УДК 519.622:004.021:004.942

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ СХЕМА ПОВЫШЕНИЯ УСТОЙЧИВОСТИ НЕПРЕРЫВНОГО АНАЛОГА МЕТОДА НЬЮТОНА ДЛЯ РЕШЕНИЯ НЕЛИНЕЙНЫХ УРАВНЕНИЙ

Никонов Э.Г., Казаков Д.С.

ГБОУ ВО МО «Университет «Дубна», Институт системного анализа и управления, Дубна, e-mail: e.nikonov@jinr.ru

В работе проанализирована зависимость характеристик сходимости непрерывного аналога метода Ньютона (НАМН) от невязки при численном решении нелинейных уравнений. Проведено исследование влияния шага численного интегрирования эволюционного уравнения НАМН на область и скорость сходимости метода. Проанализированы алгоритмы выбора шага для численных методов решения нелинейных уравнений, использующие принцип уменьшения невязки. Поскольку при неудачно выбранном начальном приближении потребуется слишком много итераций или же сходимость может отсутствовать, был разработан механизм управления характеристиками сходимости, позволяющий увеличить окрестность выбора начального приближения. На основе проведённого анализа авторами предложен подход для повышения устойчивости процесса сходимости НАМН, в процессе которого предлагается ввести ряд коэффициентов, применяемых для регуляризации параметров влияющих на значения характеристик сходимости метода решения уравнений. Разработанный подход позволяет исключить зацикливание итерационного процесса метода Ньютона при наличии приближенных к нулю значений производной в окрестности корня уравнения. Приведены результаты тестовых расчетов для модельной задачи, которые показали высокую эффективность предложенного в работе подхода для повышения устойчивости и скорости сходимости численных методов решения нелинейных уравнений на основе НАМН.

Ключевые слова: итерационные методы, скорость сходимости, нелинейные уравнения

COMPUTATIONAL SCHEME FOR INCREASING THE STABILITY OF THE CONTINUOUS ANALOG OF THE NEWTON METHOD FOR THE SOLUTION OF NONLINEAR EQUATIONS

Nikonov E.G., Kazakov D.S.

Dubna State University, Institute of the System Analysis and Management, Dubna, e-mail: e.nikonov@jinr.ru

The paper analyzes the dependence of the convergence characteristics of the continuous analogue of the Newton method (CANM) on the discrepancy in the numerical solution of nonlinear equations. The influence of the step of numerical integration of the CANM evolution equation on the area and speed of the method's convergence is studied. Step selection algorithms for numerical methods for solving nonlinear equations are analyzed. Since the initial approximation chosen incorrectly will require too many iterations or there may be no convergence, a mechanism for managing the convergence characteristics has been developed to increase the neighborhood of the initial approximation selection. Based on the analysis, the authors propose an approach to improve the stability of the CANM convergence process, in which it is proposed to introduce a number of coefficients used to regularize the parameters that affect the values of the convergence characteristics of the method for solving equations. The developed approach makes it possible to avoid looping the iterative process of the Newton method in the presence of values of the derivative close to zero in the vicinity of the root of the equation. The results of test calculations for the model problem are presented, which showed the high efficiency of the approach proposed in this paper for increasing the stability and convergence rate of numerical methods for solving nonlinear equations based on CANM.

Keywords: iterative methods, rate of convergence, nonlinear equations

При решении широкого круга вычислительных задач в различных областях науки и техники возникает потребность численного решения уравнений одного или нескольких переменных, в частности при использовании неявных разностных схем для решения обыкновенных дифференциальных уравнений и уравнений в частных производных, интегральных и других, как правило, нелинейных уравнений. В настоящее время существует множество итерационных методов решения уравнений и их систем, однако использование традиционных итерационных методов решения нелинейных уравнений часто является малоэффективным из-за довольно большого количества итераций, что неминуемо приводит к значительному увеличению времени вычислений. Таким образом, очевидно, что вопрос о построении эффективных алгоритмов решения нелинейных уравнений остается актуальным в вычислительной математике и ее приложениях, в частности математическом моделировании, например при моделировании методом молекулярной динамики, где на каждом временном шаге необходимо решать от 10^3 до 10^7–10^{10} дифференциальных уравнений. В этом случае цена даже одной итерации при решении одного уравнения возрастает в миллионы раз [1]. Одним из эффективных итерационных методов решения нелинейных уравнений является метод Ньютона и различные его модификации? в том числе на основе непрерывного аналога метода Ньютона (НАМН). Эффективность метода Ньютона во многом основана на его высокой скорости сходимости. При численном решении эволюционного уравнения НАМН выбором подходящего значения шага численного интегрирования τ можно добиться сходимости метода при меньших ограничениях на значение начального приближения, чем в классическом методе Ньютона. Шаг интегрирования эволюционного уравнения τ может служить управляющим параметром для скорости сходимости итерационной схемы на основе НАМН. Предлагаемый в данной статье алгоритм выбора управляющего параметра τ позволяет сохранить высокую скорость сходимости даже в случае, когда значение производной в итерационной схеме метода Ньютона стремится к нулю. Данный алгоритм автоматически осуществляет выбор управляющего параметра в зависимости от значений невязки и производной левой части уравнения таким образом, чтобы окрестность выбора начального приближения обеспечивала устойчивую сходимость НАМН к точному решению.

