Con todo este preámbulo ya se puede demostrar el siguiente resultado de convergencia local (si el punto inicial está lo suficientemente cerca de la raíz) del método de Newton.

Teorema 1.1. Sea c es un cero simple de la función f, es decir, $f'(c) \neq 0$. Suponga que f es de clase C^2 en un intervalo cerrado y acotado I que contiene a c con $f''(c) \neq 0$. Entonces existe $\epsilon > 0$, tal que $I_\epsilon := [c - \epsilon, c + \epsilon] \subset I$ y si $x_0 \in I_\epsilon$, entonces la sucesión obtenida por el método de Newton converge con orden cuadrático a c.

Demostración. Como $f'(c) \neq 0$ y f' es continua en I, existen constantes positivas δ y A tales que $I_\delta := [c - \delta, c + \delta] \subset I$ y $|f'(x)| > A$ para todo $x \in I_\delta$. Debido a que f'' es continua en el intervalo compacto I, entonces f'' es acotada en dicho intervalo. En consecuencia, existe $B > 0$ tal que $|f''(y)| \leq B$ para todo $y \in I$. Luego,

$$\left| \frac{f''(y)}{f'(x)} \right| \leq \frac{B}{A}, \qquad x, y \in I_\delta. \tag{7}$$

Tome $\epsilon = \text{mín}\{\delta, A/B\}$. Así, $I_\epsilon := [c-\epsilon, c+\epsilon] \subset I_\delta \subset I$ y (7) vale para cualesquiera $x, y \in I_\epsilon$.

Si $x_0 \in I_\epsilon$, entonces $f'(x_0) \neq 0$, lo cual implica que x_1 obtenido por el método de Newton está bien definido. Además, por las hipótesis de regularidad sobre f vale la relación (5). Luego,

$$\begin{aligned} |x_1 - c| = |e_1| &= \frac{1}{2}\left|\frac{f''(\xi_0)}{f'(x_0)}\right| |e_0|^2 \\ &\leq \frac{1}{2}\frac{B}{A}|e_0|^2 \\ &\leq \frac{1}{2}\frac{B}{A}\epsilon|e_0| \\ &\leq \frac{1}{2}|e_0|. \end{aligned}$$

En particular, $x_1 \in I_\epsilon$ y así $f'(x_1) \neq 0$. Entonces x_2 obtenido de x_1 por el método de Newton está bien definido y se obtiene

$$\begin{aligned} |x_2 - c| = |e_2| &= \frac{1}{2}\left|\frac{f''(\xi_1)}{f'(x_1)}\right| |e_1|^2 \\ &\leq \frac{1}{2}\frac{B}{A}|e_1|^2 \\ &\leq \frac{1}{2}\frac{B}{A}\epsilon|e_1| \\ &\leq \frac{1}{2^2}|e_0|. \end{aligned}$$

De donde,

$$x_2 \in I_\epsilon, \qquad |e_2| \leq \frac{1}{2^2}|e_0|.$$

Procediendo por inducción, se obtiene que la sucesión $\{x_k\}$ generada por el método de Newton está bien definida y contenida en I_ϵ, y además se cumple que para todo $k \geq 0$

$$|e_{k+1}| \leq \frac{1}{2^{k+1}}|e_0|,$$

lo cual implica la convergencia de la sucesión a la raíz c.

Ahora, como cada ξ_k en (5) está entre c y x_k y $\{x_k\}$ converge a c, entonces $\{\xi_k\}$ converge a c. Por lo tanto, de (5) y teniendo en cuenta la continuidad de f' y f'', se sigue que

$$\lim_{k\to\infty} \frac{|x_{k+1} - c|}{|x_k - c|^2} = \lim_{k\to\infty} \frac{|e_{k+1}|}{|e_k|^2} = \lim_{k\to\infty} \frac{1}{2}\left|\frac{f''(\xi_k)}{f'(x_k)}\right| = \frac{1}{2}\left|\frac{f''(c)}{f'(c)}\right| =: \nu,$$

de donde se obtiene la convergencia cuadrática del método. □

Observación 1.1. Si en el método de Newton se reemplaza la derivada $f(x_k)$ por la aproximación en diferencias finitas

$$f'(x_k) \approx \frac{f(x_k) - f(x_{k-1})}{x_k - x_{k-1}} \tag{8}$$

se obtiene el método de la secante

$$x_{k+1} = x_k - f(x_k)\frac{x_k - x_{k-1}}{f(x_k) - f(x_{k-1})} \tag{9}$$

Note que en este método se deben proveer dos valores iniciales, digamos x_0 x_1.

