

计算代数方程组孤立奇异解的符号数值方法

献给张景中、杨路教授 85 华诞

李楠¹, 支丽红^{2*}

1. 深圳大学数学与统计学院, 深圳 518060;

2. 中国科学院数学与系统科学研究院, 北京 100190

E-mail: nan.li@szu.edu.cn, lzhi@mmrc.iss.ac.cn

收稿日期: 2019-11-25; 接受日期: 2020-03-30; 网络出版日期: 2020-08-12; * 通信作者

国家重点研发计划 (批准号: 2018YFA0306702) 和国家自然科学基金 (批准号: 11601378 和 11571350) 资助项目

摘要 求解代数方程组是计算代数几何的最基本问题之一, 孤立奇异解的计算则是其中最具挑战性的课题之一, 在科学与工程计算中有着广泛的应用, 如机器人、计算机视觉、机器学习、人工智能、运筹学、密码学和控制论等. 本文结合作者的研究成果, 综述了符号数值方法在计算代数系统孤立奇异解、特别是近似奇异解精化与验证方面的研究进展, 并对未来的研究方向提出了展望.

关键词 代数方程组 孤立奇异解 符号数值方法 近似解的精化 近似解的验证

MSC (2010) 主题分类 65H10, 74G35, 68W30, 32S99

1 引言

代数方程组 (有时也简称代数系统) 是一组数域 \mathbb{K} (如实数域 \mathbb{R}) 上的多元多项式方程, 它的解是满足全部方程的一组代数闭域 $\bar{\mathbb{K}}$ (如复数域 \mathbb{C}) 上的值. 其严格定义如下.

定义 1.1 (代数方程组) 数域 \mathbb{K} 上的 n 元代数方程组为

$$f_1(x_1, \dots, x_n) = 0, \quad f_2(x_1, \dots, x_n) = 0, \quad \dots, \quad f_m(x_1, \dots, x_n) = 0,$$

其中 f_i 为 \mathbb{K} 上的 n 元多项式. 记 $f(\mathbf{x}) = \{f_1, \dots, f_m\}$, 若 $\xi \in \bar{\mathbb{K}}^n$ 满足 $f(\xi) = \mathbf{0}$, 则称 ξ 是 $f(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ 的解.

求解代数方程组是计算代数几何的最基本问题之一, 在科学与工程计算中有着广泛的应用, 如机器人、计算机视觉、机器学习、人工智能、运筹学、密码学和控制论等 (参见文献 [1]).

例 1.1 (Gough-Stewart 平台) Gough-Stewart 平台是一种并联机械手, 广泛应用于飞行模拟器、力学性能试验和仿生机器人等领域 (见图 1(a)). 它由一个定平台、一个动平台和连接两个平台间的 6 个可伸缩的棱柱形执行器组成 (见图 1(b)). 其位姿正解问题, 即给定 6 个棱柱形执行器的长度确定动平台的位置和姿态, 可归结为求解六元代数方程组问题 (参见文献 [2]).

英文引用格式: Li N, Zhi L H. Symbolic-numeric methods on computing isolated singular solutions of algebraic systems (in Chinese). *Sci Sin Math*, 2021, 51: 17–42, doi: 10.1360/SSM-2019-0289

例 1.2 (相机位姿标定技术) 相机位姿标定技术在计算机视觉、机器人和电影动画制作等领域有广泛的应用 (见图 2(a)). 它是指给定一组空间对象在通用坐标系下的 3 维位置与其成像投影在图像坐标系下的 2 维位置之间的对应关系, 确定相机的位置与姿态 (见图 2(b)). 这个问题也可归结为求解六元代数方程组问题 (参见文献 [3]).

按方程的个数, 代数系统可分为超定系统 ($m > n$)、恰定系统 ($m = n$) 和欠定系统 ($m < n$); 按解的个数, 代数系统可分为非一致系统 (无解)、零维系统 (有限多个解) 和正维系统 (无穷多个解). 在多数情形下, 超定系统为非一致系统, 恰定系统为零维系统, 欠定系统为正维系统. 另外, 按解的局部性质, 代数系统的解可分为非奇异解和奇异解. 本文研究的问题是恰定代数方程组孤立奇异解的计算, 其方程系数所属数域为实数域 \mathbb{R} 或复数域 \mathbb{C} , 其解所属数域为复数域 \mathbb{C} .

定义 1.2 (孤立奇异解) 对于恰定代数方程组 $f(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$, 如果 $\xi \in \mathbb{C}^n$ 满足

- (1) $f(\xi) = \mathbf{0}$;
- (2) 存在半径为 $r > 0$ 的 n 维球体 $B(\xi, r) \subseteq \mathbb{C}^n$, 使得其为 $f(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ 在 $B(\xi, r)$ 内的唯一解;
- (3) Jacobi 矩阵 $Df(\xi)$ 不可逆;
- (4) 任意距离 $f(\mathbf{x})$ 充分近的解析映射 $g(\mathbf{x})$ 在 $B(\xi, r)$ 内存在 μ 个解满足 $g(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$, $1 < \mu < \infty$, 则称 ξ 是 $f(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ 的孤立奇异解, μ 为其重数.

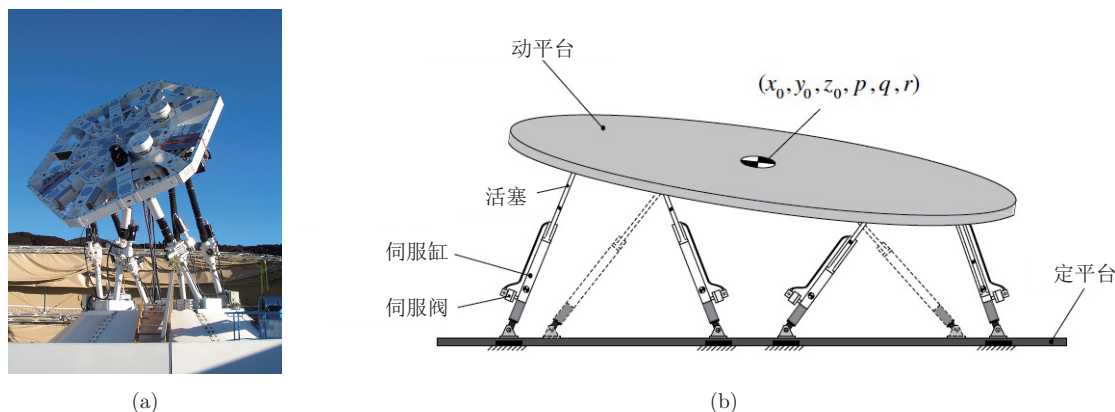


图 1 (网络版彩图) Gough-Stewart 平台. (a) 宇宙微波背景辐射阵列 (图片来自网络 https://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/thumb/e/e7/AMiBA_1.jpg/250px-AMiBA_1.jpg); (b) 原理示意图 [4]

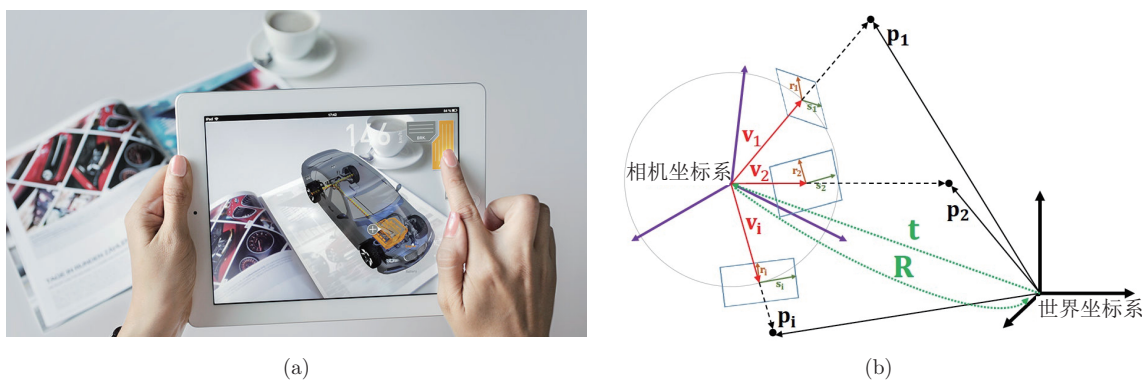


图 2 (网络版彩图) 相机位姿标定技术. (a) 增强现实 (augmented reality, AR) 应用 (图片来自网络 http://userimages16.51sole.com/20170829/b_4030850_201708291124298459.jpg); (b) 原理示意图 [5]

孤立奇异解的计算是求解代数方程组中最具挑战性的课题之一, 在几何建模中起着重要的作用.

例 1.3 (曲线曲面拓扑计算) 计算曲线曲面拓扑在计算机辅助几何设计和计算机图形学等领域有着广泛的应用, 其中涉及的最关键计算是确定奇异点的位置和交点处的分支数量. 奇异点的定义为曲线曲面上满足隐式代数方程全导数为 0 的点, 其位置可归结为计算二元 (曲线) 或三元 (曲面) 代数方程组的孤立奇异解问题, 分支数量对应于重数. 图 3 为含有 65 个奇异点的 Barth 六次多项式.

当 $n = 1$ 时, 多元代数方程组退化为单变元多项式方程, 其孤立奇异解退化为重根. 相应地, 定义 1.2 中的条件 (3) 退化为一阶导数 $f'(\xi)$ 等于 0, 定义 1.2 中的条件 (4) 退化为重结构

$$f(\xi) = f'(\xi) = \cdots = f^{(\mu-1)}(\xi) = 0 \quad \text{且} \quad f^{(\mu)}(\xi) \neq 0. \quad (1.1)$$

对于多元代数方程组的孤立奇异解, 应如何完备地刻画解的重结构? 第 2 节将阐述解的重结构 - 局部对偶空间, 它在计算代数方程组孤立奇异解中起着非常重要的作用.

所谓代数方程组的近似解, 即 $\tilde{\xi} \in \mathbb{C}^n$ 满足 $f(\tilde{\xi}) \approx 0$. 在实际应用中, 人们往往希望得到高精度的近似解或者对给定的误差界 r , 能保证误差满足 $\|\tilde{\xi} - \xi\| \leq r$. 因此, 本文主要研究恰定代数方程组近似奇异解的精细化与验证问题.

问题 1.1 (近似解的精细化) 对于近似解 $\tilde{\xi} \in \mathbb{C}^n$, 计算 $\tilde{\xi}' \in \mathbb{C}^n$ 使得

$$\|\tilde{\xi}' - \xi\| < \|\tilde{\xi} - \xi\|. \quad (1.2)$$

问题 1.2 (近似解的验证) 对于近似解 $\tilde{\xi} \in \mathbb{C}^n$, 计算 $r > 0$ 满足

$$\text{在 } B(\tilde{\xi}, r) \text{ 内存在 } f(x) = \mathbf{0} \text{ 的唯一解.} \quad (1.3)$$

对于近似非奇异解 (Jacobi 矩阵可逆或重数等于 1), Newton-Raphson 方法

$$\tilde{\xi}' = \tilde{\xi} - Df(\tilde{\xi})^{-1}f(\tilde{\xi}) \quad (1.4)$$

在其附近具有二次收敛性,

$$\|\tilde{\xi}' - \xi\| = \mathcal{O}(\|\tilde{\xi} - \xi\|^2). \quad (1.5)$$

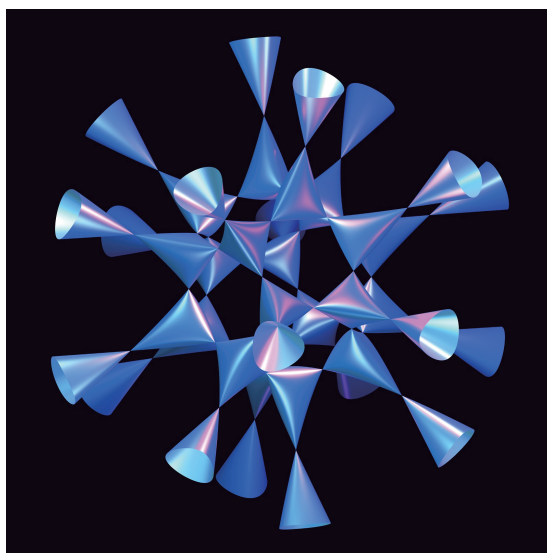


图 3 (网络版彩图) 曲线曲面拓扑计算. Barth 六次多项式 (图片属于 Oliver Labs, 图片来自网络 <https://imaginary.org/gallery/oliver-labs>)

Smale 的阿尔法理论^[6,7]指出, 如果 $Df(\tilde{\xi})$ 可逆且近似解精度满足

$$\alpha(f, \tilde{\xi}) = \|Df(\tilde{\xi})^{-1}f(\tilde{\xi})\| \sup_{k \geq 2} \left\| Df(\tilde{\xi})^{-1} \frac{D^k f(\tilde{\xi})}{k!} \right\|^{k-1} < \frac{13 - 3\sqrt{17}}{4}, \quad (1.6)$$

则当 $r = 2\|Df(\tilde{\xi})^{-1}f(\tilde{\xi})\|$ 时, 在 $B(\tilde{\xi}, r)$ 内存在 $f(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ 的唯一解.

显然, 上述方法和结论不适用于孤立奇异解, 因为 Jacobi 矩阵在奇异解处不可逆. 事实上, 对于近似奇异解的精细化问题, Newton-Raphson 方法在孤立奇异解附近一般只是线性收敛; 而孤立奇异解的验证问题本身就是一个数值病态问题, 因为方程系数任意微小的扰动都可能导致一个孤立奇异解变成一簇非奇异解. 因此, 用带有舍入误差的浮点数计算来验证代数方程组是否拥有孤立奇异解是一个不可能完成的任务. 面对上述挑战, 我们将分别在第 3 和 4 节中综述基于符号数值计算的孤立奇异解的精细化方法和验证方法. 特别地, 对于满足 Jacobi 矩阵亏秩等于 1 的孤立奇异解, 将介绍更高效的精细化和验证算法.

下面简要地介绍符号数值方法. 数值计算是基于数值 (有限精度的浮点数) 的计算, 它具有存储空间小和运算速度快等优点, 但舍入误差导致了输入值、中间值和输出值可能是“真值”的近似. 因此, 需要条件数和算法的数值稳定性来衡量计算结果的精确度. 如果输入值的微小扰动会造成输出值的巨大偏离, 则称算法或问题本身是病态的. 符号计算是基于符号 (无舍入误差的整数或有理数) 的计算, 它不存在计算结果不准确的问题, 但占用资源多, 消耗时间长. 用符号数值方法计算代数方程组孤立奇异解将兼取二者之长: 用符号方法将“病态”问题转化为“非病态”问题, 用数值方法解决“非病态”问题, 平衡了算法的精度和效率.

2 代数系统奇异解的重结构

本节介绍如何用局部对偶空间来刻画代数系统奇异解的重结构, 包括局部对偶空间的定义、基的计算及 Jacobi 矩阵亏秩等于 1 时的高效算法.