В ходе работы предполагается провести исследование влияния шага численного интегрирования эволюционного уравнения НАМН на область и скорость сходимости метода и проанализировать алгоритмы выбора шага для численных методов решения нелинейных уравнений, использующие принцип уменьшения невязки. На основании проведённого анализа необходимо предложить эффективный алгоритм численного решения нелинейных уравнений.

Устойчивая итерационная схема НАМН

Итерационная схема приближенного решения нелинейного уравнения вида

$$f(x) = 0$$

на основе непрерывного аналога метода Ньютона может быть представлена в следующем виде [2]. Пусть на отрезке $[a, b]$ существует единственный корень x^*, функция $f(x)$ дважды непрерывно дифференцируема и имеет нигде не обращающуюся в ноль первую производную $|f'(x)| > 0 \, \forall x \in [a,b]$. Тогда для произвольного начального приближения $x_0 \in [a, b]$ $\forall\, i = 1, 2, 3, \ldots$ приближенное решение x_i нелинейного уравнения $f(x) = 0$ может быть получено при помощи следующего рекуррентного соотношения:

$$x_i = x_{i-1} - \tau_i \frac{f(x_i)}{f'(x_i)},$$

$$\tau_i = \min\left|\frac{\tau_{i-1}|f(x_{i-1})|}{|f(x_i)|}, 1\right|, \tau_0 = 1. \qquad (1)$$

Здесь τ_i – шаг численного интегрирования эволюционного уравнения НАМН [3].

Согласно теореме о существовании решения нелинейного уравнения, установленной и доказанной Л.В. Канторовичем [4] при помощи метода Ньютона, для сходимости последовательности $\{x_i\}$ к точному решению x^* при $i \to \infty$ достаточно выполнение следующих условий: $\forall x \in [a,b]$ 1) $|f(x)| < A$; 2) $|f'(x)|^{-1} < B$; 3) $\exists f''(x)$ и $|f''(x)| \le C$. Здесь A, B, C – действительные положительные константы.

В случае если для некоторой итерации значение $f'(x_i)$ становится настолько малым, что итерационный процесс (1) становится расходящимся, для восстановления сходимости можно модифицировать итерационную схему (1) описанным ниже способом.

Пусть $r > 0$ – такое целое число, что выполнены следующие условия:

$$\frac{f(x_i)}{f(x_{i-1})} > 0 \ \forall i : 1 \le i \le r;$$

$$\frac{f(x_i)}{f(x_{i-1})} < 0 \ \forall i : i > r.$$

При этом точное решение удовлетворяет условию

$$x^* = x_i + \alpha(x_i - x_{i-1}), \ \alpha \in (0,1)$$

и

$$[x_i; x_{i-1}] \in [a; b] \ \forall i = 1, \ldots, r.$$

Тогда для нахождения i-того приближения вместо формулы (1) может быть использована следующая итерационная схема:

$$x_i = \theta_i + \frac{(\Delta x_i - \theta_i)}{2}\vartheta, \qquad (2)$$

$$\Delta x_i = x_{i-1} - \tau_i \frac{f(x_{i-1})}{f'(x_{i-1})},$$

$$\theta_i = x_0 - \left(x_0 - x_{i-1}\right)\frac{f\left(x_0\right)}{f\left(x_0\right) - f\left(x_{i-1}\right)},$$

$$\vartheta = \min\left[\left|\frac{f\left(x_0\right)*(x_0 - \theta_i)}{f\left(x_{i-1}\right)*(x_0 - \Delta x_i)}\right|, 2\right], 0 < \vartheta \le 2.$$