Otra manera de obtener el método de Newton es considerando la expansión de primer orden de f en una serie de Taylor. Concretamente, si x_k es una aproximación de la raíz c, una aproximación lineal de $f(x)$ alrededor de x_k es

$$f(x) \approx f(x_k) + f'(x_k)(x - x_k). \tag{10}$$

Definiendo $h(x) := f(x_k) + f'(x_k)(x - x_k)$, se considera el cero de la función linear afín h como una nueva aproximación del cero de f y se denota por x_{k+1}. Así,

$$f(x_k) + f'(x_k)(x_{k+1} - x_k) = 0,$$

de donde se obtiene la iteración del método de Newton.

Estas ideas se pueden extender al caso de más de una variable. Sea $\boldsymbol{f} : \Omega \to \mathbb{R}^n$ una función continuamente diferenciable definida en un subconjunto $\Omega \subset \mathbb{R}^n$. Si denotamos por $J_{\boldsymbol{f}}(\boldsymbol{x})$ la matriz Jacobiana de $\boldsymbol{f}$ evaluada en $\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, \ldots, x_n)^{\mathrm{T}}$, esto es,

$$J_{\boldsymbol{f}}(\boldsymbol{x}) = \left(\frac{\partial f_i}{\partial x_j}(\boldsymbol{x})\right)_{i,j=1,\ldots,n},$$

entonces $\boldsymbol{f}'(\boldsymbol{x}) = J_{\boldsymbol{f}}(\boldsymbol{x})$.

Dada una aproximación $\boldsymbol{x}_k$ de una raíz $\boldsymbol{x}_*$ de $\boldsymbol{f}$, entonces todavía vale la aproximación lineal (10) de $\boldsymbol{f}$

$$\begin{aligned} \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}) &\approx \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_k) + \boldsymbol{f}'(\boldsymbol{x}_k)(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_k) \\ &= \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_k) + J_{\boldsymbol{f}}(\boldsymbol{x})(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_k). \end{aligned} \tag{11}$$

Como en el caso de una variable y, suponiendo que la matriz $J_{\boldsymbol{f}}(\boldsymbol{x}_k)$ es invertible, una nueva aproximación $\boldsymbol{x}_{k+1}$ para la solución de $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{0}$ está dada por

$$\boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{x}_k - J_{\boldsymbol{f}}^{-1}(\boldsymbol{x}_k)\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_k) \tag{12}$$

Vamos ahora un resultado de convergencia local del método de Newton para el caso de varias variables. En el enunciado del teorema se puede usar cualquier norma vectorial con la correspondiente norma matricial inducida.

Teorema 1.2. Sea $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ un conjunto abierto y convexo. Suponga que la función $\boldsymbol{f} : \Omega \to \mathbb{R}^n$ es de clase C^1 y $\boldsymbol{x}_* \in \Omega$ es una raíz de $\boldsymbol{f}$. Suponga también que $J_{\boldsymbol{f}}(\boldsymbol{x}_*)$ es no singular y que existen constantes positivas r, γ y L, tales que $||J_{\boldsymbol{f}}^{-1}(\boldsymbol{x}_*)|| \leq \gamma$ y

$$||J_{\boldsymbol{f}}(\boldsymbol{x}) - J_{\boldsymbol{f}}(\boldsymbol{y})|| \leq L||\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}|| \qquad \forall \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in B(\boldsymbol{x}_*; r). \tag{13}$$

Entonces, existe $\delta > 0$ tal que, para cualquier $\boldsymbol{x}_0 \in B(\boldsymbol{x}_*; \delta)$, la sucesión determinada por el método de Newton (12) está bien definida, converge a $\boldsymbol{x}_*$, y satisface

$$||\boldsymbol{x}_{k+1} - \boldsymbol{x}_*|| \leq \gamma L ||\boldsymbol{x}_k - \boldsymbol{x}_*||^2 \tag{14}$$