2.1 定义

记 \mathbb{C} 上的 n 元多项式环为 $\mathbb{C}[\mathbf{x}] := \mathbb{C}[x_1, \dots, x_n]$. 给定 $\alpha \in \mathbb{N}^n$ 和 $\xi \in \mathbb{C}^n$, 微分泛函 $\mathbf{d}_\xi^\alpha : \mathbb{C}[\mathbf{x}] \rightarrow \mathbb{C}$ 有如下定义:

$$\mathbf{d}_\xi^\alpha(g) := \frac{1}{\alpha_1! \cdots \alpha_n!} \cdot \frac{\partial^{|\alpha|} g}{\partial x_1^{\alpha_1} \cdots \partial x_n^{\alpha_n}}(\xi), \quad \forall g \in \mathbb{C}[\mathbf{x}].$$

记其次数为 $\deg(\mathbf{d}_\xi^\alpha) := |\alpha| = \alpha_1 + \cdots + \alpha_n$. 如上定义微分泛函 \mathbf{d}_ξ^α 满足

$$\mathbf{d}_\xi^\alpha \left(\prod_{i=1}^n (x_i - \xi_i)^{\beta_i} \right) = \begin{cases} 1, & \text{如果 } \alpha = \beta, \\ 0, & \text{如若不然.} \end{cases} \quad (2.1)$$

当 ξ 上下文无歧义时, 记 $\mathbf{d}_\xi^\alpha := \mathbf{d}^\alpha = d_1^{\alpha_1} \cdots d_n^{\alpha_n}$, 其中 $d_i^{\alpha_i} = \frac{1}{\alpha_i!} \frac{\partial^{\alpha_i}}{\partial x_i^{\alpha_i}}$. 记 $\mathfrak{D}_\xi := \text{Span}_{\mathbb{C}}\{\mathbf{d}^\alpha, \alpha \in \mathbb{N}^n\}$ 为 $\{\mathbf{d}^\alpha\}$ 在 \mathbb{C} 上张成的向量空间. 设 $\Lambda := \sum c_\alpha \mathbf{d}^\alpha \in \mathfrak{D}_\xi$, 记 Λ 的支撑为 $\text{supp}(\Lambda) := \{\mathbf{d}^\alpha \mid c_\alpha \neq 0\}$, 其次数为 $\deg(\Lambda) := \max\{\deg(\mathbf{d}^\alpha) \mid \mathbf{d}^\alpha \in \text{supp}(\Lambda)\}$.

对于一组多项式 $f = \{f_1, \dots, f_n\} \subseteq \mathbb{C}[\mathbf{x}]$, 称

$$I_f = (f_1, \dots, f_n) := \left\{ \sum_{i=1}^n h_i f_i \mid \forall h_1, \dots, h_n \in \mathbb{C}[\mathbf{x}] \right\}$$

为 f 生成的理想. 显然, $f(\xi) = \mathbf{0}$ 当且仅当 $g(\xi) = 0$ 对任意的 $g \in I_f$ 成立.

定义 2.1 (局部对偶空间) 代数方程组 $f(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ 在解 ξ 处的局部对偶空间为

$$\mathcal{D}_\xi(I_f) := \{\Lambda \in \mathfrak{D}_\xi \mid \Lambda(g) = 0, \forall g \in I_f\}, \quad (2.2)$$

即 $\mathcal{D}_\xi(I_f)$ 是由 \mathfrak{D}_ξ 中作用于 I_f 中任意多项式皆为 0 的微分泛函构成的子空间.

定义 2.2 (宽度与深度) 记 $\mathcal{D}_\xi^t(I_f) := \{\Lambda \in \mathcal{D}_\xi(I_f) \mid \deg(\Lambda) \leq t\}$ 为由 $\mathcal{D}_\xi(I_f)$ 中次数小于或等于 t 的微分泛函构成的子空间, 则

(1) 宽度定义为 $\kappa := \dim(\mathcal{D}_\xi^1(I_f)) - \dim(\mathcal{D}_\xi^0(I_f))$;

(2) 深度定义为 $\rho := \max\{\deg(\Lambda) \mid \Lambda \in \mathcal{D}_\xi(I_f)\} = \min\{t \in \mathbb{N} \mid \dim(\mathcal{D}_\xi^{t+1}(I_f)) = \dim(\mathcal{D}_\xi^t(I_f))\}$, 其中 $\kappa = n - \text{rank}(Df(\xi))$.

对于代数方程组 $f(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ 的孤立奇异解 $\xi \in \mathbb{C}^n$, 局部对偶空间 $\mathcal{D}_\xi(I_f)$ 完备地刻画了其重结构, 且定义 1.2 中的条件 (2)–(4) 等价于 (参见文献 [8]):

(2') $\mathcal{D}_\xi(I_f)$ 的深度有限, 即 $\rho < +\infty$;

(3') $\mathcal{D}_\xi(I_f)$ 的宽度非零, 即 $\kappa > 0$;

(4') $\mathcal{D}_\xi(I_f)$ 的维数等于 ξ 的重数, 即 $\mu = \dim(\mathcal{D}_\xi(I_f))$.

例 2.1 考虑 $f = \{x_1^2 x_2 - x_1 x_2^2, x_1 - x_2^2\}$ 和 $\xi = (0, 0)$.

显然, $f(\xi) = \mathbf{0}$, 且 $\mathcal{D}_\xi(I_f) := \text{Span}_{\mathbb{C}}\{1, d_2, d_2^2 + d_1, d_2^3 + d_1 d_2\}$. 因此, ξ 是 $f(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ 的孤立奇异解, 且满足 $\kappa = 1, \rho = 3, \mu = 4$.

事实上, 多元代数方程组在孤立奇异解处的局部对偶空间 (2.2) 是单变元多项式方程在重根处的导数判别准则 (1.1) 的推广. 或者说, (1.1) 是 (2.2) 的一个特例 ($\kappa = 1$). 第 2.3 小节介绍宽度为 1 情形下局部对偶空间的特殊性质. 另外, 局部对偶空间并非多元代数方程组在孤立奇异解处重结构唯一的完备描述. 它也可被表示为 I_f 的准素分支 $I_{f,\xi}$, 如例 2.1 中, $I_{f,\xi} = (x_2^4, x_1 - x_2^2)$. 事实上, $I_{f,\xi}$ 是 $\mathcal{D}_\xi(I_f)$ 的对偶空间:

$$I_{f,\xi} = \{g \in \mathbb{C}[\mathbf{x}] \mid \Lambda(g) = 0, \forall \Lambda \in \mathcal{D}_\xi(I_f)\}.$$

然而, 与 $I_{f,\xi}$ 相比, $\mathcal{D}_\xi(I_f)$ 的数值稳定性更佳, 因其基的计算可归结为求解矩阵零空间问题.

2.2 局部对偶空间基的计算

对于代数方程组 $f(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ 的孤立奇异解 ξ , Macaulay 方法与 MMM (Marinari-Mora-Möller) 方法是计算 $\mathcal{D}_\xi^t(I_f)$ 一组基的两种重要方法.

方法 2.1 [9] 若微分泛函 $\Lambda := \sum c_\alpha \mathbf{d}^\alpha \in \mathfrak{D}_\xi$ ($\deg(\Lambda) \leq t$) 满足

$$\Lambda((\mathbf{x} - \xi)^\beta f) = \mathbf{0}, \quad \forall \beta \in \mathbb{N}^n \text{ 满足 } |\beta| < t, \quad (2.3)$$

则 $\Lambda \in \mathcal{D}_\xi^t(I_f)$.

基于上述性质, Macaulay [9] 提出了一种计算局部对偶空间基的方法: 将 (2.3) 表示成以 $(\mathbf{x} - \xi)^\beta f$ 为行指标且以 \mathbf{d}^α 为列指标的矩阵 M_t , 由 (2.1), $M_t \text{vec}(c_\alpha) = \mathbf{0}$ 当且仅当 $\Lambda \in \mathcal{D}_\xi^t(I_f)$, 因此, $\text{null}(M_t)$ 的基与 $\mathcal{D}_\xi^t(I_f)$ 的基一一对应; 由 $t = 1$ 开始, 逐次计算 $\mathcal{D}_\xi^t(I_f)$ 的基, 直至 $\dim(\text{null}(M_{t+1})) = \dim(\text{null}(M_t))$, 即 $\dim(\mathcal{D}_\xi^{t+1}(I_f)) = \dim(\mathcal{D}_\xi^t(I_f))$.

例 2.1 续 根据 Macaulay 方法, $\mathcal{D}_\xi(I_f)$ 的基可按如下步骤计算:

$$\begin{aligned}
 t = 1, \quad M_1 &= \begin{matrix} & 1 & d_1 & d_2 \\ f_1 & \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \\ f_2 & \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \end{matrix}, \\
 t = 2, \quad M_2 &= \begin{matrix} & 1 & d_1 & d_2 & d_1^2 & d_1 d_2 & d_2^2 \\ f_1 & \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \\ f_2 & \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \\ x_1 f_1 & \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \\ x_1 f_2 & \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \\ x_2 f_1 & \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \\ x_2 f_2 & \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \end{matrix}, \\
 t = 3, \quad M_3 &= \begin{matrix} & 1 & d_1 & d_2 & d_1^2 & d_1 d_2 & d_2^2 & d_1^3 & d_1^2 d_2 & d_1 d_2^2 & d_2^3 \\ f_1 & \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 \end{bmatrix} \\ f_2 & \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \\ x_1 f_1 & \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \\ x_1 f_2 & \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \end{bmatrix} \\ x_2 f_1 & \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \\ x_2 f_2 & \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \\ x_1^2 f_1 & \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \\ x_1^2 f_2 & \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \\ x_1 x_2 f_1 & \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \\ x_1 x_2 f_2 & \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \\ x_2^2 f_1 & \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \\ x_2^2 f_2 & \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \end{matrix}.
 \end{aligned}$$

因为 $\dim(\text{null}(M_4)) = \dim(\text{null}(M_3)) = 4$, 所以有 $\mathcal{D}_\xi(I_f) := \text{Span}_{\mathbb{C}}\{1, d_2, d_2^2 + d_1, d_2^3 + d_1 d_2\}$.

Macaulay 方法中, 矩阵的最大规模为 $n \binom{\rho+n}{n} \times \binom{\rho+n+1}{n}$. 显然, 它会随着 ρ 指数级快速增长.

方法 2.2 (MMM) 若已知 $\mathcal{D}_\xi^t(I_f)$, 则 $\Lambda \in \mathcal{D}_\xi^{t+1}(I_f)$ 满足

$$\Phi_i(\Lambda) \in \mathcal{D}_\xi^t(I_f), \quad \forall i = 1, \dots, n, \quad \text{且} \quad \Lambda(f) = \mathbf{0}, \quad (2.4)$$

其中 $\Phi_i(\mathbf{d}^\alpha) = d^{\alpha_1} \dots d^{\alpha_{i-1}} \dots d^{\alpha_n}$, 若 $\alpha_i > 0$; 否则, $\Phi_i(\mathbf{d}^\alpha) = 0$. 事实上, (2.4) 与 (2.3) 等价, 因为

$$\Phi_i(\Lambda)(f) = \Lambda((x_i - \xi_i)f), \quad i = 1, \dots, n.$$

定义算子 $\Psi_i : \mathfrak{D}_\xi \rightarrow \mathfrak{D}_\xi : \Psi_i(\mathbf{d}^\alpha) = d^{\alpha_1} \dots d^{\alpha_{i+1}} \dots d^{\alpha_n}$, 若 $\alpha_1 = \dots = \alpha_{i-1} = 0$; 若不然, 则 $\Psi_i(\mathbf{d}^\alpha) = 0$. 基于 (2.4), 下述定理降低了微分泛函支撑的自由度并相应地减少了线性方程的个数.

定理 2.1 ^[10,11] 若 $\mathcal{D}_\xi^t(I_f) = \text{Span}_{\mathbb{C}}\{1, \Lambda_1, \dots, \Lambda_k\}$, 则 $\Lambda \in \mathcal{D}_\xi^{t+1}(I_f)$ ($\Lambda \neq 1$) 必有如下形式:

$$\Lambda = \sum_{j=1}^k c_{1,j} \Psi_1(\Lambda_j) + \dots + \sum_{j=1}^k c_{n,j} \Psi_n(\Lambda_j), \quad (2.5)$$

且满足

- (i) $\sum_{j=1}^k c_{i,j} \Phi_l(\Lambda_j) - \sum_{j=1}^k c_{l,j} \Phi_i(\Lambda_j) = 0, 1 \leq i < l \leq n;$
(ii) $\Lambda(f) = \mathbf{0}.$

基于上述性质, Marinari 等 ^[10] 提出了一种计算局部对偶空间基的方法; 随后, Mourrain ^[11] 又对它进行了改进: 将条件 (i) 和 (ii) 表示成以 $\Psi_i(\Lambda_j)$ 为列指标的矩阵 M_{t+1} , 有 $M_{t+1} \text{vec}(c_{i,j}) = \mathbf{0}$ 当且仅当 $\Lambda \in \mathcal{D}_\xi^{t+1}(I_f)$ ($\Lambda \neq 1$), 因此, $\text{null}(M_{t+1})$ 的基与 $\mathcal{D}_\xi^{t+1}(I_f)$ 的基一一对应; 由 $\mathcal{D}_\xi^0(I_f) = \text{Span}_{\mathbb{C}}\{1\}$, 逐次计算 $\mathcal{D}_\xi^{t+1}(I_f)$ 的基, 直至 $\dim(\text{null}(M_{t+1})) = \dim(\text{null}(M_t))$. Hao 等 ^[12] 给出了计算奇异解的重结构的 Matlab 算法实现.

例 2.1 续 根据 MMM 方法, $\mathcal{D}_\xi(I_f)$ 的基可按如下步骤计算:

$$t = 0, \quad M_1 = \begin{bmatrix} d_1 & d_2 \\ 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix},$$

$$t = 1, \quad M_2 = \begin{bmatrix} d_1 & d_2 & d_1 d_2 & d_2^2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix},$$

$$t = 2, \quad M_3 = \begin{bmatrix} d_1 & d_2 & d_1 d_2 & d_2^2 & d_1^2 + d_1 d_2^2 & d_2^3 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

因 $\dim(\text{null}(M_4)) = \dim(\text{null}(M_3)) = 3$, 故 $\mathcal{D}_\xi(I_f) := \text{Span}_{\mathbb{C}}\{1, d_2, d_2^2 + d_1, d_2^3 + d_1 d_2\}$.

MMM 方法中, 矩阵的最大规模为 $(\frac{1}{2}\mu(n-1)n + n) \times \mu n$. 显然, 它随着 μ 的增长而线性地增长.

2.3 宽度为 1 情形

若 $\kappa := n - \text{rank}(Df(\xi)) = 1$, 则

$$\dim(\mathcal{D}_\xi^{t+1}(I_f)) = \dim(\mathcal{D}_\xi^t(I_f)) + 1, \quad t = 0, 1, \dots, \rho - 1, \quad (2.6)$$

特别地, $\mu = \rho + 1$. 对于 $\kappa = 1$ 的特例, 当逐次计算 $\mathcal{D}_\xi^t(I_f)$ 的基时, 新增的微分泛函至多只有一个, 即存在 $\mathcal{D}_\xi(I_f)$ 的一组基 $\{1, \Lambda_1, \dots, \Lambda_\rho\}$, 满足 $\deg(\Lambda_i) = i, i = 1, \dots, \rho$.

