УДК 518:512.25

АЛГОРИТМ ПРОДОЛЖЕНИЯ РЕШЕНИЯ ПО НЕВЯЗКЕ ДЛЯ ОТЫСКАНИЯ НАЧАЛЬНОГО ПРИБЛИЖЕНИЯ В МЕТОДЕ НЬЮТОНА

С.С.Волокитин, Б.А.Суслин

I. Для уточнения приближенного решения нелинейной системы численных уравнений

$$y(x) = 0, \tag{1}$$

где $x=(x_1,\dots,x_n)$, $y=(y_1,\dots,y_n)^T$, $y(x)\in C^{(2)}(G)$, $G\subseteq R^n$, часто используют быстросходящийся итерационный метод Ньютона

$$x^{(k+1)}=x^{(k)}-[y'(x^{(k)})]^{-1}y(x^{(k)}),\quad k=0,1,2,\dots \tag{2}$$

Достаточные условия сходимости этого процесса, полученные Л.В.Канторовичем, налагают известные ограничения на выбор начального приближения $x^{(0)}$, например [1, с.491]:

$$\det y'(x^{(0)})\neq 0,\ \max_{1\le i\le n}|y_i(x^{(0)})|\le 1/2B\,\|[y'(x^{(0)})]^{-1}\|^2 \tag{3}$$

при

$$\max_{1\le i\le n}\sum_{j=1}^{n}\sum_{s=1}^{n}\left|\frac{\partial^2 y_i(x)}{\partial x_j\,\partial x_s}\right|\le B,\ x^{(0)},x\in G\subseteq l_n^{\infty}. \tag{4}$$

Отыскание требуемого "хорошего" начального приближения представляет самостоятельную проблему. Для получения $x^{(0)}$ применяют различные методы спуска, а также иные процессы (см., например, [I–4]). Особый интерес представляют алгоритмы с единообразной вычислительной схемой, которые в определенных условиях сходятся фактически быстрее типичных методов спуска и при сходимости к простому решению x^* системы (I) после конечного числа шагов автоматически переходят в метод Ньютона, для которого будут выполнены условия вида (3). Ниже в случае вещественнозначных функций $y_i(x)$ предлагается один такой процесс с ускоренной сходимостью.

2. Положим $Q_k=2B\|[y'(x^{(k)})]^{-1}\|^2$, $1\le g_0\le 4-\delta\ (\delta>0)$,

$$g_k=\max\{1,\min[g_{k-1}-\delta, Q_k\|y(x^{(k)})\|]\},\ k\ge 1,$$

и рассмотрим алгоритм, использующий информацию о проверке условий (3):

$$x^{(k+1)}=x^{(k)}-[y'(x^{(k)})]^{-1}\varepsilon^{(k)},\ k=0,1,2,\dots, \tag{5}$$

где

$$\varepsilon^{(k)}=(\varepsilon_1^{(k)},\dots,\varepsilon_n^{(k)})^T,\ |\varepsilon_i^{(k)}|=\min(|y_i(x^{(k)})|, g_k/Q_k), \tag{6}$$

$$\operatorname{sign}\varepsilon_i^{(k)}=\operatorname{sign}y_i(x^{(k)})\quad \forall i\in J=\{1,2,\dots,n\}. \tag{7}$$

Предполагаем, что область G, в которой получена константа B, выпукла, замкнута и достаточно велика, так что содержит все приближения процесса (5)-(7) (см. п.3). Обозначим

$$d_{ik}=|y_i(x^{(k)})|-g_k/Q_k.$$

Заметим, что в известную общую схему (5) укладываются и многие другие модификации метода Ньютона, отличающиеся способом выбора вектора $\varepsilon^{(k)}$.

Алгоритм (5)-(7) имеет прозрачный геометрический смысл, поскольку при фиксированном k определяет итерацию метода Ньютона из точки $x^{(k)}$ для системы

$$\psi(x)\equiv y(x)-[y(x^{(k)})-\varepsilon^{(k)}]=0. \tag{8}$$

Основной результат работы определяет следующую связь между решением систем (8) и (I), вытекающую далее из теорем I и 2: если в области G матрица Якоби неособенная, то решение (I) является пределом конечной последовательности решений систем (8), отличных от (I).

ЛЕММА I. Если $\det y'(x^{(\bar{k})})\ne 0,\ g_{\bar{k}}<2$, то

$$\det y'(x^{(k)})\ne 0\quad \forall k\ge\bar{k}\ge 0 \tag{9}$$

и при $g_{\hat{k}}=1\ (\hat{k}\ge\bar{k})$ $\forall k\ge\hat{k}$ выполняются условия сходимости метода Ньютона из точки $x^{(k)}$ для системы (8).