Алгоритм (2) может быть применён при следующих условиях:

$$\left|f'\left(x_{i-1}\right)\right| \le \left|f'\left(x_{i-2}\right)\right|;$$

$$\left|x_{i-1} - \Delta x_i\right| > \left|x_{i-1} - \theta_i\right|.$$

Величина θ_i является решением уравнения прямой, проходящей через точки $f(x_0)$ и $f(x_{i-1})$. Алгоритм (2) может использоваться для управления величиной $\left|f'\left(x_{i-1}\right)\right|$ в случае возникновения расходимости итерационной схемы (1) при слишком быстром уменьшении абсолютной величины производной в окрестности корня уравнения [3]. Для вычисления величины τ_i при $i \le r$ воспользуемся формулой

$$\tau_i \cdot \left|f\left(x_i\right)\right| = \tau_{i+1} \cdot \left|f\left(x_{i+1}\right)\right| =$$
$$= \tau_{i+2} \cdot \left|f\left(x_{i+2}\right)\right| = \tau_0 \cdot \left|f\left(x_0\right)\right|.$$

Тогда для величины τ_i можно получить следующую расчетную формулу:

$$\tau_i = \frac{\tau_{i-1} \cdot \left|f\left(x_{i-1}\right)\right|}{\left|f\left(x_i\right)\right|} =$$
$$= \frac{\tau_{i-2} \cdot \left|f\left(x_{i-2}\right)\right| \cdot \left|f\left(x_{i-1}\right)\right|}{\left|f\left(x_{i-1}\right)\right| \cdot \left|f\left(x_i\right)\right|} = \frac{\tau_0 \cdot \left|f\left(x_0\right)\right|}{\left|f\left(x_i\right)\right|}. \quad (3)$$

Если $i > r$, то $\frac{f(x_i)}{f(x_{i-1})} < 0$, тогда для того, чтобы не допустить расходимости метода (1) в результате возможного зацикливания при малых значениях производной вблизи корня, вместо схемы (1) предлагается использовать следующую итерационную схему:

$$x_{i+1} = x_i - \gamma_i \frac{f\left(x_i\right)}{f'\left(x_i\right)};$$

$$\gamma_i = \min\left(\left(0{,}8 \cdot \frac{\left|x_i - \xi\right|}{\left|f\left(x_i\right)f'\left(x_i\right)^{-1}\right|}\right), 1\right). \quad (4)$$

Для алгоритма (4) вводится дополнительный параметр $\xi = x_{i-1}$, где x_{i-1} – значение итерационной переменной, в которой отношение невязок впервые становится отрицательным $\frac{f(x_i)}{f(\xi)} < 0$. Вместо параметра τ_i используется параметр γ_i, вычисляемый по формуле (4), который позволяет контролировать величину $|\xi - x_{i+1}|$. Если величина $|\xi - x_{i+1}|$ становится равной нулю, то итерационный процесс (1) становится строго циклическим при том, что условие $\frac{f(x_i)}{f(\xi)} < 0$ выполняется.

Действительно, в случае: $\frac{f(x_i)}{f(\xi)} < 0$ и $\left|f'\left(x_i\right)\right| \to 0$ при $i \to \infty$ может выполняться условие:

$$\left|\xi - x_{i+1}\right| \to 0.$$

Тогда $\xi \approx x_{i+1}\ \forall i > r$, откуда следует следующее приближенное равенство:

$$\left|\xi - x_i\right| \approx \left|x_i - x_{i+1}\right|.$$

Данное неравенство позволяет сделать вывод о расходимости и полном зацикливании метода (1) в случае выполнения точного равенства $\left|\xi - x_i\right| = \left|x_i - x_{i+1}\right| \forall i > r$ [5]. Чтобы избежать данного типа расходимости, используется итерационная схема (4), которая позволяет $\forall i > r$ обеспечить выполнение следующего условия.

$$x_{i+1} = x_i + \alpha\left(x_i - x_{i-1}\right),\ \alpha \in (0{,}1).$$

Данное условие приводит к строгому неравенству

$$\left|x_i - x_{i-1}\right| > \left|x_i - x_{i+1}\right|, \quad (5)$$

которое гарантирует устранение расходимости метода (1) в виде зацикливания. Подставив значение $\gamma_i\left|\frac{f\left(x_i\right)}{f'\left(x_i\right)}\right|$ вместо $\left|x_i - x_{i+1}\right|$ в неравенство (5), мы получим:

$$\left|x_i - x_{i-1}\right| > \gamma_i\left|\frac{f\left(x_i\right)}{f'\left(x_i\right)}\right|. \quad (6)$$

Это приводит к оценке для γ_i:

$$\gamma_i < \frac{\left|x_i - x_{i-1}\right| \cdot \left|f'(x_i)\right|}{\left|f(x_i)\right|} = \frac{\left|x_i - \xi\right|}{\left|f\left(x_i\right)f'\left(x_i\right)^{-1}\right|}. \quad (7)$$

Схема алгоритма (2)–(4) представлена ниже.