因 $n - \text{rank}(Df(\xi)) = 1$, 则必然存在 $Df(\xi)$ 的某一列可被其他 $n - 1$ 列线性表示, 不妨设它为第一列, 即 $\Lambda_1 := d_1 + c_{1,2}d_2 + \cdots + c_{1,n}d_n$. 对于特例 $\kappa = 1$, 下述定理进一步降低微分泛函支撑的自由度至 $n - 1$ 并相应地减少线性方程的个数至 n .

定理 2.2 ^[13] 若已知 $\mathcal{D}_\xi^t(I_f) = \text{Span}_{\mathbb{C}}\{1, \Lambda_1, \dots, \Lambda_t\}$, 满足

$$\Lambda_i = \sum_{1 < |\alpha| \leq i} c_\alpha \mathbf{d}_\alpha + c_{i,2}d_2 + \cdots + c_{i,n}d_n = \Delta_i + c_{i,2}d_2 + \cdots + c_{i,n}d_n, \quad i = 1, \dots, t, \quad (2.7)$$

则新增的 $\Lambda_{t+1} \in \mathcal{D}_\xi^{t+1}(I_f)$ 必有如下形式:

$$\begin{aligned} \Lambda_{t+1} &= \Psi_1(\Lambda_t) + \sum_{j=1}^t c_{t+1-j,2} \Psi_2(\Lambda_j) + \cdots + \sum_{j=1}^t c_{t+1-j,n} \Psi_n(\Lambda_j) + c_{t+1,2}d_2 + \cdots + c_{t+1,n}d_n \\ &= \Delta_{t+1} + c_{t+1,2}d_2 + \cdots + c_{t+1,n}d_n, \end{aligned} \quad (2.8)$$

且满足 $\Lambda_{t+1}(f) = \mathbf{0}$.

基于上述性质, 我们提出了一种针对特例 $\kappa = 1$ 的计算局部对偶空间基的方法: 将 $\Lambda_{t+1}(f) = \mathbf{0}$ 表示成以 f_1, \dots, f_n 为行指标且以 $d_2, \dots, d_n, \Delta_{t+1}$ 为列指标的矩阵 M_{t+1} , 则 $M_{t+1} \text{vec}(c_{t+1,2}, \dots, c_{t+1,n}, 1) = \mathbf{0}$ 当且仅当 $\Lambda_{t+1} \in \mathcal{D}_\xi^{t+1}(I_f)$, 因此, $\text{null}(M_{t+1})$ 的基与 $\mathcal{D}_\xi^{t+1}(I_f)$ 中新增的基一一对应; 由 $\mathcal{D}_\xi^1(I_f) = \text{Span}_{\mathbb{C}}\{1, \Lambda_1\}$ 开始, 逐次计算 $\mathcal{D}_\xi^{t+1}(I_f)$ 中新增的基, 直至 $\dim(\text{null}(M_{t+1})) = 0$.

例 2.1 续 根据上述方法, $\mathcal{D}_\xi(I_f)$ 的基可按如下步骤计算 (被 $Df(\xi)$ 其他列线性表示的列为第 2 列): 由 $\mathcal{D}_\xi^1(I_f) = \text{Span}_{\mathbb{C}}\{1, d_2\}$, 可得

$$\begin{aligned} t = 1, \quad M_2 &= \begin{bmatrix} d_1 & d_2^2 \\ 0 & 0 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}, \\ t = 2, \quad M_3 &= \begin{bmatrix} d_1 & d_2^3 + d_1d_2 \\ 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \\ t = 3, \quad M_4 &= \begin{bmatrix} d_1 & d_2^4 + d_1d_2^2 + d_1^2 \\ 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

因 $\dim(\text{null}(M_4)) = 0$, 故 $\mathcal{D}_\xi(I_f) := \text{Span}_{\mathbb{C}}\{1, d_2, d_2^2 + d_1, d_2^3 + d_1d_2\}$.

对于特例 $\kappa = 1$, 上述方法中矩阵规模恒为 $n \times n$.

2.4 小结

由上述几种基的计算方法不难看出, 对于近似奇异解 $\tilde{\xi}$, 仍可计算一组线性无关的微分泛函使其作用到任意 $(\mathbf{x} - \xi)^\beta f$ 上都近似为 0. 例如, 对于特例 $\kappa = 1$, 可递归地求解线性最小二乘问题

$$\min_{\mathbf{y} \in \mathbb{C}^n} \|(d_2(f), \dots, d_n(f))\mathbf{y} + \tilde{\Delta}_t(f)\|. \quad (2.9)$$

令 $\tilde{\Delta}_1 = d_1$, 对于 $t \geq 1$, 求解 (2.9) 得到 $(c_{t,2}, \dots, c_{t,n})$. 令 $\tilde{\Lambda}_t = \tilde{\Delta}_t + c_{t,2}d_2 + \dots + c_{t,n}d_n$, 按照 (2.8) 构造 $\tilde{\Delta}_{t+1}$, 直至对于某个 t , (2.9) 的最优值大于预设阈值 $\epsilon > 0$. 因此, 局部对偶空间不仅完备地刻画了孤立奇异解的重结构, 并且对于近似奇异解具有良好的数值稳定性, 为精化方法的终止性和收敛性, 以及验证方法的良态化提供了可靠的分析工具. 另外, (2.8) 其实是特例 $\kappa = 1$ 情形中一组约化基的参数化表示, 基于该表示, 我们可以得到宽度为 1 情形下, 近似奇异解的精化和验证的更高效的算法.

3 孤立奇异解的精化

本节将讨论近似奇异解的精化问题 (1.2). 因 Jacobi 矩阵不可逆, 对于代数方程组 $f(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ 的近似奇异解 $\tilde{\xi}$, Newton-Raphson 方法 (1.4) 一般只是线性收敛.

例 3.1 考虑 $f(\mathbf{x}) = \{x_1^2 + x_2 - 3, x_1 + \frac{1}{8}x_2^2 - \frac{3}{2}\}$ 和 $\tilde{\xi} = (1.01, 2.01)$.

记 $\tilde{\xi}_0 = \tilde{\xi}$, $\tilde{\xi}_k$ 为 k 次 Newton 迭代后的近似解, 则

$$\begin{aligned}\tilde{\xi}_1 &= (1.0025083056, 1.9950332226), \\ \tilde{\xi}_{10} &= (1.0000700981, 1.9998598007), \\ \tilde{\xi}_{100} &= (1.0000014182, 1.9999971635).\end{aligned}$$

本节将介绍两种在孤立奇异解附近具有二次收敛 (1.5) 的精化方法: 基于去奇异化的收缩方法和针对特例 $\kappa = 1$ 的精化方法.

3.1 基于去奇异化的收缩方法

因 $\kappa = n - \text{rank}(Df(\xi)) = \dim(\text{null}(Df(\xi))) > 0$, 故存在非零向量 $\zeta \in \mathbb{C}^n$ 满足 $Df(\xi)\zeta = \mathbf{0}$. 基于上述性质, Ojika 等^[14]、Yamamoto^[15] 和 Ojika^[16] 提出了一种基于去奇异化的收缩方法; Leykin 等^[17,18] 做了改进和推广: 记 $r := \text{rank}(Df(\xi))$, 构造增广代数系统

$$g(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \begin{Bmatrix} f(\mathbf{x}) \\ Df(\mathbf{x})B\mathbf{y} \\ \mathbf{h}^*\mathbf{y} - 1 \end{Bmatrix} = \mathbf{0}, \quad (3.1)$$

其中随机矩阵 $B \in \mathbb{C}^{n \times (r+1)}$ 和随机向量 $\mathbf{h} \in \mathbb{C}^{r+1}$ 中的元素来自复单位圆, 它们概率为 1 地保证了 ζ 的唯一性, 即保证了 $g(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \mathbf{0}$ 的解 (ξ, ζ) 的孤立性; 对于近似奇异解 $\tilde{\xi}$, 记 r 为 $Df(\tilde{\xi})$ 的近似秩, 也即 $Df(\tilde{\xi})$ 的奇异值满足 $\sigma_1 \geq \dots \geq \sigma_r \geq \epsilon > \sigma_{r+1} \geq \dots \geq \sigma_n > 0$ ($\epsilon > 0$ 为预设阈值). 记 $\tilde{\zeta}$ 为最小二乘问题

$$\min_{\mathbf{y} \in \mathbb{C}^n} \left\| \begin{pmatrix} Df(\tilde{\xi})B \\ \mathbf{h}^* \end{pmatrix} \mathbf{y} - \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ 1 \end{pmatrix} \right\|^2 \quad (3.2)$$

的最优解, 则 $(\tilde{\xi}, \tilde{\zeta})$ 为 $g(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \mathbf{0}$ 的近似解; 若 $\dim(\text{null}(Dg(\xi, \zeta))) > 0$, 则递归地重复上述增广代数系统和增广解的构造过程.

设最终的增广代数系统为 g , 最终的增广近似解为 $\tilde{\eta}$, 记 $\tilde{\eta}_0 = \tilde{\eta}$, 使用迭代公式精化增广系统的根

$$\tilde{\eta}_{k+1} = \tilde{\eta}_k - (Dg(\tilde{\eta}_k)^* Dg(\tilde{\eta}_k))^{-1} Dg(\tilde{\eta}_k)^* g(\tilde{\eta}_k). \quad (3.3)$$

值得注意的是, 与 (1.4) 相比, 因为 g 是超定系统, 故 (3.3) 中用广义逆代替了 Jacobi 矩阵的逆.

例 3.1 续 取 $\epsilon = 0.01$. 首先, 构造增广代数系统

$$Df(x) = \begin{pmatrix} 2x_1 & 1 \\ 1 & 0.25x_2 \end{pmatrix}, \quad Df(\tilde{\xi}) = \begin{pmatrix} 2.02 & 1 \\ 1 & 0.5025 \end{pmatrix}, \quad r = 1,$$

$$g = \begin{pmatrix} f \\ 2x_1x_3 + x_4 \\ x_3 + 0.25x_2x_4 \\ x_3 - 1 \end{pmatrix}, \quad \tilde{\eta} = (\tilde{\xi}, 1, -2.02),$$

$$Dg(x) = \begin{pmatrix} 2x_1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0.25x_2 & 0 & 0 \\ 2x_3 & 0 & 2x_1 & 1 \\ 0 & 0.25x_4 & 1 & 0.25x_2 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad Dg(\tilde{\eta}) = \begin{pmatrix} 2.02 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0.5025 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 2.02 & 1 \\ 0 & -0.5025 & 1 & 0.5025 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad r = 3,$$

$$g = \begin{pmatrix} g \\ 2x_1x_5 + x_6 \\ x_5 + 0.25x_2x_6 \\ 2x_3x_5 + 2x_1x_7 + x_8 \\ 0.25x_4x_6 + x_7 + 0.25x_2x_8 \\ x_7 \\ x_5 - 1 \end{pmatrix}, \quad \tilde{\eta} = (\tilde{\eta}, 1, -2.02, 0, -2.02).$$

此时, $Dg(\tilde{\eta})$ 的近似秩为 8, 也即 $\dim(\text{null}(Dg(\tilde{\eta}))) = 0$.

将迭代 (3.3) 应用于增广系统 $g(x_1, \dots, x_8)$ 和近似根 $\tilde{\eta}_0 = (1.01, 2.01, 1, -2.02, 1, -2.02, 0, -2.02)$, 得到

$$\tilde{\eta}_1 = (1.0000304949, 2.0000271380, \dots), \quad \tilde{\eta}_2 = (1.0000000005, 1.9999999999, \dots).$$

Leykin 等^[17] 给出了下述定理, 保证了增广代数系统构造过程的有限终止性.

定理 3.1^[17] 增广解 η 的重数小于 ξ 的重数.

根据上述定理, 一次增广代数系统的构造 (3.1) 会使增广解的重数严格下降. 因此, 构造方法 (3.1) 被称作收缩方法, 递归过程即为去奇异化过程. 由于最终增广解的重数为 1, 构造过程的递归次数至多为 $\mu - 1$ 次. 记 I_g 为一次收缩后的代数系统 g 生成的理想, Dayton 和 Zeng^[19] 给出的下述定理提供了递归次数更小的上界.

定理 3.2^[19] 局部对偶空间 $\mathcal{D}_\eta(I_g)$ 的深度小于 $\mathcal{D}_\xi(I_f)$ 的深度.

根据上述定理, 构造过程的递归次数至多为 ρ 次. 此上界更小, 因为 $\rho \leq \mu - 1$, 并且等号成立当且仅当 $\kappa = 1$. 因为一次增广代数系统的构造 (3.1) 使深度严格降一, 收缩方法中矩阵规模的上界为

$2^p n \times 2^p n$. 下述定理证明了文献 [19] 中的猜想, 即对于最常见孤立奇异解 ($\kappa = 1$), 收缩方法的复杂度 (矩阵规模) 总是达到最差情形.

定理 3.3^[20] $\mathcal{D}_\eta(I_g)$ 的深度等于 $\mathcal{D}_\xi(I_f)$ 的深度减一.

因此, 针对特例 $\kappa = 1$ 的二次收敛且低复杂度的精化方法是极其必要的.

3.2 针对特例 $\kappa = 1$ 的精化方法

因 $\kappa = \dim(\text{null}(Df(\xi))) = 1$, 故存在唯一非零向量 $\zeta \in \mathbb{C}^n$ 满足 $Df(\xi)\zeta = \mathbf{0}$ 且 $\|\zeta\| = 1$. 对于近似奇异解 $\tilde{\xi}$, 记 $\tilde{\zeta}$ 为

$$\min_{\|\mathbf{y}\|=1} \|Df(\tilde{\xi})\mathbf{y}\| \quad (3.4)$$

的最优解. 事实上, $\tilde{\zeta}$ 为 $Df(\tilde{\xi})$ 的最小奇异值对应的单位奇异向量. 沿 $\tilde{\zeta}$ 方向, 是否存在合适的步长 δ 使得

$$\|\tilde{\xi} + \delta\tilde{\zeta} - \xi\| = \mathcal{O}(\|\tilde{\xi} - \xi\|^2)? \quad (3.5)$$

例 3.1 续 设已知 $\xi = (1, 2)$, 则对于 $\tilde{\xi} = (1.01, 2.01)$, $\|\tilde{\xi} - \xi\|_2 \approx 0.0141$. 计算 $Df(\tilde{\xi})$ 的奇异值分解

$$Df(\tilde{\xi}) = \begin{pmatrix} 2.02 & 1 \\ 1 & 0.5025 \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} -0.8957 & -0.4447 \\ -0.4447 & 0.8957 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2.5165 & 0 \\ 0 & 0.0060 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -0.8957 & -0.4447 \\ -0.4447 & 0.8957 \end{pmatrix},$$

则 $\tilde{\zeta} = (-0.4447, 0.8957)$. 计算 $\min \|\tilde{\xi} + \delta\tilde{\zeta} - \xi\|_2 = 0.0134$, 此时 $\delta = -0.0045$.

若考虑近似奇异解 $\tilde{\xi}' = (1.01, 1.98)$, 则 $\|\tilde{\xi}' - \xi\|_2 \approx 0.0224$. 计算奇异值分解和最小二乘得到

$$\tilde{\zeta}' = (-0.4436, 0.8962), \quad \min \|\tilde{\xi}' + \delta'\tilde{\zeta}' - \xi\|_2 = 0.00008891,$$

此时 $\delta' = -0.0224$, $\tilde{\xi}' + \delta'\tilde{\zeta}' = (1.00007968, 2.00003944)$.