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Из (6) и смысла нормы в l_n^∞ (первая норма [1]) следует $\|\varepsilon^{(k)}\| \le g_k/Q_k \quad \forall k \ge 0$. Пусть $\det \varphi'(x^{(k)}) \ne 0$, $\bar{k} \le k \le r$. Согласно (5), (6), $\|x^{(r+1)}-x^{(r)}\| \le g_r/2B\|[\varphi'(x^{(r)})]^{-1}\|$, поэтому $\|E-[\varphi'(x^{(r)})]^{-1}\varphi'(x^{(r+1)})\| \le \|[\varphi'(x^{(r)})]^{-1}\| \|\varphi''(\xi^{(r)})\| \cdot \|x^{(r+1)}-x^{(r)}\| \le g_r/2<1$, $\xi^{(r)}=x^{(r)}+\tau^{(r)}(x^{(r+1)}-x^{(r)})$, $0<\tau^{(r)}<1$, E - единичная матрица. Следовательно, $\det\{[\varphi'(x^{(r)})]^{-1}\cdot\varphi'(x^{(r+1)})\} \ne 0$, а отсюда и $\det \varphi'(x^{(r+1)}) \ne 0$. Таким образом, (9) верно по индукции, а остальное - в силу невозрастания g_k: по определению $1 \le g_{k+1} < g_k$, если $g_k > 1$, и $g_{k+1} = g_k$ при $g_k = 1$; в последнем случае для (8) выполняются условия вида (3) ($\|\Psi(x^{(k)})\| = \|\varepsilon^{(k)}\| \le 1/Q_k$, причем $\varphi'(x^{(k)}) = \Psi'(x^{(k)})$). Лемма доказана.

Если $g_k > 1$, то выполнимость условия (3) для (8) не гарантируется. Тем не менее, поскольку каждое уравнение (8) решается не до конца, а делается только одна итерация Ньютона для него, можно установить: при $1 \le g_k < 4$ - условия релаксационности процесса относительно $|\varphi_i(x)|$ (см. лемму 2), а после достижения $g_k = 1$ - условия покомпонентного перехода $\varepsilon^{(k)}$ в $\varphi(x^{(k)})$ и, следовательно, (5)-(7) в (2) (лемма 3).

ЛЕММА 2. Если для фиксированных значений $k \ge 0$ и $i \in \mathcal{J}$ в процессе (5) - (7)

$$|\varphi_i(x^{(k)})| > g_k^2/4Q_k, \tag{10}$$

то

$$|\varphi_i(x^{(k+1)})| < |\varphi_i(x^{(k)})|. \tag{11}$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. По трехчленной формуле Тейлора имеем

$$\varphi_i(x^{(k+1)}) = \varphi_i(x^{(k)}) - \varepsilon_i^{(k)} + \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{n}\sum_{s=1}^{n} \frac{\partial^2 \varphi_i(\xi^{(k)})}{\partial x_j \partial x_s}(x_s^{(k+1)}-x_s^{(k)})(x_j^{(k+1)}-x_j^{(k)}),$$

где, согласно (5),

$$-\varepsilon_i^{(k)} = \sum_{j=1}^{n} \frac{\partial \varphi_i(x^{(k)})}{\partial x_j}(x_j^{(k+1)}-x_j^{(k)}).$$

Отсюда с учетом (4)

$$|\varphi_i(x^{(k+1)})| \le |\varphi_i(x^{(k)})-\varepsilon_i^{(k)}| + \frac{1}{2}B\|x^{(k+1)}-x^{(k)}\|^2. \tag{12}$$

На основании (5) $\|x^{(k+1)}-x^{(k)}\|^2 \le g_k\|\varepsilon^{(k)}\|/2B$, а из (6), (7)

$$|\varphi_i(x^{(k)})-\varepsilon_i^{(k)}|=\{0, d_{ik}\le 0;\ |\varphi_i(x^{(k)})|-|\varepsilon_i^{(k)}|, d_{ik}>0\}.$$

Тогда в случае (I0) при $d_{ik}\le 0$ (II) вытекает из (I2) непосредственно, а при $d_{ik}>0$ получаем

$$|\varphi_i(x^{(k+1)})|\le|\varphi_i(x^{(k)})|-g_k(1-g_k/4)/Q_k< \\ <|\varphi_i(x^{(k)})|-\delta/4Q_k<|\varphi_i(x^{(k)})|. \tag{I3}$$