Demostración. Tome $\delta = \text{mín}\{r, 1/(2\gamma L)\}$ y probemos primero que la matriz $J_{\boldsymbol{f}}(\boldsymbol{x}_0)$ es no singular. En efecto, de las desigualdades de la hipótesis, el hecho de que $\boldsymbol{x}_0 \in B(\boldsymbol{x}_*; \delta)$ y la elección de δ, se deduce la desigualdad

$$||J_{\boldsymbol{f}}^{-1}(\boldsymbol{x}_*)[J_{\boldsymbol{f}}(\boldsymbol{x}_*) - J_{\boldsymbol{f}}(\boldsymbol{x}_0)]|| \leq ||J_{\boldsymbol{f}}^{-1}(\boldsymbol{x}_*)||\,||J_{\boldsymbol{f}}(\boldsymbol{x}_*) - J_{\boldsymbol{f}}(\boldsymbol{x}_0)|| \leq \gamma L \delta \leq \frac{1}{2}.$$

Luego, por los teoremas **??** y **??**, la matriz

$$I - J_{\boldsymbol{f}}^{-1}(\boldsymbol{x}_*)[J_{\boldsymbol{f}}(\boldsymbol{x}_*) - J_{\boldsymbol{f}}(\boldsymbol{x}_0)] = J_{\boldsymbol{f}}^{-1}(\boldsymbol{x}_*)J_{\boldsymbol{f}}(\boldsymbol{x}_0)$$

es no singular, y en consecuencia, la matriz $J_{\boldsymbol{f}}(\boldsymbol{x}_0)$ también los es. Así, $\boldsymbol{x}_1$ está bien definido. Además, en virtud del teorema **??** se tiene la estimación

$$||J_{\boldsymbol{f}}^{-1}(\boldsymbol{x}_0)J_{\boldsymbol{f}}(\boldsymbol{x}_*)|| \leq \frac{1}{1 - ||J_{\boldsymbol{f}}^{-1}(\boldsymbol{x}_*)[J_{\boldsymbol{f}}(\boldsymbol{x}_*) - J_{\boldsymbol{f}}(\boldsymbol{x}_0)]||}.$$

De donde,

$$\begin{aligned} ||J_{\boldsymbol{f}}^{-1}(\boldsymbol{x}_0)|| = ||J_{\boldsymbol{f}}^{-1}(\boldsymbol{x}_0)J_{\boldsymbol{f}}(\boldsymbol{x}_*)J_{\boldsymbol{f}}^{-1}(\boldsymbol{x}_*)|| &\leq ||J_{\boldsymbol{f}}^{-1}(\boldsymbol{x}_0)J_{\boldsymbol{f}}(\boldsymbol{x}_*)||\,||J_{\boldsymbol{f}}^{-1}(\boldsymbol{x}_*)|| \\ &\leq \frac{1}{1 - 1/2}||J_{\boldsymbol{f}}^{-1}(\boldsymbol{x}_*)|| \end{aligned}$$

$$\leq 2\gamma. \tag{15}$$

Por otra parte, para cualesquiera $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in \Omega$ se tiene (por la convexidad de Ω) que $\boldsymbol{x} + t(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{x}) \in \Omega$ si $t \in [0, 1]$. Así, por ser $\boldsymbol{f}$ de clase C^1,

$$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{y}) - \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}) - J_{\boldsymbol{f}}(\boldsymbol{x})(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{x}) = \int_0^1 [J_{\boldsymbol{f}}(\boldsymbol{x} + t(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{x})) - J_{\boldsymbol{f}}(\boldsymbol{x})]\, dt(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{x})$$

Luego, usando (13) ($J_{\boldsymbol{f}}$ es Lipschitz continua), se obtiene

$$\begin{aligned} ||\boldsymbol{f}(\boldsymbol{y}) - \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}) - J_{\boldsymbol{f}}(\boldsymbol{x})(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{x})|| &\leq \int_0^1 L||t(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{x})||\,||\boldsymbol{y} - \boldsymbol{x}||\, dt \\ &= \frac{L}{2}||\boldsymbol{y} - \boldsymbol{x}||^2 \end{aligned} \tag{16}$$

Ahora,

$$\boldsymbol{x}_1 - \boldsymbol{x}_* = \boldsymbol{x}_0 - \boldsymbol{x}_* - J_{\boldsymbol{f}}^{-1}(\boldsymbol{x}_0)[\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_0) - \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_*)].$$