上述例子表明, 在特例 $\kappa = 1$ 的孤立奇异解附近, 存在某些适当位置的近似奇异解, 满足若以其 Jacobi 矩阵最小奇异值对应的单位奇异向量为方向, 则存在合适的步长使其找到二次收敛的精化解. 基于上述性质, 本小节将阐述: 如何将一般的近似奇异解矫正至适当位置, 以及如何计算合适的步长使精化解二次收敛? 它们一起构成了针对特例 $\kappa = 1$ 的精化方法.

3.2.1 基于正则化最小二乘的位置矫正

记 σ_n 为 $Df(\tilde{\xi})$ 的最小奇异值, $\tilde{\omega}$ 为正则化最小二乘问题

$$\min_{\mathbf{y} \in \mathbb{C}^n} \|Df(\tilde{\xi})\mathbf{y} + f(\tilde{\xi})\|^2 + \sigma_n \|\mathbf{y}\|^2 \quad (3.6)$$

的最优解, 则 $\tilde{\xi}' = \tilde{\xi} + \tilde{\omega}$ 为矫正后的近似奇异解. 下述定理证明了 $\tilde{\xi}'$ 虽未二次收敛至 ξ , 但 $f(\tilde{\xi}')$ 已二次收敛至 0.

定理 3.4^[21] 矫正后的近似奇异解 $\tilde{\xi}'$ 满足

$$\|\tilde{\xi}' - \xi\| = \mathcal{O}(\|\tilde{\xi} - \xi\|) \quad \text{且} \quad \|f(\tilde{\xi}')\| = \mathcal{O}(\|\tilde{\xi} - \xi\|^2). \quad (3.7)$$

假设 $Df(\tilde{\xi}') = U\Sigma V^*$ 为 $Df(\tilde{\xi}')$ 的奇异值分解, 其中 $\Sigma = \text{diag}\{\sigma_1, \dots, \sigma_n\}$ 为奇异值组成的对角矩阵, $V = (\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_n)$ 为奇异向量组成的酉矩阵. 下述定理保证了存在合适的步长使得 (3.5) 成立.

定理 3.5 ^[21] 矫正后的近似奇异解 $\tilde{\xi}'$ 满足

$$|\mathbf{v}_i^*(\tilde{\xi}' - \xi)| = \mathcal{O}(\|\tilde{\xi} - \xi\|^2), \quad i = 1, \dots, n-1. \quad (3.8)$$

若沿 $\tilde{\zeta}' = \mathbf{v}_n$ 方向, 以 $\delta' = -\mathbf{v}_n^*(\tilde{\xi}' - \xi)$ 为步长, 则精化解 $\tilde{\xi}' + \delta'\tilde{\zeta}'$ 满足

$$\|V^*(\tilde{\xi}' + \delta'\tilde{\zeta}' - \xi)\| = \left\| \begin{pmatrix} \mathbf{v}_1^*(\tilde{\xi}' - \xi) + \delta'\mathbf{v}_1^*\mathbf{v}_n \\ \vdots \\ \mathbf{v}_{n-1}^*(\tilde{\xi}' - \xi) + \delta'\mathbf{v}_{n-1}^*\mathbf{v}_n \\ \mathbf{v}_n^*(\tilde{\xi}' - \xi) + \delta'\mathbf{v}_n^*\mathbf{v}_n \end{pmatrix} \right\|.$$

因 V 为酉矩阵, 于是, $\mathbf{v}_i^*\mathbf{v}_n = 0, i = 1, \dots, n-1$ 且 $\mathbf{v}_n^*\mathbf{v}_n = 1$. 根据上述定理, 再由酉矩阵保持 Euclid 范数不变的性质, 可得

$$\|\tilde{\xi}' + \delta'\tilde{\zeta}' - \xi\| = \|V^*(\tilde{\xi}' + \delta'\tilde{\zeta}' - \xi)\| = \mathcal{O}(\|\tilde{\xi} - \xi\|^2).$$

因此, 对于一般的近似奇异解 $\tilde{\xi}$, 通过解正则化最小二乘问题 (3.6), 可将其矫正至“有效”位置 $\tilde{\xi}'$, 使其满足若以 $\tilde{\zeta}'$ 为方向, 则存在步长 δ' 使精化解 $\tilde{\xi}' + \delta'\tilde{\zeta}'$ 二次收敛.

例 3.1 续 对于近似奇异解 $\tilde{\xi}' = (1.01, 2.01)$, 解以 $\sigma_2 \approx 0.0060$ 为正则化参数的 (3.6), 得到

$$\tilde{\omega} \approx (-0.0119, -0.0060), \quad \tilde{\xi}' \approx (0.9981, 2.0040), \quad f(\tilde{\xi}') \approx (0.0001442, 0.00007224).$$

计算 $Df(\tilde{\xi}')$ 的奇异值分解

$$Df(\tilde{\xi}') = \begin{pmatrix} 1.9962 & 1 \\ 1 & 0.5010 \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} -0.8941 & -0.4479 \\ -0.4479 & 0.8941 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2.4972 & 0 \\ 0 & 0.000039 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -0.8941 & -0.4479 \\ -0.4479 & 0.8941 \end{pmatrix},$$

则 $\tilde{\zeta}' = \mathbf{v}_2 \approx (-0.4479, 0.8941)$.

假设已知 $\xi = (1, 2)$, 则 $\mathbf{v}_1^*(\tilde{\xi}' - \xi) \approx -0.00009285$. 令 $\delta' = -\mathbf{v}_2^*(\tilde{\xi}' - \xi) \approx -0.004427$, 则

$$\tilde{\xi}' + \delta'\tilde{\zeta}' = (1.00008301, 2.00004159).$$

因 ξ 未知, 故需找到某种方法计算步长 $\delta' = -\tilde{\zeta}'^*(\tilde{\xi}' - \xi)$, 即矫正后的近似奇异解 $\tilde{\xi}'$ 的残差在 $\tilde{\zeta}'$ 方向上的投影.

3.2.2 基于局部对偶空间的步长计算

对于矫正后的近似奇异解 $\tilde{\xi}'$, 记 $\{1, \tilde{\Lambda}_1, \dots, \tilde{\Lambda}_\rho\}$ 为近似局部对偶空间 $\mathcal{D}_{\tilde{\xi}'}(I_f)$ 的一组约化基 (可由参数化表示 (2.8) 和解最小二乘问题 (2.9) 递归地得到). 下述定理证明了不仅 $f(\tilde{\xi}')$ 已二次收敛至 0, 而且 $\tilde{\Lambda}_i(f)$ ($i = 1, \dots, \rho-1$) 皆已二次收敛至 0.

定理 3.6 ^[21] 矫正后的近似奇异解 $\tilde{\xi}'$ 满足

$$\|\tilde{\Lambda}_i(f)\| = \mathcal{O}(\|\tilde{\xi} - \xi\|^2), \quad i = 1, \dots, \rho-1. \quad (3.9)$$

记 $\tilde{\Delta}_\mu$ 为按照 (2.8) 构造的 μ 次微分泛函, \tilde{v} 为最小二乘问题

$$\min_{\mathbf{y} \in \mathbb{C}^n} \|(\tilde{\Delta}_\mu(f), d_2(f), \dots, d_n(f))\mathbf{y} + \tilde{\Lambda}_\rho(f)\| \quad (3.10)$$

的最优解, 下述定理保证了步长 $\delta' = \tilde{v}_1/\mu$ 使得 (3.5) 成立.

定理 3.7 ^[21] 若近似局部对偶空间 $\mathcal{D}_{\tilde{\xi}'}(I_f)$ 的宽度 κ 、深度 ρ 和重数 μ 与 $\mathcal{D}_\xi(I_f)$ 一致, $Df(\tilde{\xi}')$ 的第一列可被其他列近似线性表示, 则

$$\|\tilde{\xi}' + \delta'\tilde{\zeta}' - \xi\| = \mathcal{O}(\|\tilde{\xi}' - \xi\|^2), \quad (3.11)$$

其中 $\tilde{\zeta}'$ 的第一分量值等于 1.

因此, 对于特例 $\kappa = 1$ 的精化方法可以总结为以下 3 步:

- (1) 解正则化最小二乘问题 (3.6), 得到矫正的近似奇异解 $\tilde{\xi}'$ 和方向 $\tilde{\zeta}'$;
- (2) 递归地解 ρ 个最小二乘问题 (2.9), 得到微分泛函 $\tilde{\Lambda}_\rho$ 和 $\tilde{\Delta}_\mu$;
- (3) 解最小二乘问题 (3.10), 得到步长 $\tilde{\delta}'$, 得到精化解 $\tilde{\xi}' + \delta'\tilde{\zeta}'$.

对于特例 $\kappa = 1$, 上述方法中矩阵规模恒为 $n \times n$.

例 3.1 续 首先, 矫正的近似奇异解为 $\tilde{\xi}' = (0.9981, 2.0040)$, 方向为 $\tilde{\zeta}' = (1, -1.9961)$. 然后, 递归地解最小二乘问题

$$\tilde{\Delta}_1 = d_1, \quad \min \left\| \begin{bmatrix} d_2 \\ 1 \\ 0.5010 \end{bmatrix} y + \begin{bmatrix} \tilde{\Delta}_1 \\ 1,9962 \\ 1 \end{bmatrix} \right\| = 0.0001101, \quad \tilde{\Lambda}_1 = \tilde{\Delta}_1 - 1.9961d_2,$$

$$\tilde{\Delta}_2 = d_1^2 - 1.9961d_1d_2 + 3.9844d_2^2, \quad \min \left\| \begin{bmatrix} d_2 \\ 1 \\ 0.5010 \end{bmatrix} y + \begin{bmatrix} \tilde{\Delta}_2 \\ 1 \\ 0.4981 \end{bmatrix} \right\| = 0.002593,$$

$$\tilde{\Lambda}_2 = \tilde{\Delta}_2 - 0.9988d_2,$$

$$\tilde{\Delta}_3 = d_1^3 - 1.9961d_1^2d_2 + 3.9844d_1d_2^2 - 7.9533d_2^3 - 0.9988d_1d_2 + 3.9874d_2^2,$$

$$\min \left\| \begin{bmatrix} d_2 \\ 1 \\ 0.5010 \end{bmatrix} y + \begin{bmatrix} \tilde{\Delta}_3 \\ 0 \\ 0.4984 \end{bmatrix} \right\| = 0.4456,$$

解最小二乘问题

$$\min \left\| \begin{bmatrix} \tilde{\Delta}_3 & d_2 \\ 0 & 1 \\ 0.4984 & 0.5010 \end{bmatrix} \mathbf{y} + \begin{bmatrix} \tilde{\Delta}_2 \\ 0.0012 \\ -0.001999 \end{bmatrix} \right\|,$$

得到 $\tilde{\delta}' = 0.001971$. 最后输出

$$\tilde{\xi}' + \delta'\tilde{\zeta}' = (1.00003716, 2.00007382).$$

3.3 小结

本节综述了基于去奇异化的收缩方法和一种针对特例 $\kappa = 1$ 的精细化方法, 它们在孤立奇异解附近具有二次收敛性.

除了上述两种方法以外, 其他符号数值方法也致力于解决近似奇异解的精细化问题. Rall [22] 分析了 Newton-Raphson 方法在孤立奇异解附近的收敛性质. 之后, 诸多方法在不同条件假设下恢复了 Newton-Raphson 方法在孤立奇异解附近的二次收敛性 (参见文献 [22-28]).

当 Jacobi 矩阵 $Df(\tilde{\xi})$ 的亏秩等于 1 且 Hesse 矩阵 $D^2f(\tilde{\xi})$ 满足某正则性条件时, Griewank [29] 利用 $f(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ 和 $Df(\tilde{\xi})$ 的奇异值分解构造了一个包边系统, 并使用类似 (3.3) 的迭代公式恢复了 Newton-Raphson 方法在此类孤立奇异解附近的二次收敛性. Shen 和 Ypma [30,31] 将这种包边方法推广至 $Df(\tilde{\xi})$ 亏秩大于 1 且 $D^2f(\tilde{\xi})$ 满足正则性条件的情形.

Ojika 等 [14]、Yamamoto [15] 和 Ojika [16] 曾提出一种基于 $Df(\tilde{\xi})$ 行列式的收缩方法来构造增广系统. 正是受该方法启发, Leykin 等 [17,18] 开发了数值稳定性更好的基于 $Df(\tilde{\xi})$ 零空间的收缩方法. Lecerf [32] 提出了一种新的收缩方法可令最终增广系统为三角化系统. Mantzaflaris 和 Mourrain [33] 利用局部对偶空间与其对应商环中满足原始 - 对偶的一组基, 提出了一种一步收缩方法来交替精细化近似奇异解与近似局部对偶空间的一组基. 受该方法启发, Hauenstein 等 [34,35] 和 Akoglu 等 [36] 构造了一种新的收缩方法可同时精细化近似奇异解和近似局部对偶空间的一组基. 季振义等 [37] 改进了 Mourrain 等的对偶空间的计算, 并应用于一类非线性方程组奇异解的计算 (参见文献 [38]).

Giusti 和 Yakoubsohn [39] 基于 $Df(\tilde{\xi})$ Schur 补矩阵的零空间构造了一组收缩序列, 并给出了某种定量的收敛性保证, 推广了 Smale 的 Gamma 定理.

4 孤立奇异解的验证

本节将讨论近似奇异解的验证问题 (1.3). 因为方程系数任意微小的扰动都可能导致一个孤立奇异解变成一簇非奇异解, 因此, 单独用带有舍入误差的浮点数计算来验证代数方程组是否拥有孤立奇异解是一个不可能完成的任务.

例 3.1 续 考虑 $\tilde{f} = \{x_1^2 + x_2 - 3 - \epsilon^2, x_1 + \frac{1}{8}x_2^2 - \frac{3}{2} - \frac{1}{2}\epsilon^2\}$, 它在 $\xi = (1, 2)$ 附近有 3 个非奇异解

$$\tilde{\xi}_1 = (1 + \epsilon, 2 - 2\epsilon), \quad \tilde{\xi}_2 = (1 - \epsilon, 2 + 2\epsilon), \quad \tilde{\xi}_3 = (1 + \epsilon\sqrt{4 - \epsilon^2} - 2\epsilon, 2 + 2\epsilon\sqrt{4 - \epsilon^2} - 4\epsilon).$$

对于近似奇异解的验证问题, 可以考虑下述两个良态化版本.

问题 4.1 (扰动系统孤立解的验证) 对于近似奇异解 $\tilde{\xi} \in \mathbb{C}^n$, 计算 $r > 0$ 和 $r' > 0$ 满足

$$\text{在 } B(\tilde{\xi}, r) \text{ 内存在 } \tilde{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{0} \text{ 的唯一解且 } \|\tilde{f} - f\|_\infty \leq r', \quad (4.1)$$

其中 $\|\tilde{f} - f\|_\infty$ 为系数扰动误差的最大值.