ЛЕММА 3. Пусть для какого-либо индекса $i\in\mathcal{J}$ при некотором $k\ge 0$ выполнено

$$|\varphi_i(x^{(k)})|\le g_k/Q_k\ ,\ g_k=1. \tag{I4}$$

Тогда

$$|\varphi_i(x^{(k+1)})|\le g_{k+1}/Q_{k+1}. \tag{I5}$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Воспользуемся оценкой (см. обоснование (9))

$$\|E-[\varphi'(x^{(k)})]^{-1}\varphi'(x^{(k+1)})\|\le g_k/2=\frac{1}{2},$$

на основании которой известная теорема Банаха дает $\|[\varphi'(x^{(k+1)})]^{-1}\varphi'(x^{(k)})\|\le 2$. Поэтому

$$\|[\varphi'(x^{(k+1)})]^{-1}\|\le 2\|[\varphi'(x^{(k)})]^{-1}\|$$

и $1/4Q_k\le 1/Q_{k+1}$. Неравенство в (I4) обеспечивает выбор $\varepsilon_i^{(k)}=\varphi_k(x^{(k)})$, при котором из (I2) с учетом определения g_k следует (I5).

Естественные свойства сходимости процесса (5)-(7) характеризует

ТЕОРЕМА I. Если $\det\varphi'(x^{(0)})\ne 0$, то алгоритм (5)-(7):

а) за конечное число шагов k_* приводит к точке $x^{(k_*)}$, в которой выполнены условия (вида (3)) сходимости метода Ньютона к простому решению x^* системы (I), или

б) сходится к особой точке $\tilde{x}$ системы (I) ($\det\varphi'(\tilde{x})=0$), которая может быть и решением этой системы.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Рассмотрим последовательность $\chi=\{\|[\varphi'(x^{(k)})]^{-1}\|\}_{k=0}^{\infty}$. Возможны два случая.

а) Пусть χ ограничена: $\|[\varphi'(x^{(k)})]^{-1}\|\leq L<\infty, k\geq 0$. По определению g_k $\exists k=k_0\geq 0$, что $\forall k\geq k_0$ $g_k=1$. Зафиксируем $i\in\mathcal{J}$ и предположим, что $d_{ik}>0$ $\forall k\geq k_0$. Тогда, согласно (I3),

$$|\varphi_i(x^{(k+1)})|<|\varphi_i(x^{(k)})|-\delta/4Q_k,\ k\geq k_0. \tag{I6}$$

На основании (I6) для $\tau\geq 1$

$$|\varphi_i(x^{(k_0+\tau)})|<|\varphi_i(x^{(k_0)})|-\frac{\delta}{4}\sum_{j=0}^{\tau-1}1/Q_{k_0+j}\leq|\varphi_i(x^{(k_0)})|-\frac{\delta\tau}{8BL^2}.$$

При $\tau\geq 8BL^2|\varphi_i(x^{(k_0)})|/\delta$ последняя оценка теряет смысл. Следовательно, исходное предположение неверно и существует

$$\min\{k: d_{ik}\leq 0, k\geq k_0\}=k_{i1},$$

а в силу произвольности i и $k_*=\max\limits_{1\leq i\leq n}k_{i1}$, так что при $k\geq k_*$, согласно лемме 3, процесс (5), (7) является методом Ньютона (2) относительно системы (I), причем по лемме I для него будут выполнены условия сходимости (3) с заменой $x^{(0)}$ на $x^{(k_*)}$. Получили утверждение а).

б) Пусть последовательность χ не ограничена, т.е. $\|[\varphi'(x^{(k)})]^{-1}\|\longrightarrow\infty$ при $k\longrightarrow\infty$. Тогда, поскольку $\|x^{(k+1)}-x^{(k)}\|<2/B\|[\varphi'(x^{(k)})]^{-1}\|$, имеем $\|x^{(k+1)}-x^{(k)}\|\longrightarrow 0$, $x^{(k)}\to\tilde{x}$ и $\det\varphi'(\tilde{x})=0$ (в случае $2\leq g_k\leq 4-\delta$ (см. лемму I) не исключается $\tilde{x}=x^{(k)}$, $k=\mathrm{const}$). Очевидно, $\tilde{x}$ при $|\varphi_i(\tilde{x})|=0$ $\forall i\in\mathcal{J}$ будет особым решением системы (I). Теорема доказана.