Factorizando $J_{\boldsymbol{f}}^{-1}(\boldsymbol{x}_0)$ en el lado derecho, tomando la norma (inducida) y usando las desigualdades (15)-(16), resulta

$$\begin{aligned} ||\boldsymbol{x}_1 - \boldsymbol{x}_*|| &\leq ||J_{\boldsymbol{f}}^{-1}(\boldsymbol{x}_0)||\,||\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_*) - \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_0) - J_{\boldsymbol{f}}(\boldsymbol{x}_0)(\boldsymbol{x}_* - \boldsymbol{x}_0)|| \\ &\leq 2\gamma\frac{L}{2}||\boldsymbol{x}_* - \boldsymbol{x}_0||^2, \end{aligned}$$

obteniéndose de esta manera la cota cuadrática

$$||\boldsymbol{x}_1 - \boldsymbol{x}_*|| \leq \gamma L||\boldsymbol{x}_* - \boldsymbol{x}_0||^2$$

Como $||\boldsymbol{x}_0 - \boldsymbol{x}_*|| \leq \delta \leq 1/(2\gamma L)$, obtenemos la estimación lineal

$$||\boldsymbol{x}_1 - \boldsymbol{x}_*|| \leq ||\boldsymbol{x}_* - \boldsymbol{x}_0||/2,$$

la cual implica de paso que $\boldsymbol{x}_1 \in B(\boldsymbol{x}_*; \delta)$. Procediendo de esta manera en forma inductiva, resulta que la sucesión $\{\boldsymbol{x}_k\}$ obtenida del método de Newton está bien definida y además

$$||\boldsymbol{x}_k - \boldsymbol{x}_*|| \leq ||\boldsymbol{x}_* - \boldsymbol{x}_0||^2/2^k, \qquad ||\boldsymbol{x}_{k+1} - \boldsymbol{x}_*|| \leq \gamma L||\boldsymbol{x}_* - \boldsymbol{x}_k||^2.$$

La primera desigualdad da la convergencia de $\{\boldsymbol{x}_k\}$ a la raíz $\boldsymbol{x}_*$ y la segunda da la convergencia cuadrática. □

2. Cuasimétodos de Newton

En el método de Newton (12) para pasar de la aproximación $\boldsymbol{x}_k$ a la siguiente iteración se requiere: evaluar tanto la función $\boldsymbol{f}$ como $J_{\boldsymbol{f}}$ en $\boldsymbol{x}_k$ y además, calcular la inversa de $J_{\boldsymbol{f}}(\boldsymbol{x}_k)$ (o en vez de esto resolver un sistema lineal $n \times n$ cuyas incógnitas son las componentes de $\boldsymbol{x}_{k+1}$). Los dos últimos cálculos suelen ser la parte más costosa del algoritmo. Además, la matriz $J_{\boldsymbol{f}}(\boldsymbol{x}_k)$ puede estar mal condicionada, lo cual afecta la precisión de la solución obtenida. Más aun, en algunas aplicaciones no hay disponible una fórmula para la matriz Jacobiana, y por ende, no es posible la evaluación $J_{\boldsymbol{f}}(\boldsymbol{x}_k)$. Existen variaciones del método de Newton que mantienen la convergencia local evitando a la vez evaluaciones de la matriz Jacobiana o simplificando en cada paso el proceso de solución del sistema lineal. Algunos ejemplos de estas estrategias son:

- Reemplazar cada componente ij de la matriz Jacobiana por el cociente de diferencias
$$\frac{f_i(\boldsymbol{x} + h\boldsymbol{e}_j) - f_i(\boldsymbol{x})}{h}$$
para h pequeño.

- Usar la misma evaluación de la matriz Jacobiana o más bien su factorización para varias iteraciones. Aunque esto puede producir un deterioro de la razón de convergencia, e obtiene una ganancia en eficiencia computacional.

- Añadirle a la matriz Jacobiana un factor o parámetro de relajación θ_k para estabilizar las iteraciones.

- Reemplazar la matriz Jacobiana por una matriz cuya actualización en cada iteración esté determinada por una modificación (computacionalmente eficiente) de la iteración previa.