问题 4.2 (代数系统一簇解的验证) 对于近似奇异解 $\tilde{\xi} \in \mathbb{C}^n$, 计算 $r > 0$ 满足

$$\text{在 } B(\tilde{\xi}, r) \text{ 内存在 } f(\mathbf{x}) = \mathbf{0} \text{ 的一簇解且它们的重数之和为 } \mu. \quad (4.2)$$

本节将分别介绍满足 (4.1) 和 (4.2) 的近似奇异解验证方法.

4.1 验证扰动系统的孤立解

记 $\mathbb{IC}(\mathbb{IR})$ 是 $\mathbb{C}(\mathbb{R})$ 上的区间集合, $\mathbb{IC}^n(\mathbb{IR}^n)$ 和 $\mathbb{IC}^{n \times n}(\mathbb{IR}^{n \times n})$ 是 $\mathbb{C}(\mathbb{R})$ 上的区间向量集合和区间矩阵集合. 除了 Smale 的阿尔法理论 (1.6), 下述定理也可给出非奇异近似解的严格误差界, 使得真解唯一存在于其定义的邻域内.

定理 4.1 ^[40–42] 若区间向量 $\mathbf{X} \in \mathbb{IC}^n$ 满足 $\mathbf{0} \in \mathbf{X}$, 区间矩阵 $\mathbf{M} \in \mathbb{IC}^{n \times n}$ 满足 $Df(\tilde{\xi} + \mathbf{X}) \subseteq \mathbf{M}$, 且

$$-Df(\tilde{\xi})^{-1}f(\tilde{\xi}) + (I_n - Df(\tilde{\xi})^{-1}\mathbf{M})\mathbf{X} \subseteq \text{int}(\mathbf{X}) \quad (4.3)$$

成立, 则存在唯一的 $\xi \in \tilde{\xi} + \mathbf{X}$ 满足 $f(\xi) = \mathbf{0}$, 且任意的 $M \in \mathbf{M}$ 可逆. 特别地, Jacobi 矩阵 $Df(\xi)$ 可逆.

例如, 方程 $x^2 - x - 2 = 0$ 在区间 $[1.99, 2.03]$ 内有唯一的单根, 因为 $\tilde{\xi} = 2.01$, $\mathbf{X} = [-0.02, 0.02]$ 和 $\mathbf{M} = [2.98, 3.06]$ 满足 $\mathbf{0} \in \mathbf{X}$, $f'(\tilde{\xi} + \mathbf{X}) \subseteq \mathbf{M}$ 且使得 (4.3) 成立.

显然, 上述定理也不适用于孤立奇异解, 但它可与收缩方法相结合, 验证带扰动的增广代数系统的非奇异增广解, 进而验证存在满足 (4.1) 的孤立奇异解. 下面简要介绍基于区间计算验证奇异解的理论基础, 相关的软件可以参见文献 [43].

4.1.1 基于收缩方法的符号扰动

因 $\kappa = n - \text{rank}(Df(\xi)) = \dim(\text{null}(Df(\xi))) > 0$, 故必然存在 $Df(\xi)$ 的某 κ 列可被其他 $n - \kappa$ 列线性表示, 记 $\mathbf{c} = \{c_1, \dots, c_\kappa\}$ 是它们的指标集合; 亦必然存在 $Df(\xi)$ 的某 κ 行能够被其他 $n - \kappa$ 行线性表示, 记 $\mathbf{k} = \{k_1, \dots, k_\kappa\}$ 是它们的指标集合. 记 $Df(\xi)^c$ 是 $Df(\xi)$ 中去掉指标为 \mathbf{c} 的列组成的矩阵, $I_{\mathbf{k}}$ 是单位矩阵 I_n 中指标为 \mathbf{k} 的列组成的矩阵, 则

$$\text{rank}(Df(\xi)^c, I_{\mathbf{k}}) = n. \quad (4.4)$$

基于上述性质, 构造带扰动的增广代数系统

$$\tilde{g}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}) = \left\{ \begin{array}{l} f(\mathbf{x}) + I_{\mathbf{k}}\mathbf{z} \\ Df(\mathbf{x})^c\mathbf{y} + Df(\mathbf{x})\mathbf{h}^c \end{array} \right\} = \mathbf{0}, \quad (4.5)$$

其中 $\mathbf{h}^c = (0, \dots, \overset{c_1}{1}, \dots, \overset{c_\kappa}{1}, \dots, 0)^T$. 显然, $\tilde{g}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z})$ 为恰当代数系统, 即方程个数 $2n$ 等于变元个数 $n[\mathbf{x}] + (n - \kappa)[\mathbf{y}] + \kappa[\mathbf{z}]$. 因 $Df(\xi)\mathbf{h}^c$ 为 $Df(\xi)$ 中指标为 \mathbf{c} 的列的和, 故存在唯一的 $\zeta \in \mathbb{C}^{n-\kappa}$, 使得 $Df(\xi)^c\zeta + Df(\xi)\mathbf{h}^c = \mathbf{0}$. 因此, $(\xi, \zeta, \mathbf{0})$ 为 $\tilde{g}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}) = \mathbf{0}$ 的孤立解. 对于近似奇异解 $\tilde{\xi}$, \mathbf{c} 和 \mathbf{k} 可由 $Df(\tilde{\xi})$ 和 $Df(\tilde{\xi})^T$ 的近似零空间的 Gauss 消去过程得到 (对应行主元或列主元的指标). 记 $\tilde{\zeta}$ 为最小二乘问题

$$\min_{\mathbf{y} \in \mathbb{C}^{n-\kappa}} \|Df(\tilde{\xi})^c\mathbf{y} + Df(\tilde{\xi})\mathbf{h}^c\|^2 \quad (4.6)$$

的最优解, 则 $(\tilde{\xi}, \tilde{\zeta}, \mathbf{0})$ 为 $\tilde{g}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}) = \mathbf{0}$ 的近似解. 若 $\dim(\text{null}(D\tilde{g}(\xi, \zeta, \mathbf{0}))) > 0$, 则递归地重复上述增广代数系统和增广解的构造过程.

记 $g(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ 为对应于 (4.5) 的无扰动增广代数系统 (无 $I_{\mathbf{k}}\mathbf{z}$ 项), 则其增广解为 (ξ, ζ) . 下述定理保证了带扰动的收缩方法与无扰动的收缩方法具有相同的去奇异化过程, 即扰动 ($I_{\mathbf{k}}\mathbf{z}$) 将超定问题约化为恰当问题.

定理 4.2 ^[44] $D\tilde{g}(\xi, \zeta, \mathbf{0})$ 的零空间与 $Dg(\xi, \zeta)$ 的零空间等价:

$$\text{null}(D\tilde{g}(\xi, \zeta, \mathbf{0})) = \left\{ \begin{pmatrix} \mathbf{v} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} \in \mathbb{C}^{2n} \mid \mathbf{v} \in \text{null}(Dg(\xi, \zeta)) \right\}. \quad (4.7)$$

另一方面, 无扰动的收缩方法是 (3.1) 的特例, 因此, 带扰动的收缩方法 (4.5) 与 (3.1) 具有相同的终止性条件, 即递归次数至多为 ρ 次.

假设去奇异化过程未一次终止, 即 $\dim(\text{null}(D\tilde{g}(\xi, \zeta, \mathbf{0}))) > 0$, 记 \tilde{g}' 为二次收缩的带扰动的增广代数系统, \mathbf{c}' 和 \mathbf{k}' 为二次收缩的指标集合 ($\text{rank}(D\tilde{g}(\xi, \zeta, \mathbf{0})^{\mathbf{c}'}, I_{\mathbf{k}'}) = 2n$). 下述定理证明了扰动具有单调性.

定理 4.3 ^[44] 存在指标集合 \mathbf{c}' 和 \mathbf{k}' 满足

$$\mathbf{c}' \subseteq \mathbf{c}, \quad \mathbf{k}' \subseteq \mathbf{k} + n. \quad (4.8)$$

上述定理表明, 二次收缩的扰动会加至 (4.5) 的 $Df(\mathbf{x})^{\mathbf{c}}\mathbf{y} + Df(\mathbf{x})\mathbf{h}^{\mathbf{c}}$ 中, 即

$$\tilde{g}'(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}) = \left\{ \begin{array}{l} f(\mathbf{x}) + I_{\mathbf{k}}\mathbf{z}_1 \\ Df(\mathbf{x})^{\mathbf{c}}\mathbf{y}_1 + Df(\mathbf{x})\mathbf{h}^{\mathbf{c}} + I_{\mathbf{k}'-n}\mathbf{z}_2 \\ D\tilde{g}(\mathbf{x}, \mathbf{y}_1, \mathbf{z}_1)^{\mathbf{c}'}\mathbf{y}_2 + D\tilde{g}(\mathbf{x}, \mathbf{y}_1, \mathbf{z}_1)\mathbf{h}^{\mathbf{c}'} \end{array} \right\} = \mathbf{0}. \quad (4.9)$$

事实上, 二次收缩的扰动可提升至 (4.5) 的 $f(\mathbf{x}) + I_{\mathbf{k}}\mathbf{z}$ 中, 即

$$\bar{g}'(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}) = \left\{ \begin{array}{l} f(\mathbf{x}) + I_{\mathbf{k}}\mathbf{z}_1 + I_{\mathbf{k}'-n}\mathbf{x}_{\mathbf{c}'}\mathbf{z}_2 \\ D_{\mathbf{x}}\tilde{f}(\mathbf{x}, \mathbf{z})^{\mathbf{c}}\mathbf{y}_1 + D_{\mathbf{x}}\tilde{f}(\mathbf{x}, \mathbf{z})\mathbf{h}^{\mathbf{c}} \\ D_{\mathbf{x}, \mathbf{y}_1, \mathbf{z}_1}\bar{g}(\mathbf{x}, \mathbf{y}_1, \mathbf{z})^{\mathbf{c}'}\mathbf{y}_2 + D_{\mathbf{x}, \mathbf{y}_1, \mathbf{z}_1}\bar{g}(\mathbf{x}, \mathbf{y}_1, \mathbf{z})\mathbf{h}^{\mathbf{c}'} \end{array} \right\} = \mathbf{0}, \quad (4.10)$$

其中 $I_{\mathbf{k}'-n}\mathbf{x}_{\mathbf{c}'}$ 是单位矩阵 I_n 中指标为 $\mathbf{k}'-n$ 的列乘指标为 \mathbf{c}' 的变元组成的矩阵, $\tilde{f}(\mathbf{x}, \mathbf{z})$ 为 $\bar{g}'(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z})$ 的前 n 个方程, $\bar{g}(\mathbf{x}, \mathbf{y}_1, \mathbf{z})$ 为 $\bar{g}'(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z})$ 的前 $2n$ 个方程, $D_{\mathbf{x}}\tilde{f}(\mathbf{x}, \mathbf{z})$ 为 Jacobi 矩阵 $D\tilde{f}(\mathbf{x}, \mathbf{z})$ 中对应 \mathbf{x} 的 n 列组成的矩阵, $D_{\mathbf{x}, \mathbf{y}_1, \mathbf{z}_1}\bar{g}(\mathbf{x}, \mathbf{y}_1, \mathbf{z})$ 为 Jacobi 矩阵 $D\bar{g}(\mathbf{x}, \mathbf{y}_1, \mathbf{z})$ 中对应 \mathbf{x} 、 \mathbf{y}_1 和 \mathbf{z}_1 的 $2n$ 列组成的矩阵.

不难验证, $\text{null}(D\tilde{g}'(\xi, \zeta, \mathbf{0})) = \text{null}(D\bar{g}'(\xi, \zeta, \mathbf{0}))$, 即扰动的提升并不改变带扰动收缩方法的去奇异化过程. 因此, 收缩方法 (4.10) 与 (4.9) 具有相同的终止性条件, 即递归次数至多为 ρ 次. 同为带扰动的增广代数系统, 相较 (4.9), (4.10) 的优势在于, 若 (ξ, ζ, η) 为 $\bar{g}'(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}) = \mathbf{0}$ 的非奇异解, 则 ξ 为扰动代数系统 $\tilde{f}(\mathbf{x}, \eta) = \mathbf{0}$ 的孤立奇异解, 因为

$$\bar{g}'(\xi, \zeta, \eta) = \mathbf{0} \Rightarrow \bar{g}(\xi, \zeta_1, \eta) = \mathbf{0} \Rightarrow \tilde{f}(\xi, \eta) = \mathbf{0} \quad \text{且} \quad D_{\mathbf{x}}\tilde{f}(\xi, \eta)^{\mathbf{c}}\zeta_1 + D_{\mathbf{x}}\tilde{f}(\xi, \eta)\mathbf{h}^{\mathbf{c}} = \mathbf{0}. \quad (4.11)$$

设最终带扰动的增广代数系统为 \bar{g} , 扰动代数系统为

$$\tilde{f}(\mathbf{x}, \mathbf{z}) = f(\mathbf{x}) + I_{\mathbf{k}}\mathbf{z}_1 + \sum_{i=1}^t I_{\mathbf{k}^{(i)}-2^{i-1}n}\mathbf{x}_{\mathbf{c}^{(i)}}^i\mathbf{z}_{i+1}$$

($I_{\mathbf{k}^{(i)}-2^{i-1}n}\mathbf{x}_{\mathbf{c}^{(i)}}^i$ 是单位矩阵 I_n 中指标为 $\mathbf{k}^{(i)}-2^{i-1}n$ 的列乘指标为 $\mathbf{c}^{(i)}$ 的变元的 i 次幂组成的矩阵), 最终的增广近似解为 $(\tilde{\xi}, \tilde{\zeta}, \mathbf{0})$.

定理 4.4 ^[44] 若 $(\mathbf{X}, \mathbf{Y}, \mathbf{Z})$ 满足 $\mathbf{0} \in (\mathbf{X}, \mathbf{Y}, \mathbf{Z})$, M 满足 $D\bar{g}((\tilde{\xi}, \tilde{\zeta}, \mathbf{0}) + (\mathbf{X}, \mathbf{Y}, \mathbf{Z})) \subseteq M$, 且 (4.3) 成立, 则存在唯一的 $\xi \in \tilde{\xi} + \mathbf{X}$, $\eta \in \tilde{\eta} + \mathbf{Z}$ 满足 $\tilde{f}(\mathbf{x}, \eta) = \mathbf{0}$, 且 $D_{\mathbf{x}}\tilde{f}(\xi, \eta)$ 不可逆, 即 ξ 为扰动代数系统 $\tilde{f}(\mathbf{x}, \eta) = \mathbf{0}$ 的孤立奇异解.

例 4.1 考虑 $f = \{x_1^4 - x_2x_3x_4, x_2^4 - x_1x_3x_4, x_3^4 - x_1x_2x_4, x_4^4 - x_1x_2x_3\}$ 和 $\tilde{\xi} = (0.01, 0.01, 0.01, 0.01)$. 首先, 根据 (4.10) 构造带扰动的增广代数系统

$$\bar{g}'(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}) = \left\{ \begin{array}{l} f(\mathbf{x}) + I_{\{1,2,3,4\}}\mathbf{z}_1 + I_{\{1,2,3,4\}}\mathbf{x}_{\{1,2,3,4\}}\mathbf{z}_2 \\ D_{\mathbf{x}}\tilde{f}(\mathbf{x}, \mathbf{z})\mathbf{h}^{\{1,2,3,4\}} \\ D_{\mathbf{x}, \mathbf{y}_1, \mathbf{z}_1}\bar{g}(\mathbf{x}, \mathbf{y}_1, \mathbf{z})^{\{1,2,3,4\}}\mathbf{y}_2 + D_{\mathbf{x}, \mathbf{y}_1, \mathbf{z}_1}\bar{g}(\mathbf{x}, \mathbf{y}_1, \mathbf{z})\mathbf{h}^{\{1,2,3,4\}} \end{array} \right\} = \mathbf{0},$$

增广近似解 $(0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.0003, 0.0003, 0.0003, 0.0003, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0)$.