3. Приведенное в п.2 описание области G при отсутствии информации о существовании и расположении искомого решения для алгоритмов нелокального типа естественно (ср. [I,2,4]). На практике задать такую область часто удается. В ином случае можно полагать $G=\ell_n^{\infty}$ или же осуществлять повторное переопределение области G с пересчетом константы B, если какая-либо итерация (5) выходит за пределы G, принимая последнюю итерацию за начальную в новой области G. В последней ситуации результаты предыдущего счета формально аннулируются, однако они, как правило, дают полезный вклад в решение исходной задачи.

Завышение β приводит к замедлению сходимости, а занижение β_k – к "преждевременному" переходу на метод Ньютона (в случае $x^{(k)} \to x^*$).

Предположим теперь, что область G выпукла, содержит решение x^* системы (I), и отображение $\varphi(x)$ регулярно в G [5], т.е. $\varphi(x) \in C^{(2)}(G)$, $\det \varphi'(x) \neq 0$ и $\varphi(x') \neq \varphi(x'')$ для $x' \neq x''$; $x, x', x'' \in G$. Тогда x^* – неособое решение (I), единственное в G.

В выпуклой области $\varphi(G)$ выделим n-мерный параллелепипед

$$\mathcal{M}_\varphi = \{(\varphi_1(x), \ldots, \varphi_n(x)) \in \varphi(G) : |\varphi_i(x)| \leq a_i < \infty,\ i = \overline{1,n}\}.$$

ТЕОРЕМА 2. Процесс (5)-(7) с $q_0 = 1$ при любом $x^{(0)} \in G$, $\varphi(x^{(0)}) \in \mathcal{M}_\varphi$ за конечное число итераций k_* достигает точки $x^{(k_*)}$, в которой выполняются условия (3) сходимости метода Ньютона (2) относительно системы (I). Если $\|[\varphi'(x)]^{-1}\| \leq L$ $\forall x \in G$, то $k_* \leq (8\beta L^2 \|\varphi(x^{(0)})\| - 4)/3$.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Покажем, что последовательность χ здесь ограничена. Предположим противное: $\|[\varphi'(x^{(k)})]^{-1}\| \to \infty$, $k \to \infty$ (по лемме I при конечных k элементы из χ ограничены). Тогда по п.б) теоремы I $x^{(k)} \to \tilde{x}$, $\det \varphi'(\tilde{x}) = 0$. Пусть $\mathcal{J}_1 = \{i \in \mathcal{J} : |\varphi_i(\tilde{x})| > 0\}$, $\mathcal{J}_2 = \{i \in \mathcal{J} : |\varphi_i(\tilde{x})| = 0\}$. Очевидно, $\mathcal{J}_1 \cup \mathcal{J}_2 = \mathcal{J}$, причем возможно $\mathcal{J}_1 = \emptyset$ или $\mathcal{J}_2 = \emptyset$, $\emptyset$ – пустое множество. Имеем $|\varphi_i(\tilde{x})| \leq |\varphi_i(x^{(0)})|$, $i \in \mathcal{J}_2$, а для $i \in \mathcal{J}_1$ будет $|\varphi_i(x^{(k)})| > 1/Q_k$ $\forall k \geq 0$. т.е. согласно лемме 2 $|\varphi_i(x^{(0)})| \geq |\varphi_i(x^{(1)})| > \ldots > |\varphi_i(\tilde{x})|$, иначе бы, как только $|\varphi_i(x^{(\bar{k})})| \leq 1/Q_{\bar{k}}$, $\bar{k} < \infty$, по лемме 3 $|\varphi_i(x^{(k)})| \leq 1/Q_k$ $\forall k \geq \bar{k}$, т.е. $i \in \mathcal{J}_2$. Получили $\varphi(\tilde{x}) \in \mathcal{M}_\varphi$ и $\det \varphi'(\tilde{x}) = 0$, что противоречит регулярности $\varphi(x)$ в G. Следовательно, χ ограничена и справедливо утверждение а) теоремы I. Оценка k_* легко получается с учетом (I3) и (3). Теорема доказана.

Если дополнительно предполагать, что область G замкнута и содержит все приближения процесса (5)-(7) при $q_0 \in [1, 4 - \delta]$, то в силу регулярности $\varphi(x)$ также, очевидно, будет справедливо утверждение а) теоремы I с

$$k_* \leq (8BL^2\|\varphi(x^{(k_0)})\| - 4)/3 + (g_0 - 1)/8,$$

где $k_0 = \min\{k : g_k = 1\}$.

Отметим две рекомендации по использованию алгоритма (5)-(7).

Численные эксперименты показывают, что параметр $\delta \in (0,3)$, необходимый для качественных обоснований, при счете следует выбирать близким к нулю, а $g_0 = 4 - \delta$, что обеспечивает наиболее быструю сходимость метода. В последующих примерах полагаем $\delta = 10^{-8}$.