Un importante ejemplo de la última estrategia es el *método de Broyden* [3]. Para precisar ideas, consideremos la iteración

$$\boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{x}_k - B_k^{-1}\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_k), \tag{17}$$

donde para cada k, B_k es una matriz no singular por especificar. Como se indica en la referencia [2], el método de Broyden puede ser visto como una posible generalización a n dimensiones del método de la secante. Recordemos que para una sola ecuación no lineal, el método de la secante (9) se obtiene reemplazando en el método de Newton $f'(x_k)$ por el cociente de diferencias

$$\frac{f(x_k) - f(x_{k-1})}{x_k - x_{k-1}}.$$

Dado que en el caso n dimensional no se puede dividir por el vector $\boldsymbol{x}_k - \boldsymbol{x}_{k-1}$, lo que se considera es la ecuación

$$B_k(\boldsymbol{x}_k - \boldsymbol{x}_{k-1}) = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_k) - \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_{k-1})$$

y para especificar la matriz B_k, se define su acción sobre vectores ortogonales a $\boldsymbol{x}_k - \boldsymbol{x}_{k-1}$ de la misma manera en que actúa B_{k-1} sobre dichos vectores. Para implementar el método es de gran utilidad el siguiente resultado.

Teorema 1.3. Dados los vectores $\boldsymbol{s} \neq \boldsymbol{0}$, $\boldsymbol{v}$ en $\mathbb{R}^n$ y la matriz $C \in R^{n \times n}$, existe una matriz única B tal que

$$\begin{aligned} &B\boldsymbol{s} = \boldsymbol{v} \\ &B\boldsymbol{z} = C\boldsymbol{z}, \qquad \text{para todo } \boldsymbol{z} \text{ tal que } \boldsymbol{s}^\top \boldsymbol{z} = \langle \boldsymbol{z}, \boldsymbol{s} \rangle = 0. \end{aligned}$$

Demostración.

Tome

$$B = C + \frac{1}{\boldsymbol{s}^\top \boldsymbol{s}}(\boldsymbol{v} - C\boldsymbol{s})\boldsymbol{s}^\top.$$

□

Nótese que la matriz B es una perturbación de rango uno de la matriz C, es decir, B es C mś una matriz de rango uno.

Ahora si estamos en condiciones de describir el método de Broyden

Algoritmo (Método de Broyden)**.**

Elija $\boldsymbol{x}_0 \in \mathbb{R}^n$, $B_0 \in R^{n \times n}$

for $k = 0, 1, ...$

$$\begin{aligned} &\boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{x}_k - B_k^{-1}\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_k) \\ &\boldsymbol{s}_k = \boldsymbol{x}_{k+1} - \boldsymbol{x}_k \\ &\boldsymbol{v}_k = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_{k+1}) - \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_k) \\ &B_{k+1} = B_k + \frac{1}{\boldsymbol{s}_k^\top \boldsymbol{s}_k}(\boldsymbol{v}_k - B_k\boldsymbol{s}_k)\boldsymbol{s}_k^\top. \end{aligned}$$

end

Observación 1.2.

- Como ejemplo, B_0 se puede tomar como $J_{\boldsymbol{f}}(\boldsymbol{x}_0)$ o como la matriz (b_{ij}) con
$$b_{ij} = \frac{f_i(\boldsymbol{x}_0 + h\boldsymbol{e}_j) - f_i(\boldsymbol{x}_0)}{h}, \qquad h > 0.$$
- En una dimensión el método de Broyden se reduce al método de la secante.
- Como se mencionó antes, la matriz B_{k+1} es una perturbación de rango uno de la matriz B_k y como lo indica el siguiente teorema (se puede encontrar una demostración en [2]), una vez se calcula eficientemente la acción de la inversa de una matriz sobre un vector, entonces se puede calcular la acción de la inversa de cualquier perturbación de rango uno de dicha matriz.