然后, 对 \bar{g}' 和 $(\tilde{\xi}, \tilde{\zeta}, \mathbf{0})$ 调用 INTLAB ^[45] 中的函数 verifynlss, 得到

$$\tilde{\xi} = (0, 0, 0, 0), \quad \tilde{\eta} = (0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0), \quad \mathbf{X} = [-10^{-321}, 10^{-321}]_{\times 4}, \quad \mathbf{Z} = [-10^{-321}, 10^{-321}]_{\times 8}.$$

最后, 根据上述定理可知, 存在唯一的 $\xi \in \tilde{\xi} + \mathbf{X}$ 和 $\eta \in \tilde{\eta} + \mathbf{Z}$, 使得 ξ 为扰动代数系统 $\tilde{f}(\mathbf{x}, \eta) = \mathbf{0}$ 的孤立奇异解, 其中

$$\tilde{f}(\mathbf{x}, \eta) = \left\{ \begin{array}{l} x_1^4 - x_2x_3x_4 + \eta_1 + \eta_5x_1 \\ x_2^4 - x_1x_3x_4 + \eta_2 + \eta_6x_2 \\ x_3^4 - x_1x_2x_4 + \eta_3 + \eta_7x_3 \\ x_4^4 - x_1x_2x_3 + \eta_4 + \eta_8x_4 \end{array} \right\},$$

且满足 $\|\tilde{\xi} - \xi\|_{\infty} \leq 10^{-321}$ 和 $\|\tilde{f} - f\|_{\infty} = \|\tilde{\eta} - \eta\|_{\infty} \leq 10^{-321}$.

4.1.2 针对特例 $\kappa = 1$ 的孤立奇异解验证

因带扰动的收缩方法 (4.10) 的递归次数至多为 ρ 次, 其矩阵规模的上界为 $2^{\rho}n \times 2^{\rho}n$, 且对于特例 $\kappa = 1$ 总是达到最差情形. 事实上, 用一组约化基的参数化表示 (2.8), 可构造规模更小的带扰动的增广代数系统.

不妨设 $\mathbf{k} = \mathbf{c} = \{1\}$, 记 \mathbf{e}_1 为单位矩阵 I_n 的第一列, 则

$$\bar{g}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}) = \left\{ \begin{array}{l} f(\mathbf{x}) + \mathbf{e}_1z_1 + \sum_{i=1}^{\rho-1} \mathbf{e}_1x_1^i z_{i+1} \\ \Lambda_1(\mathbf{y}_1)(\tilde{f}(\mathbf{x}, \mathbf{z})) \\ \vdots \\ \Lambda_{\rho}(\mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_{\rho})(\tilde{f}(\mathbf{x}, \mathbf{z})) \end{array} \right\} = \mathbf{0} \tag{4.12}$$

有非奇异解 $(\xi, \zeta, \mathbf{0})$, 其中 $\zeta = (\zeta_1, \dots, \zeta_{\rho})$, ζ_i 为 Λ_i 中新增的 $n - 1$ 个参数的值. 显然, $\bar{g}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z})$ 恰定, 即方程个数 $(\rho + 1)n$ 等于变元个数 $n[\mathbf{x}] + \rho(n - 1)[\mathbf{y}] + \rho[\mathbf{z}]$. 对于近似奇异解 $\tilde{\xi}, \tilde{\zeta}$ 可由递归地解 ρ 个最小二乘问题 (2.9) 得到.

定理 4.5 ^[20] 若 $(\mathbf{X}, \mathbf{Y}, \mathbf{Z})$ 满足 $\mathbf{0} \in (\mathbf{X}, \mathbf{Y}, \mathbf{Z})$, M 满足 $D\bar{g}((\tilde{\xi}, \tilde{\zeta}, \mathbf{0}) + (\mathbf{X}, \mathbf{Y}, \mathbf{Z})) \subseteq M$, 且 (4.3) 成立, 则存在唯一的 $\xi \in \tilde{\xi} + \mathbf{X}$ 和 $\eta \in \tilde{\eta} + \mathbf{Z}$ 使得 ξ 为扰动代数系统 $\tilde{f}(\mathbf{x}, \eta) = \mathbf{0}$ 的孤立奇异解, 并且存在唯一的 $\zeta \in \tilde{\zeta} + \mathbf{Y}$ 使得 $\{1, \Lambda_1(\zeta_1), \dots, \Lambda_{\rho}(\zeta_1, \dots, \zeta_{\rho})\}$ 为 $\mathcal{D}_{\xi}(I_{\tilde{f}})$ 的一组既约基.

例 3.1 续 首先, 根据 (4.12) 构造带扰动的增广代数系统

$$\bar{g}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}) = \begin{cases} x_1^2 + x_2 - 3 + z_1 + z_2 x_1 \\ x_1 + 0.125x_2^2 - 1.5 \\ 2x_1 + y_1 + z_2 \\ 1 + 0.25y_1 x_2 \\ 1 + y_2 \\ 0.125y_1^2 + 0.25y_2 x_2 \end{cases} = \mathbf{0}$$

和增广近似解 (0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.0003, 0.0003, 0.0003, 0.0003, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0).

然后, 对 \bar{g} 和 $(\tilde{\xi}, \tilde{\zeta}, \mathbf{0})$ 调用 INTLAB 中的函数 `verifynlss`, 得到

$$\begin{aligned} \tilde{\xi} &= (1, 2), \quad \tilde{\zeta} = (-2, -1), \quad \tilde{\eta} = (0, 0), \\ \mathbf{X} &= [-10^{-14}, 10^{-14}]_{\times 2}, \quad \mathbf{Y} = [-10^{-14}, 10^{-14}]_{\times 2}, \quad \mathbf{Z} = [-10^{-14}, 10^{-14}]_{\times 2}. \end{aligned}$$

最后, 根据上述定理可知, 存在唯一的 $\xi \in \tilde{\xi} + \mathbf{X}$ 和 $\eta \in \tilde{\eta} + \mathbf{Z}$, 使得 ξ 为扰动代数系统 $\tilde{f}(\mathbf{x}, \eta) = \mathbf{0}$ 的孤立奇异解, 其中

$$\tilde{f}(\mathbf{x}, \eta) = \{x_1^2 + x_2 - 3 + \eta_1 + \eta_2 x_1, x_1 + 0.125x_2^2 - 1.5\},$$

且满足 $\|\tilde{\xi} - \xi\|_{\infty} \leq 10^{-14}$ 和 $\|\tilde{f} - f\|_{\infty} = \|\tilde{\eta} - \eta\|_{\infty} \leq 10^{-14}$.

另外, $\mathcal{D}_{\xi}(I_{\tilde{f}})$ 有一组既约基 $\mathcal{D}_{\xi}(I_{\tilde{f}}) = \text{Span}_{\mathbb{C}}\{1, d_1 + \zeta_1 d_2, d_1^2 + \zeta_1 d_1 d_2 + \zeta_1^2 d_2^2 + \zeta_2 d_2\}$, 且满足 $\|\tilde{\zeta} - \zeta\|_{\infty} \leq 10^{-14}$.

4.2 验证代数系统的一簇解

对于代数系统 $f(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ 的近似奇异解 $\tilde{\xi}$, 我们验证了某个扰动代数系统 $\tilde{f}(\mathbf{x}, \eta) = \mathbf{0}$ 在系数扰动误差 $\eta \in \mathbf{Z}$ 内存在唯一的孤立奇异解 $\xi \in \tilde{\xi} + \mathbf{X}$. 下述定理证明了, 如果存在 $r > 0$ 使得二者的残差值在球面 $\partial B(\tilde{\xi}, r)$ 上恒小于扰动代数系统的值, 则 $f(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ 与 $\tilde{f}(\mathbf{x}, \eta) = \mathbf{0}$ 在球体 $B(\tilde{\xi}, r)$ 内拥有相同个数的解, 即验证了代数系统 $f(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ 在 $B(\tilde{\xi}, r)$ 内的一簇解, 其重数之和等于 ξ 的重数.

定理 4.6 ^[46] 如果 f 和 \tilde{f} 满足在 $B(\tilde{\xi}, r)$ 内和 $\partial B(\tilde{\xi}, r)$ 上解析, 且

$$\|\tilde{f}(\zeta) - f(\zeta)\| < \|\tilde{f}(\zeta)\|, \quad \forall \zeta \in \partial B(\tilde{\xi}, r) \quad (4.13)$$

成立, 则 $f(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ 和 $\tilde{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ 在 $B(\tilde{\xi}, r)$ 内解的个数相同 (重数计算在内).

例如, 方程 $z^5 + 3z^3 + 7 = 0$ 在圆盘 $|z| < 2$ 内恰有 5 个根, 因为对任何 $|z| = 2$ 有 $|3z^3 + 7| < 32 = |z^5|$.

本小节将针对两种特例: $\kappa = 1$ 和单次收缩即终止, 阐述如何计算孤立奇异解的局部隔离界来得到代数系统值的下界, 进而验证满足 (4.2) 的一簇解.

4.2.1 针对特例 $\kappa = 1$ 的一簇解验证

对于代数方程组 $f(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ 的孤立奇异解 ξ , 定义满足 $\kappa = 1$ 的 Jacobi 矩阵 $Df(\xi)$ 的标准型.

定义 4.1 (Jacobi 矩阵标准型) 称 $Df(\xi)$ 具有标准型, 如果

$$Df(\xi) = \begin{pmatrix} 0 & Df(\xi)^{c,k} \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.14)$$

其中 $c = \{1\}$, $k = \{n\}$, $Df(\xi)^{c,k}$ 是 $Df(\xi)$ 中去掉指标为 c 的列和指标为 k 的行组成的矩阵.

事实上, 对于特例 $\kappa = 1$, 存在酉矩阵 U 和 W 使得代数方程组 $U^*f(W\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ 在其孤立奇异解 $W^*\xi$ 处的 Jacobi 矩阵为标准型. 因此, 总可假设 $Df(\xi)$ 为标准型. 此时, 根据 (2.7) 和 (2.8) 构造的一组约化基满足

$$\Lambda_t(f) = \mathbf{0} \Leftrightarrow \Delta_t(f_n) = 0. \quad (4.15)$$

下述定理证明了 ξ 可作为 $f(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ 的孤立奇异解被局部隔离.

定理 4.7 [47] 设 ξ 为 $f(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ 的满足 $\kappa = 1$ 且 $Df(\xi)$ 为标准型的孤立奇异解, 记 ζ 是另一个解, 则

$$\|\zeta - \xi\| \geq \frac{d}{2\gamma_\mu^\mu}, \quad (4.16)$$

其中

$$d = \min(d_1, d_2, d_3), \quad d_1 = \sqrt{\frac{1}{c_{\mu-1,1}^2 + 1}}, \quad d_2 = \sqrt{\frac{1}{\mu-1}},$$

d_3 是单变元方程

$$(1-d^2)^{\frac{\mu}{2}} - \sum_{i+j=\mu, j>0} c_{i,j} d(1-d^2)^{\frac{j}{2}} d^{j-1} - d \left(\sum_{1 \leq i \leq \mu-2} t_{i,0} + \sum_{1 \leq i+j \leq \mu-2, j>0} t_{i,j} (1-d^2)^{\frac{j}{2}} d^j + 1 \right) = 0$$

的最小正根; $c_{i,j} = c_{i,j}^{(\mu)}$ ($i+j = \mu, j > 0$) 和 $t_{i,j-1} = c_{i,j}^{(i+j)}$ ($2 \leq i+j \leq \mu-1$) 是满足如下递归公式:

$$\begin{aligned} c_{i,j}^{(2)} &= \frac{(i+j)!}{i!j!} \quad (i+j = 2, \quad j \geq 1), \\ c_{i,j}^{(i+j)} &= \frac{(i+j)!}{i!j!} + \sum_{\substack{2 \leq p+q \leq i+j-1, q \geq 1 \\ p+k=i, q+l-1=j}} c_{p,q}^{(p+q)} \cdot \frac{(k+l)!}{k!l!} \quad (2 < i+j \leq \mu, \quad j \geq 1) \end{aligned} \quad (4.17)$$

的常数; 常数 $\gamma_\mu := \max(\hat{\gamma}_\mu(f, \xi), \gamma_{\mu,n}(f, \xi))$,

$$\begin{aligned} \hat{\gamma}_\mu(f, \xi) &= \max \left(1, \sup_{k \geq 2} \left\| (Df(\xi)^{c,k})^{-1} \cdot \frac{D^k f^k(\xi)}{k!} \right\|^{\frac{1}{k-1}} \right), \\ \gamma_{\mu,n}(f, \xi) &= \max \left(1, \sup_{k \geq 2} \left\| \frac{1}{\Delta_\mu(f_n)} \cdot \frac{D^k f_n(\xi)}{k!} \right\|^{\frac{1}{k-1}} \right). \end{aligned}$$

下述定理进一步证明了 $\|f(\mathbf{x})\|$ 在以 ξ 为球心、半径为局部隔离界的一半的球 $B(\xi, \frac{d}{4\gamma_\mu})$ 内有下界.

定理 4.8 [47] 设 $\mathbf{x} \in B(\xi, \frac{d}{4\gamma_\mu})$, 则

$$\|f(\mathbf{x})\| \geq \frac{d\|\mathbf{x} - \xi\|^\mu}{2\|A_\mu^{-1}\|},$$

其中

$$A_\mu^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} (Df(\xi)^{c,k})^{-1} & 0 \\ 0 & \frac{\sqrt{2}}{\Delta_\mu(f_n)} \end{pmatrix}. \quad (4.18)$$

对于近似奇异解 $\tilde{\xi}$, 存在酉矩阵 \tilde{U} 和 \tilde{W} 使得代数方程组 $\tilde{U}^* f(\tilde{W}\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ 在其近似奇异解 $W^*\xi$ 处的 Jacobi 矩阵为近似标准型, 即第一列和第一行中的元素近似为 0. 因此, 总可假设 $Df(\tilde{\xi})$ 为近似标准型. 此时, 其近似局部对偶空间 $\mathcal{D}_{\tilde{\xi}}(I_f)$ 的一组约化基可由递归地求解线性方程组

$$Df(\tilde{\xi})^{c,k} \text{vec}(c_{t,2}, \dots, c_{t,n}) + \tilde{\Delta}_t(f) = \mathbf{0} \quad (\tilde{\Delta}_1 = d_1, \quad \tilde{\Delta}_2 = d_1^2) \quad (4.19)$$

得到, 直至对于某个 t , $|\tilde{\Delta}_t(f_n)|$ 大于预设阈值 $\epsilon > 0$.