Далее, общеизвестна потребность в выявлении гарантий существования решения и сходимости к нему методов типа (2) для нелинейных систем (I), получаемых при исследовании моделей ответственных прикладных задач. Разовая проверка для этой цели условий вида (3) по своей трудоемкости или сравнима с реализацией одного шага метода (2) или намного сложнее за счет уточнения в новой области константы B из (4). В случае невыполнимости условий (3) осуществленные на их проверку большие вычислительные затраты можно эффективно использовать для построения "недорогого" очередного приближения по методу (5)-(7), имеющему ослабленные условия сходимости. Отсюда следует, что процесс (5)-(7), может быть, полезно применять и в каких-либо комбинациях с методом Ньютона или его иными модификациями.

4. Приведем простые иллюстрации возможностей алгоритма (5)-(7). Ограничимся сравнениями с порождающим его методом Ньютона и наиболее близким идейно процессом из [4].

ПРИМЕР I. $\varphi(x) = ((2+x^2)/(1+x^2))\operatorname{arctg} x - 0{,}1$, $G = \ell_1^\infty$, $B = 2{,}4$, $x^{(01)} = 1$, $x^{(02)} = 1{,}5$. Условия сходимости метода Ньютона не выполнены. Более того, он реально расходится. Сходимость алгоритмов (5)-(7) и [4] обеспечена. Начиная с $x^{(01)}$, процесс (5)-(7) переходит на метод Ньютона при выполнении условий (3) на 2 итерации и получает корень $x^* \approx 0{,}050104$ на 4 итерации, а с $x^{(02)}$ – после 6 и 9 итераций. Соответствующие количества шагов по методу [4] есть 7 и 10, 24 и 26.

ПРИМЕР 2. $\varphi(x) = 0{,}12x^5 - 0{,}76x^4 + 1{,}32x^3 - 0{,}07x^2 - 0{,}44x - 0{,}17$, $x^{(01)} = 1{,}9$, $x^{(02)} = 2{,}2$; $G = [0{,}5; 2{,}5]$, $B = 1{,}86$.

Метод Ньютона получает корень $x^* \approx 1{,}000000$ после 97 и 15 итераций, алгоритм (5)-(7) – за 4 и 6, а процесс из [4] – за 7 и 13 шагов соответственно $x^{(01)}$ и $x^{(02)}$.

ПРИМЕР 3. Решалась система двух уравнений с

$$\varphi_1(x)=x_1^2-x_2-1,\ \varphi_2(x)=(x_1-2)^2+(x_2-0,5)^2-1,$$

имеющая решения x^{*1}=(0,06734 ..., 0,13922...), x^{*2} = =(1,54634..., 1,39117). Начальное приближение $x^{(0)}$=(0,1, 2). С указанной точностью x^{*1} было найдено методами Ньютона и (5)-(7) за 24 и 13 итераций соответственно. Процесс из [4] сошелся к x^{*2} через 45 шагов. Здесь В = 4 в ℓ_2^∞.

Как правило, более быстрая сходимость метода (5)-(7) наблюдается при $q_0 > 4$.

В заключение отметим, что для простого частного случая $q_0 = 1$ некоторые результаты были анонсированы в заметке [6].

Авторы выражают благодарность Б.А.Бельтюкову за внимание к работе и полезные обсуждения.

ЛИТЕРАТУРА

1. БЕРЕЗИН И.С., ЖИДКОВ Н.П. Методы вычислений. Т.I. - М.: Наука, 1966.
2. ОРТЕГА Д., РЕЙНБОЛДТ В. Итерационные методы решения нелинейных систем уравнений со многими неизвестными. - М.: Мир, 1975.
3. ДАВЫДЕНКО Д.Ф. Об одном новом методе численного решения систем нелинейных уравнений. - Докл. АН СССР, 1953, т.88, №4, с.601-602.
4. КУЛЬЧИЦКИЙ О.Ю., ШИМЕЛЕВИЧ Л.И. О нахождении начального приближения для метода Ньютона. - Журн. вычисл. мат. и мат. физ., 1974, т.14, №4, с.1016-1018.
5. ГРЕБЕНЧА М.К., НОВОСЕЛОВ С.И. Курс математического анализа.- М.: Высшая школа, 1961.
6. СУСЛИН Б.А. Об одном алгоритме отыскания начального приближения для метода Ньютона. - В кн.: Приближенные методы решения операторных уравнений и их приложения. Иркутск: изд. СЭИ СО АН СССР, 1982, с.198-199.

Поступила в ред.-изд. отдел
13.07.1983 г.