Teorema 1.4 (Fórmula de Sherman-Morrison-Woodbury)**.** Sean $\boldsymbol{y}, \boldsymbol{v} \in \mathbb{R}^n$, B una matriz no singular $n \times n$ y suponga que la matriz $\tilde{B} = B + \boldsymbol{v}\boldsymbol{y}^\top$ también es no singular. Entonces $1 + \boldsymbol{y}^\top B^{-1}\boldsymbol{v} \neq 0$ y
$$\tilde{B}^{-1} = B^{-1} - \frac{1}{1 + \boldsymbol{y}^\top B^{-1}\boldsymbol{v}} B^{-1}\boldsymbol{v}\boldsymbol{y}^\top B^{-1}.$$

En el método de Broyden descrito en el Algoritmo 2, $B = B_k$ y la matriz B_{k+1} juega el papel de $\tilde{B}$ con
$$\boldsymbol{v} = \frac{1}{\boldsymbol{s}_k^\top \boldsymbol{s}_k}(\boldsymbol{v}_k - B_k\boldsymbol{s}_k) \qquad \text{y} \qquad \boldsymbol{y} = \boldsymbol{s}_k.$$
Luego, aplicando la fórmula de Sherman-Morrison-Woodbury, resulta
$$B_{k+1}^{-1} = B_k^{-1} + \frac{1}{\boldsymbol{s}_k^\top B_k^{-1}\boldsymbol{v}_k}(\boldsymbol{s}_k - B_k^{-1}\boldsymbol{v}_k)\boldsymbol{s}_k^\top B_k^{-1}.$$

Una manera conveniente de implementar esta fórmula para el método de Broyden es almacenar $H_k := B_k^{-1}$ en vez de B_k. Entonces el algoritmo queda así

Algoritmo.

Elija $\boldsymbol{x}_0 \in \mathbb{R}^n$, $H_0 \in R^{n\times n}$

for $k = 0, 1, ...$

$\boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{x}_k - H_k\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_k)$

$\boldsymbol{s}_k = \boldsymbol{x}_{k+1} - \boldsymbol{x}_k$

$\boldsymbol{v}_k = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_{k+1}) - \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_k)$

$H_{k+1} = H_k + \dfrac{1}{\boldsymbol{s}_k^\top H_k\boldsymbol{v}_k}(\boldsymbol{s}_k - H_k\boldsymbol{v}_k)\boldsymbol{s}_k^\top H_k.$

end

Para analizar la convergencia (local) del método de Broyden, consideremos el error en la k-ésima iteración $\boldsymbol{e}_k = \boldsymbol{x}_k - \boldsymbol{x}_*$, y definamos $M_k = B_k - J_{\boldsymbol{f}}(\boldsymbol{x}_*)$. Un simple cálculo a partir de las definiciones de $\boldsymbol{x}_{k+1}$ y B_{k+1} muestra que

$$\boldsymbol{e}_{k+1} = -B_k^{-1}\left[\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_k) - \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_*) - J_{\boldsymbol{f}}(\boldsymbol{x}_*)(\boldsymbol{x}_k - \boldsymbol{x}_*)\right] B_k^{-1}M_k\boldsymbol{e}_k \tag{18}$$

$$M_{k+1} = M_k\left(I - \frac{1}{\boldsymbol{s}_k^\top\boldsymbol{s}_k}\boldsymbol{s}_k\boldsymbol{s}_k^\top\right) + \frac{1}{\boldsymbol{s}_k^\top\boldsymbol{s}_k}(v_k - J_{\boldsymbol{f}}(\boldsymbol{x}_*)\boldsymbol{s}_k)\boldsymbol{s}_k^\top \tag{19}$$

Con esta notación estamos listos para presentar un resultado de convergencia local del método de Broyden con un orden de convergencia al menos lineal. Las normas vectoriales que aparecen en el teorema corresponden a la norma Euclidiana y consecuentemente las normas matriciales involucradas son las espectrales.

Teorema 1.5. Sea Ω una bola centrada en $\boldsymbol{x}_* \in \mathbb{R}^n$. Suponga que la función $\boldsymbol{f} : \Omega \to \mathbb{R}^n$ es de clase C^1 y que $\boldsymbol{x}_*$ es una raíz de $\boldsymbol{f}$. Suponga también que $J_{\boldsymbol{f}}(\boldsymbol{x}_*)$ es no singular y que existen constantes positivas γ y L, tales que $||J_{\boldsymbol{f}}^{-1}(\boldsymbol{x}_*)|| \leq \gamma$ y

$$||J_{\boldsymbol{f}}(\boldsymbol{x}) - J_{\boldsymbol{f}}(\boldsymbol{y})|| \leq L||\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}|| \qquad \forall \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in \Omega. \tag{20}$$