考虑扰动代数系统

$$\tilde{f}(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}) - f(\tilde{\xi}) - d_1(f)(x_1 - \tilde{\xi}_1) - \sum_{i=2}^n d_i(f_n) \mathbf{e}_n(x_i - \tilde{\xi}_i) - \sum_{t=2}^\rho \tilde{\Delta}_t(f_n) \mathbf{e}_n(x_1 - \tilde{\xi}_1)^t = \mathbf{0}, \quad (4.20)$$

其中 $\tilde{\eta} = (c_{2,2}, \dots, c_{2,n}, \dots, c_{\rho,2}, \dots, c_{\rho,n})$. 由 (4.15)、(4.19) 和 (4.20) 可知, 代数系统 $f(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ 的近似奇异解 $\tilde{\xi}$ 是扰动代数系统 $\tilde{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ 的满足 $\kappa = 1$ 且 $D\tilde{f}(\tilde{\xi})$ 为标准型的孤立奇异解, 因为 $\tilde{\Delta}_t(f) = 0$ ($t = 1, \dots, \rho$), 且其重数为 $\mu = \rho + 1$.

定理 4.9 ^[47] 记 $\tilde{\gamma}_\mu := \max(\hat{\gamma}_\mu(\tilde{f}, \tilde{\xi}), \gamma_{\mu,n}(\tilde{f}, \tilde{\xi}))$, 若

$$\|f(\tilde{\xi})\| + \sum_{1 \leq t \leq \mu-1} \|H_t\| \left(\frac{d}{4\tilde{\gamma}_\mu^\mu} \right)^t < \frac{d^{\mu+1}}{2(4\tilde{\gamma}_\mu^\mu)^\mu \|A_\mu^{-1}\|}, \quad (4.21)$$

则 $f(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ 和 $\tilde{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ 在 $B(\tilde{\xi}, \frac{d}{4\tilde{\gamma}_\mu^\mu})$ 内解的个数相同 (重数计算在内), 即有重数之和等于 μ 的一簇解, 其中

$$H_1 = \begin{pmatrix} d_1(f^k) & 0 \\ d_1(f_n) & d^c(f_n) \end{pmatrix} \quad (f^k = \{f_1, \dots, f_{n-1}\}, \quad d^c = \{d_2, \dots, d_n\}),$$

$$H_t = \left(\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \Delta_t(f_n) & 0 \end{pmatrix} \mathbf{0}_{\underbrace{n \times \dots \times n}_{k} \times (n-1)} \right) \in \mathbb{C}^{\underbrace{n \times \dots \times n}_{k+1}}, \quad 2 \leq t \leq \mu - 1. \quad (4.22)$$

例 3.1 续 设高精度近似解 $\tilde{\xi} \approx (1 + 10^{-18}, 2 - 10^{-18})$, 由 $Df(\tilde{\xi})$ 的奇异值分解构造酉矩阵

$$\tilde{U} \approx \begin{bmatrix} -0.8944 & -0.4472 \\ -0.4472 & 0.8944 \end{bmatrix}, \quad \tilde{W} \approx \begin{bmatrix} 0.4472 & 0.8944 \\ -0.8944 & 0.4472 \end{bmatrix},$$

进而得到酉变换后的代数系统

$$\tilde{U}^* f(\tilde{W}\mathbf{x}) = \left\{ \begin{array}{l} 0.2236x_1^2 + 0.6708x_1x_2 + 0.7267x_2^2 - 0.6x_1 + 0.8x_2 - 3.3541 \\ -2.5 \times 10^{-19}x_1^2 + 0.4472x_1x_2 + 0.3354x_2^2 - 0.8x_1 - 0.6x_2 + 1.2 \times 10^{-18} \end{array} \right\}$$

和高精度近似解 $W^*\tilde{\xi} \approx (-1.3416, 1.7889)$. 记 $f(\mathbf{x}) = \tilde{U}^* f(\tilde{W}\mathbf{x})$, $\tilde{\xi} = W^*\xi$. 不难验证,

$$Df(\tilde{\xi}) = \begin{bmatrix} -1.3 \times 10^{-19} & 2.5 + 1.2 \times 10^{-18} \\ 1.6 \times 10^{-19} & -1.0 \times 10^{-20} \end{bmatrix}$$

为近似标准型, 且 $|\tilde{\Delta}_2(f_2)| = |d_1^2(f_2)| \approx 2.53 \times 10^{-19}$, $|\tilde{\Delta}_3(f_2)| \approx |d_1^3(f_2) - 0.08944d_1d_2(f_2)| \approx 0.04$.

构造扰动代数系统

$$\tilde{f}(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}) - f(\tilde{\xi}) - \begin{pmatrix} d_1(f_1)(x_1 - \tilde{\xi}_1) \\ d_1(f_2)(x_1 - \tilde{\xi}_1) \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 \\ d_2(f_2)(x_2 - \tilde{\xi}_2) \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 \\ \tilde{\Delta}_2(f_2)(x_1 - \tilde{\xi}_1)^2 \end{pmatrix}.$$

不难验证, $\tilde{\xi}$ 是 $\tilde{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ 的满足 $\kappa = 1$ 且 $D\tilde{f}(\tilde{\xi})$ 为标准型的孤立奇异解, 其重数 $\mu = 3$.

计算常数 $d \approx 0.08507$ 为单变元方程

$$(1 - 2d - 8d^2)\sqrt{1 - d^2} - 9d - d^2 + 6d^3 = 0$$

的最小正根; 常数

$$\begin{aligned} \hat{\gamma}_3(\tilde{f}, \tilde{\xi}) &= \max\left(1, \left\|0.4 \cdot \frac{D^2\tilde{f}_1(\tilde{\xi})}{2}\right\|\right) = 1, \\ \gamma_{3,2}(\tilde{f}, \tilde{\xi}) &= \max\left(1, \left\|25 \cdot \frac{D^2\tilde{f}_2(\tilde{\xi})}{2}\right\|\right) \approx 11.1803, \end{aligned}$$

则 $\tilde{\gamma}_3 = \max(\hat{\gamma}_3(\tilde{f}, \tilde{\xi}), \gamma_{3,2}(\tilde{f}, \tilde{\xi})) \approx 11.1803$, 矩阵

$$A_\mu^{-1} \approx \begin{pmatrix} 0.2828 & 0 \\ 0 & 35.3607 \end{pmatrix}.$$

最终, 验证判别式 (4.21):

$$1.1045 \times 10^{-18} \approx \|f(\tilde{\xi})\| + \|H_1\| \frac{d}{4\gamma_3^3} + \|H_2\| \frac{d^2}{16\gamma_3^6} < \frac{d^4}{128\gamma_3^9 \|A_\mu^{-1}\|} \approx 4.2397 \times 10^{-18}$$

成立, 则 $f(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ 在 $B(\tilde{\xi}, 0.00001522)$ 内有一簇解, 其重数之和为 3. 因酉变换保持 Euclid 距离不改变, 故验证了 $f(\mathbf{x}) = \{x_1^2 + x_2 - 3, x_1 + \frac{1}{8}x_2^2 - \frac{3}{2}\} = \mathbf{0}$ 在 $B(\tilde{\xi}, 0.00001522)$ ($\tilde{\xi} \approx (1 + 10^{-18}, 2 - 10^{-18})$) 内有一簇解, 其重数之和为 3.

4.2.2 特例: 单次收缩即终止

考虑孤立奇异解的另一特例—基于去奇异化的收缩方法单次即终止, 即单次收缩后的增广代数系统在增广解处的 Jacobi 矩阵 $Dg(\xi, \zeta, \mathbf{0})$ 可逆. 针对单次收缩即终止的近似奇异解, 我们也可通过计算它的局部隔离界来得到代数系统值的下界, 进而验证满足 (4.2) 的一簇解.

定理 4.10 [48] 设 ξ 为 $f(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ 的孤立奇异解, $\{v_1, \dots, v_\kappa\}$ 为 $\text{null}(Df(\xi))$ 的一组正交基且满足

$$A_\kappa = Df(x) + \sum_{i=1}^{\kappa} \frac{D^2 f(\xi)}{2} (v_i, \Pi_{v_i} \cdot)$$

可逆, 其中 Π_{v_i} 为向 $\text{Span}_{\mathbb{C}}\{v_i\}$ 的 Hermite 投影算子. 记 ζ 是另一个解, 则

$$\|\zeta - \xi\| \geq \frac{d}{2\gamma_\kappa^2}, \quad (4.23)$$

其中常数 d 是单变元方程 $\sqrt{1 - d^2} - (\kappa + 1)\kappa d\sqrt{1 - d^2} - \kappa d^2 - d = 0$ 的最小正根, 常数

$$\gamma_\kappa = \max\left\{1, \sup_{k \geq 2} \left\|A_\kappa^{-1} \frac{D^k f(\xi)}{k!}\right\|^{\frac{1}{k-1}}\right\}.$$

定理 4.11 ^[48] 设 $\boldsymbol{x} \in B(\xi, \frac{d}{4\tilde{\gamma}_\kappa^2})$, 则

$$\|f(\boldsymbol{x})\| \geq \frac{d\|\boldsymbol{x} - \xi\|^2}{2\|A_\kappa^{-1}\|}.$$

对于近似奇异解 $\tilde{\xi}$, 设 $\{v_1, \dots, v_\kappa\}$ 为近似零空间 $\text{null}(Df(\tilde{\xi}))$ 的一组正交基且满足

$$\begin{aligned} \text{rank } Df(\tilde{\xi})|_{\text{Span}_{\mathbb{C}}\{v_1, \dots, v_\kappa\}^\perp} &= n - \kappa, \\ D^2f(\tilde{\xi})(v_i, v_i) &\notin \text{im}Df(\tilde{\xi})|_{\text{Span}_{\mathbb{C}}\{v_1, \dots, v_\kappa\}^\perp}, \quad \text{对任意 } i = 1, \dots, \kappa \text{ 成立.} \end{aligned} \quad (4.24)$$

考虑扰动代数系统

$$\tilde{f}(\boldsymbol{x}) = f(\boldsymbol{x}) - f(\tilde{\xi}) - H(\boldsymbol{x} - \tilde{\xi}), \quad (4.25)$$

其中 H 满足

$$Hv_i = Df(\tilde{\xi})v_i \quad \text{且} \quad H\zeta = 0, \quad \text{若 } \zeta \in \text{Span}_{\mathbb{C}}\{v_1, \dots, v_\kappa\}^\perp. \quad (4.26)$$

由 (4.24)–(4.26) 可知, 代数系统 $f(\boldsymbol{x}) = \mathbf{0}$ 的近似奇异解 $\tilde{\xi}$ 是扰动代数系统 $\tilde{f}(\boldsymbol{x}) = \mathbf{0}$ 的孤立奇异解, 且满足 $D\tilde{f}(\tilde{\xi})v_i = 0$ ($i = 1, \dots, \kappa$),

$$\tilde{A}_\kappa = A_\kappa - H = D\tilde{f}(\tilde{\xi}) + \sum_{i=1}^{\kappa} \frac{D^2\tilde{f}(\tilde{\xi})}{2}(v_i, \Pi_{v_i} \cdot)$$

可逆.

定理 4.12 ^[48] 记 $\tilde{\gamma}_\kappa = \max\{1, \sup_{k \geq 2} \|(A_\kappa - H)^{-1} \frac{D^k f(\tilde{\xi})}{k!}\|^{1/k}\}$, 若

$$\|f(\tilde{\xi})\| + \|H\| \frac{d}{4\tilde{\gamma}_\kappa^2} < \frac{d^3}{32\tilde{\gamma}_\kappa^4 \|(A_\kappa - H)^{-1}\|}, \quad (4.27)$$

则 $f(\boldsymbol{x}) = \mathbf{0}$ 和 $\tilde{f}(\boldsymbol{x}) = \mathbf{0}$ 在 $B(\tilde{\xi}, \frac{d}{4\tilde{\gamma}_\kappa^2})$ 内解的个数相同 (重数计算在内), 即有重数的和大于或等于 2^κ 的一簇解 (参见文献 [48, 定理 3.2]).

例 4.2 考虑 $f = \{x_1^3 - 3x_1^2x_2 + 3x_1x_2^2 - x_2^3 - x_3^2, x_2^3 - 3x_2^2x_3 + 3x_2x_3^2 - x_3^3 - x_1^2, x_3^3 - 3x_1x_3^2 + 3x_1^2x_3 - x_1^3 - x_2^2\}$ 和 $\tilde{\xi} = (-7.5 \cdot 10^{-20} - 2.7 \cdot 10^{-20}i, -7.5 \cdot 10^{-20} - 2.7 \cdot 10^{-20}i, -7.5 \cdot 10^{-20} - 2.7 \cdot 10^{-20}i)$.

设 $\{v_1, v_2, v_3\} = \{(1, 0, 0)^T, (0, 1, 0)^T, (0, 0, 1)^T\}$ 为近似零空间 $\text{null}(Df(\tilde{\xi}))$ 的一组正交基, 易验证其满足 (4.24).

构造扰动代数系统 $\tilde{f}(\boldsymbol{x}) = f(\boldsymbol{x}) - f(\tilde{\xi}) - Df(\tilde{\xi})(\boldsymbol{x} - \tilde{\xi})$. 不难验证, $\tilde{\xi}$ 是 $\tilde{f}(\boldsymbol{x}) = \mathbf{0}$ 的孤立奇异解, 且满足 $D\tilde{f}(\tilde{\xi})v_i = 0$ ($i = 1, 2, 3$),

$$\tilde{A}_\kappa = A_\kappa - H = \sum_{i=1}^{\kappa} \frac{D^2\tilde{f}(\tilde{\xi})}{2}(v_i, \Pi_{v_i} \cdot) \approx \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

可逆.

计算常数 $d \approx 0.07594$ 为单变元方程

$$\sqrt{1-d^2} - 12d\sqrt{1-d^2} - 3d^2 - d = 0$$

的最小正根, 常数

$$\tilde{\gamma}_3 = \max \left\{ 1, \sup_{k \geq 2} \left\| (A_\kappa - H)^{-1} \frac{D^k f(\tilde{\xi})}{k!} \right\|^{\frac{1}{k-1}} \right\} \leq 11.25.$$

最终, 验证判别式 (4.27):

$$\|f(\tilde{\xi})\| + \|H\| \frac{d}{4\tilde{\gamma}_3^2} \leq 4.3 \times 10^{-21} < 3.4 \times 10^{-9} \leq \frac{d^3}{32\tilde{\gamma}_3^4 \|(A_\kappa - H)^{-1}\|}$$

成立, 则 $f(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ 在 $B(\tilde{\xi}, 0.00015)$ 内有一簇解, 其中

$$\tilde{\xi} = (-7.5 \cdot 10^{-20} - 2.7 \cdot 10^{-20}i, -7.5 \cdot 10^{-20} - 2.7 \cdot 10^{-20}i, -7.5 \cdot 10^{-20} - 2.7 \cdot 10^{-20}i),$$

其重数的和大于或等于 8.

4.3 小结

本节综述了两种良态化的近似奇异解验证方法: 验证扰动系统的孤立解和验证代数系统的一簇解的存在性. 其他符号数值方法也致力于解决近似奇异解的验证问题. 例如, Kanzawa 和 Oishi^[49] 基于 Yamamoto^[15] 的恰定增广系统, 提出了一种验证非线性系统“非完美奇异解”的数值方法. 针对简单 2 重根情形, Rump 和 Graillat^[50] 提出了一种可信误差界的计算方法, 使得构造的扰动非线性系统在误差界内存在唯一的孤立奇异解. 正是受该方法启发, 我们将扰动系统孤立解的验证方法 (4.1) 推广至任意重根情形 (参见文献 [20, 44]). Li 和 Sang^[51] 提出了基于增广系统的方法验证奇异解的可信误差界.