Si $\boldsymbol{x}_0 \in \Omega$ y $B_0 \in \mathbb{R}^{n\times n}$ satisfacen la desigualdad

$$||M_0|| + 2L||e_0|| \leq \frac{1}{8\gamma}, \tag{21}$$

entonces las iteraciones $\boldsymbol{x}_k$, B_k dadas por el método de Broyden están bien definidas , y los errores satisfacen

$$||e_{k+1}|| \leq \frac{e_k}{2}. \tag{22}$$

Demostración. Note inicialmente que partir de la cota para $||J_{\boldsymbol{f}}^{-1}(\boldsymbol{x}_*)||$ y la desigualdad (21) se tiene que

$$||I - J_{\boldsymbol{f}}^{-1}(\boldsymbol{x}_*)B_0|| = ||J_{\boldsymbol{f}}^{-1}(\boldsymbol{x}_*)M_0|| \leq \frac{1}{2}$$

Luego, por el Teorema **??**, la matriz

$$I - (I - J_{\boldsymbol{f}}^{-1}(\boldsymbol{x}_*)B_0) = J_{\boldsymbol{f}}^{-1}(\boldsymbol{x}_*)B_0$$

es no singular, y en consecuencia, la matriz B_0 también los es. Así, $\boldsymbol{x}_1$ y B_0 están bien definido y usando nuevamente el Teorema **??** se tiene la estimación

$$||B_0^{-1}J_{\boldsymbol{f}}(\boldsymbol{x}_*)|| \leq \frac{1}{1-\dfrac{1}{2}} = 2.$$

De donde,

$$||B_0^{-1}|| = ||B_0^{-1}J_{\boldsymbol{f}}(\boldsymbol{x}_*)J_{\boldsymbol{f}}^{-1}(\boldsymbol{x}_*)|| \leq 2\gamma.$$

Usando esta desigualdad, la convexidad de Ω, la relación (18), la condición de Lipschitz para el Jacobiano de $\boldsymbol{f}$ y la desigualdad (21), resulta

$$\begin{aligned}
||\boldsymbol{e}_1|| &= ||-B_0^{-1}\left[\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_0) - \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_*) - J_{\boldsymbol{f}}(\boldsymbol{x}_*)(\boldsymbol{x}_0 - \boldsymbol{x}_*)\right] + B_0^{-1}M_0\boldsymbol{e}_0|| \\
&= \left\|-B_0^{-1}\int_0^1 \left[J_{\boldsymbol{f}}((1-t)\boldsymbol{x}_* + t\boldsymbol{x}_0) - J_{\boldsymbol{f}}(\boldsymbol{x}_*)\right]dt(\boldsymbol{x}_0 - \boldsymbol{x}_*) + B_0^{-1}M_0\boldsymbol{e}_0\right\| \\
&\leq ||B_0^{-1}|| \int_0^1 tL||\boldsymbol{x}_0 - \boldsymbol{x}_*||^2\,dt + ||B_0^{-1}||\,||M_0||\,||\boldsymbol{e}_0|| \\
&= ||B_0^{-1}||\,L\,\frac{||\boldsymbol{e}_0||^2}{2} + ||B_0^{-1}||\,||M_0||\,||\boldsymbol{e}_0|| \\
&\leq (\gamma L||\boldsymbol{e}_0|| + 2\gamma||M_0||)||\boldsymbol{e}_0|| \\
&\leq \frac{||\boldsymbol{e}_0||}{2}
\end{aligned}$$

De esta desigualdad se obtiene de paso que $\boldsymbol{x}_1 \in \Omega$.

Ahora, de la relación (19)

$$M_1 = M_0\left(I - \frac{1}{\boldsymbol{s}_0^\top\boldsymbol{s}_0}\boldsymbol{s}_0\boldsymbol{s}_0^\top\right) + \frac{1}{\boldsymbol{s}_0^\top\boldsymbol{s}_0}(v_0 - J_{\boldsymbol{f}}(\boldsymbol{x}_*)\boldsymbol{s}_0)\boldsymbol{s}_0^\top, \tag{23}$$

se deduce que

$$||M_1|| \leq ||M_0|| + L\,\text{máx}\{||\boldsymbol{e}_0||, ||\boldsymbol{e}_1||\} = ||M_0|| + L||\boldsymbol{e}_0|| \tag{24}$$

En efecto, el primer término en el lado derecho de (23) es el producto de M_0 con la proyección ortogonal sobre el complemento ortogonal de $\boldsymbol{s}_0$, así su norma espectral está acotada por $||M_0||$. Para acotar el segundo término, note que

$$v_0 - J_{\boldsymbol{f}}(\boldsymbol{x}_*)\boldsymbol{s}_0 = \int_0^1 [J_{\boldsymbol{f}}((1-t)\boldsymbol{x}_1 + t\boldsymbol{x}_0) - J_{\boldsymbol{f}}(\boldsymbol{x}_*)]\, dt\, \boldsymbol{s}_0.$$

En consecuencia, usando la condición de Lipschitz para el Jacobiano de $\boldsymbol{f}$, obtenemos

$$\begin{aligned}
\|v_0 - J_{\boldsymbol{f}}(\boldsymbol{x}_*)\boldsymbol{s}_0\| &\leq \int_0^1 ||J_{\boldsymbol{f}}((1-t)\boldsymbol{x}_1 + t\boldsymbol{x}_0) - J_{\boldsymbol{f}}(\boldsymbol{x}_*)||\, dt\, ||\boldsymbol{s}_0|| \\
&\leq \int_0^1 L||(1-t)\boldsymbol{x}_1 + t\boldsymbol{x}_0 - \boldsymbol{x}_*||\, dt\, ||\boldsymbol{s}_0|| \\
&= \int_0^1 L||t\boldsymbol{e}_0 + (1-t)\boldsymbol{e}_1||\, dt\, ||\boldsymbol{s}_0|| \\
&\leq \int_0^1 L\left(t||\boldsymbol{e}_0|| + (1-t)||\boldsymbol{e}_1||\right)\, dt\, ||\boldsymbol{s}_0|| \\
&\leq L\, \text{máx}\{||\boldsymbol{e}_0||, ||\boldsymbol{e}_1||\}\, ||\boldsymbol{s}_0||.
\end{aligned}$$

Luego,

$$\left\| \frac{1}{\boldsymbol{s}_0^\top \boldsymbol{s}_0}(v_0 - J_{\boldsymbol{f}}(\boldsymbol{x}_*)\boldsymbol{s}_0)\boldsymbol{s}_0^\top \right\| \leq L\, \text{máx}\{||\boldsymbol{e}_0||, ||\boldsymbol{e}_1||\},$$

lo cual completa la prueba de (24) y de esta última ecuación junto con (21), resulta

$$||M_1|| \leq \frac{1}{8\gamma}.$$

Usando esta desigualdad y la relación

$$I - (I - J_{\boldsymbol{f}}^{-1}(\boldsymbol{x}_*)B_1) = J_{\boldsymbol{f}}^{-1}(\boldsymbol{x}_*)B_1$$

se obtiene, tal como se hizo al inicio de la prueba, que B_1 es no singular y que $||\boldsymbol{e}_2|| \leq ||\boldsymbol{e}_1||/2$. Así, $\boldsymbol{x}_2$ está bien definido. Procediendo de esta manera en forma inductiva, se obtiene el resultado. □

Observación 1.3. Broyden, Dennis y Moré demostraron la convergencia superlineal del método, es decir,

$$\|\boldsymbol{x}_{k+1} - \boldsymbol{x}_*\| \leq \epsilon_k \|\boldsymbol{x}_k - \boldsymbol{x}_*\|, \qquad \text{donde } \epsilon_k \to 0.$$

Bibliografía

[1] K. Atkinson and W. Han. *Theoretical Numerical Analysis*, Springer, New York, Third Edition, 2009.

[2] D. N. Arnold. *A Concise Introduction to Numerical Analysis*. URL: http://umn.edu/~arnold/

[3] C. G. Broyden. *A Class of Methods for Solving Nonlinear Simultaneous Equations* Mathematics of Computation, Vol. 19 (92), pp. 577-593.

[4] R. Kress. *Numerical Analysis*, Springer, New York, 1998.

[5] A. Quarteroni, R. Sacco and F. Saleri. *Numerical Mathematics*, Springer, Second Edition, 2007.

[6] Y. Saad. *iterative Methods for Sparse Linear Systems*, SIAM, Second Edition, 2003.

[7] J. C. Strikwerda *Finite Difference Schemes and Partial differential Equations*, SIAM, Second Edition, 2004.