Dedieu 和 Shub^[52] 将 Smale 的阿尔法理论^[6, 7, 53-56] 推广至简单 2 重根情形. 首先, 他们给出了简单 2 重根的局部隔离界; 其次, 他们提出了一个基于 Rouché 定理的判定条件, 使得满足条件的近似奇异解在某邻域内存在重数的和等于 2 的一簇解. 正是受该方法启发, 我们将代数系统一簇解的验证方法 (4.2) 推广至 $\kappa = 1$ 和单次收缩即终止的两种特例情形 (参见文献 [47, 48]). 另外, Yakoubsohn^[57] 将阿尔法理论推广至单变元多项式方程的重根情形, 并给出了验证其一簇解的计算方法 (参见文献 [58]). 之后, Giusti 等将这种方法推广至单变元解析方程情形^[59] 和嵌入维数等于 1 的多变元恰定解析方程组情形^[60].

Li^[61] 给出了基于非标准分析的孤立重根定义, 证明了其定义与本文定义 1.2 中的孤立重根重数的定义等价, 并且在 Van der Waerden 的定义有意义时, 证明了其定义与前面两个定义一致. 他还将里特 - 吴方法应用于求解从原方程得到的含无穷小参数的代数方程, 得到原方程的孤立解的重数.

此外, Dian 和 Kearfott^[62]、Kearfott 和 Dian^[63] 和 Kearfott 等^[64] 提出了一种基于验证非零拓扑次数来验证非线性系统一簇解的计算方法. Cheng 等^[65] 提出了新的收缩方法来验证多项式系统奇异解的存在性.

5 总结与展望

本文结合作者和合作者的研究成果^[13, 20, 21, 44, 47, 48], 综述了符号数值方法在计算代数方程组孤立奇异解、特别是近似奇异解精化与验证方面的研究进展. Smale 关于解析系统非奇异解的阿尔法理论有着非常重要的理论和应用价值, 给出了量化的 Newton 迭代二次收敛的一般准则. 将阿尔法理论推广到解析系统的奇异解是我们目前正在努力解决的重要问题之一. 在一些特殊奇异解的情形, 例如, 奇

异解重数为 2 或 3, 我们已经取得了很好的结果. 当奇异解的重结构非常复杂时, 阿尔法理论的推广更具有挑战性. 另外, 基于区间计算的奇异解重结构的验证也是很重要的研究课题.

致谢 作者非常感谢张景中老师和杨路老师几十年来对符号计算和符号数值混合计算研究的大力支持. 两位前辈为中国和国际计算机数学的发展作出了非常重要的贡献, 他们的开拓创新精神也激励着我们更加努力地工作, 去挑战更多的计算机数学问题. 作者也十分感谢郝志伟博士和姜文嵘硕士在推广 Smale 理论方面的合作, 以及审稿人提出的宝贵意见和建议.

参考文献

- 1 Sturmfels B. Solving Systems of Polynomial Equations. CBMS Regional Conference Series in Mathematics, Number 97. Providence: Amer Math Soc, 2002
- 2 Gao X S, Lei D, Liao Q, et al. Generalized Stewart-Gough platforms and their direct kinematics. *IEEE Trans Robot*, 2005, 21: 141–151
- 3 Gao X S, Hou X R, Tang J, et al. Complete solution classification for the perspective-three-point problem. *IEEE Trans Pattern Anal Mach Intell*, 2003, 25: 930–943
- 4 Davliakos I, Papadopoulos E. Model-based control of a 6-dof electrohydraulic Stewart-Gough platform. *Mech Mach Theory*, 2008, 43: 1385–1400
- 5 Urban S, Leitloff J, Hinz S. MLPNP—a real-time maximum likelihood solution to the perspective- n -point problem. *ISPRS Ann Photogramm Remote Sens Spatial Inf Sci*, 2016, 3: 131–138
- 6 Smale S. Newton's method estimates from data at one point. In: *The Merging of Disciplines: New Directions in Pure, Applied and Computational Mathematics*. New York: Springer, 1986, 185–196
- 7 Blum L, Cucker F, Shub M, et al. *Complexity and Real Computation*. Secaucus: Springer-Verlag, 1998
- 8 Dayton B, Li T, Zeng Z. Multiple zeros of nonlinear systems. *Math Comp*, 2011, 80: 2143–2168
- 9 Macaulay F. *The Algebraic Theory of Modular Systems*, vol. 19. Cambridge: Cambridge University Press, 1916
- 10 Marinari M, Mora T, Möller H. Gröbner bases of ideals defined by functionals with an application to ideals of projective points. *Appl Algebra Engrg Comm Comput*, 1993, 4: 103–145
- 11 Mourrain B. Isolated points, duality and residues. *J Pure Appl Algebra*, 1997, 117–118: 469–493
- 12 Hao W, Sommese A J, Zeng Z. Algorithm 931: An algorithm and software for computing multiplicity structures at zeros of nonlinear systems. *ACM Trans Math Software*, 2013, 40: 5
- 13 Li N, Zhi L. Computing the multiplicity structure of an isolated singular solution: Case of breadth one. *J Symbolic Comput*, 2012, 47: 700–710
- 14 Ojika T, Watanabe S, Mitsui T. Deflation algorithm for the multiple roots of a system of nonlinear equations. *J Math Anal Appl*, 1983, 96: 463–479
- 15 Yamamoto N. Regularization of solutions of nonlinear equations with singular Jacobian matrices. *J Inform Process*, 1984, 7: 16–21
- 16 Ojika T. Modified deflation algorithm for the solution of singular problems. I. A system of nonlinear algebraic equations. *J Math Anal Appl*, 1987, 123: 199–221
- 17 Leykin A, Verschelde J, Zhao A. Newton's method with deflation for isolated singularities of polynomial systems. *Theoret Comput Sci*, 2006, 359: 111–122
- 18 Leykin A, Verschelde J, Zhao A. Higher-order deflation for polynomial systems with isolated singular solutions. In: *Algorithms in Algebraic Geometry. The IMA Volumes in Mathematics and Its Applications*, vol. 146. New York: Springer, 2008, 79–97
- 19 Dayton B, Zeng Z. Computing the multiplicity structure in solving polynomial systems. In: *Proceedings of the 2005 International Symposium on Symbolic and Algebraic Computation*. New York: Association for Computing Machinery, 2005, 116–123
- 20 Li N, Zhi L. Verified error bounds for isolated singular solutions of polynomial systems: Case of breadth one. *Theoret Comput Sci*, 2013, 479: 163–173
- 21 Li N, Zhi L. Computing isolated singular solutions of polynomial systems: Case of breadth one. *SIAM J Numer Anal*, 2012, 50: 354–372
- 22 Rall L B. Convergence of the Newton process to multiple solutions. *Numer Math*, 1966, 9: 23–37
- 23 Decker D W, Kelley C T. Newton's method at singular points. I. *SIAM J Numer Anal*, 1980, 17: 66–70
- 24 Decker D W, Kelley C T. Newton's method at singular points. II. *SIAM J Numer Anal*, 1980, 17: 465–471
- 25 Reddien G W. On Newton's method for singular problems. *SIAM J Numer Anal*, 1978, 15: 993–996
- 26 Reddien G W. Newton's method and high order singularities. *Comput Math Appl*, 1979, 5: 79–86

- 27 Decker D W, Kelley C T. Convergence acceleration for Newton's method at singular points. *SIAM J Numer Anal*, 1982, 19: 219–229
- 28 Griewank A, Osborne M R. Newton's method for singular problems when the dimension of the null space is > 1 . *SIAM J Numer Anal*, 1981, 18: 145–149
- 29 Griewank A. On solving nonlinear equations with simple singularities or nearly singular solutions. *SIAM Rev*, 1985, 27: 537–563
- 30 Shen Y Q, Ypma T J. Newton's method for singular nonlinear equations using approximate left and right nullspaces of the Jacobian. *Appl Numer Math*, 2005, 54: 256–265
- 31 Shen Y Q, Ypma T J. Solving rank-deficient separable nonlinear equations. *Appl Numer Math*, 2007, 57: 609–615
- 32 Leckerf G. Quadratic Newton iteration for systems with multiplicity. *Found Comput Math*, 2002, 2: 247–293
- 33 Mantzaflaris A, Mourrain B. Deflation and certified isolation of singular zeros of polynomial systems. In: *Proceedings of the 36th International Symposium on Symbolic and Algebraic Computation*. New York: Association for Computing Machinery, 2011, 249–256
- 34 Hauenstein J D, Mourrain B, Szanto A. Certifying isolated singular points and their multiplicity structure. In: *Proceedings of the 2015 ACM on International Symposium on Symbolic and Algebraic Computation*. New York: Association for Computing Machinery, 2015, 213–220
- 35 Hauenstein J D, Mourrain B, Szanto A. On deflation and multiplicity structure. *J Symbolic Comput*, 2017, 83: 228–253
- 36 Akoglu T A, Hauenstein J D, Szanto A. Certifying solutions to overdetermined and singular polynomial systems over \mathbb{Q} . *J Symbolic Comput*, 2018, 84: 147–171
- 37 Ji Z Y, Wu W Y, Feng Y. Computing singular solutions of a class of nonlinear equations and its applications. *J Comput Appl*, 2013, 33: 230–233 [季振义, 吴文渊, 冯勇. 一类非线性方程组奇异解的计算方法及其应用. *计算机应用*, 2013, 33: 230–233]
- 38 Ji Z, Wu W, Li Y, et al. Computing the singular solution of power flow system. *Appl Mech Mater*, 2013, 392: 660–664
- 39 Giusti M, Yakoubsohn J C. Numerical approximation of multiple isolated roots of analytic systems. arXiv:1707.06301, 2017
- 40 Krawczyk R. Newton-Algorithmen zur Bestimmung von Nullstellen mit Fehlerschranken. *Computing*, 1969, 4: 187–201
- 41 Moore R E. A test for existence of solutions to nonlinear systems. *SIAM J Numer Anal*, 1977, 14: 611–615
- 42 Rump S M. Solving algebraic problems with high accuracy. In: *A New Approach to Scientific Computation*. San Diego: Academic Press, 1983, 51–120
- 43 Yang Z, Zhi L, Zhu Y. Verified error bounds for real solutions of positive-dimensional polynomial systems. In: *Proceedings of the 38th International Symposium on Symbolic and Algebraic Computation*. New York: Association for Computing Machinery, 2013, 371–378
- 44 Li N, Zhi L. Verified error bounds for isolated singular solutions of polynomial systems. *SIAM J Numer Anal*, 2014, 52: 1623–1640
- 45 Rump S M. INTLAB-INTERVAL LABORATORY. In: *Developments in Reliable Computing*. Netherlands: Springer, 1999, 77–104
- 46 Berenstein C A, Vidras A, Gay R, et al. *Residue Currents and Bezout Identities*. Basel: Birkhäuser, 1993
- 47 Hao Z, Jiang W, Li N, et al. On isolation of simple multiple zeros and clusters of zeros of polynomial systems. *Math Comp*, 2020, 89: 879–909
- 48 Lee K, Li N, Zhi L. TEMPORARY REMOVAL: On isolation of singular zeros of multivariate analytic systems. *J Symbolic Comput*, 2020, doi: 10.1016/j.jsc.2020.01.002
- 49 Kanzawa Y, Oishi S. Imperfect singular solutions of nonlinear equations and a numerical method of proving their existence. *IEICE Trans Fundam Electronics Commun Computer Sci*, 1999, 82: 1062–1069
- 50 Rump S M, Graillat S. Verified error bounds for multiple roots of systems of nonlinear equations. *Numer Algorithms*, 2010, 54: 359–377
- 51 Li Z, Sang H. Verified error bounds for singular solutions of nonlinear systems. *Numer Algorithms*, 2015, 70: 309–331
- 52 Dedieu J P, Shub M. On simple double zeros and badly conditioned zeros of analytic functions of n variables. *Math Comp*, 2001, 70: 319–327
- 53 Shub M, Smale S. Complexity of Bezout's theorem IV: Probability of success; extensions. *SIAM J Numer Anal*, 1996, 33: 128–148
- 54 Shub M, Smale S. Computational complexity. On the geometry of polynomials and a theory of cost, I. *Ann Sci École Norm Sup (4)*, 1985, 18: 107–142
- 55 Shub M, Smale S. Computational complexity: On the geometry of polynomials and a theory of cost, II. *SIAM J Comput*, 1986, 15: 145–161
- 56 Smale S. The fundamental theorem of algebra and complexity theory. *Bull Amer Math Soc (NS)*, 1981, 4: 1–36

- 57 Yakoubsohn J C. Finding a cluster of zeros of univariate polynomials. *J Complexity*, 2000, 16: 603–638
- 58 Yakoubsohn J C. Simultaneous computation of all the zero-clusters of a univariate polynomial. In: *Foundations of Computational Mathematics*. Singapore: World Scientific, 2002, 433–455
- 59 Giusti M, Lecerf G, Salvy B, et al. On location and approximation of clusters of zeros of analytic functions. *Found Comput Math*, 2005, 5: 257–311
- 60 Giusti M, Lecerf G, Salvy B, et al. On location and approximation of clusters of zeros: Case of embedding dimension one. *Found Comput Math*, 2007, 7: 1–58
- 61 Li B. A method to solve algebraic equations up to multiplicities via Ritt-Wu. *Acta Anal Funct Appl*, 2003, 5: 97–109
- 62 Dian J, Kearfott R B. Existence verification for singular and nonsmooth zeros of real nonlinear systems. *Math Comp*, 2003, 72: 757–766
- 63 Kearfott R B, Dian J. Existence verification for higher degree singular zeros of nonlinear systems. *SIAM J Numer Anal*, 2003, 41: 2350–2373
- 64 Kearfott R B, Dian J, Neumaier A. Existence verification for singular zeros of complex nonlinear systems. *SIAM J Numer Anal*, 2000, 38: 360–379
- 65 Cheng J S, Dou X, Wen J. A new deflation method for verifying the isolated singular zeros of polynomial systems. *J Comput Appl Math*, 2020, 376: 112825

Symbolic-numeric methods on computing isolated singular solutions of algebraic systems

Nan Li & Lihong Zhi

Abstract Solving systems of algebraic equations is one of the most fundamental problems in computational algebraic geometry. It is ubiquitous and widely applied across the engineering and sciences, such as in robotics, computer vision, machine learning, artificial intelligence, cryptography, optimization, control theory and etc. One main challenge is to compute isolated singular solutions, which plays an important rule in geometric modelings. Based on recent research results of the authors and their collaborators, a survey for symbolic-numeric methods on computing isolated singular solutions of algebraic systems is conducted, especially for refining and certifying approximate solutions. Some directions for future studies on the topic are discussed as well.

Keywords system of algebraic equations, isolated singular solution, symbolic-numeric method, refining approximate solutions, certifying approximate solutions

MSC(2010) 65H10, 74G35, 68W30, 32S99

doi: 10.1360/SSM-2019-0289