Алгоритм решения нелинейного уравнения f(x) = 0

Input: *eps* – значение невязки, при достижении которого итерационный процесс останавливается.
Output: N – количество выполненных итераций.
θ_i – точка пересечения прямой, проходящей через точки x_0, x_i, с осью абсцисс.
ξ – точка, для которой выполнилось условие $\dfrac{f(x_i)}{f(x_{i-1})} < 0$.
ϑ – регулирующий коэффициент для x_i.
Initial data: x_0 – начальное приближение.
τ_0 – начальное значение шага численного интегрирования эволюционного уравнения НАМН.

while $\left(\left|f(x_i)\right| > eps$ and $\dfrac{f(x_i)}{f(x_{i-1})} > 0\right)$ do

$\theta_i := x_0 - (x_0 - x_{i-1}) \cdot f(x_0) / (f(x_0) - f(x_{i-1}))$

$x_i := x_{i-1} - \tau_{i-1} \cdot f(x_{i-1}) / f'(x_{i-1})$

$\tau_i := \tau_{i-1} \cdot f(x_i) / f(x_{i-1})$

if $\tau_i > 1$ then

$\tau_i := 1$

end if

if $(f'(x_i) < f'(x_{i-1})$ and $\left|x_{i-1} - x_i\right| > \left|x_{i-1} - \theta_i\right|)$ then

$\vartheta := \left| f(x_0) * (x_0 - \theta_i) / f(x_{i-1}) \cdot (x_0 - x_i) \right|$

if $\vartheta > 2$ then

$\vartheta := 2$

end if

$x_i := \theta_i + (x_i - \theta_i) \cdot \vartheta / 2$

end if

end while

while $|f(x_i)| > eps$ do

if $\dfrac{f(x_i)}{f(x_{i-1})} < 0$ then

$\xi := x_{i-1}$

end if

$x_i = x_{i-1} - \dfrac{f(x_{i-1})}{f'(x_{i-1})}$

if $(0.8 \cdot |\xi - x_{i-1})| < |x_i - x_{i-1}|)$ then

$x_i = 0.8 \cdot |(\xi - x_{i-1})| \cdot \dfrac{f(x_{i-1})}{f'(x_{i-1})} / \left|\dfrac{f(x_{i-1})}{f'(x_{i-1})}\right|$

end if

end while

Входными данными для этого алгоритма является *eps* – точность нахождения приближенного решения x_i Для уравнения $f(x) = 0$. Итерации заканчиваются при условии $|f(x_i)| \le eps$. При этом выходным значением переменной N будет значение i, при котором впервые выполняется условие $|f(x_i)| \le eps$. Начальными данными для алгоритма являются начальное приближение x_0 и начальное значение шага численного интегрирования эволюционного уравнения НАМН τ_0. Первый цикл с предусловием выполняется до тех пор, пока отношение невязок для соседних итераций положительно. После того, как упомянутое выше отношение невязок становится отрицательным $\dfrac{f(x_i)}{f(x_{i-1})} < 0$, начинается выполнение второго цикла с предусловием. При этом определяется новая переменная $\xi = x_{i-1}$ и вычисления проводятся в соответствии с алгоритмом (4). Значение 0,8, используемое для вычисления очередной величины x_i, получено в результате вычислительных экспериментов с целью определения наиболее эффективного значения коэффициента в выражении для вычисления γ_i (4). Данное значение является оптимальным для увеличения области сходимости для различных значений начального приближения x_0 и, соответственно, уменьшения количества итераций для нахождения приближенного решения заданной точности.

Алгоритм реализован на языке С++.

Численное исследование устойчивости алгоритма (2)–(4)

В табл. 1, 2 представлены результаты приближенного решения тестового уравнения $f(x) = \ln(x)^{\sin 3x - 1,2} - 0,7 = 0$ с использованием численного метода (2), (4). $x^* = 3,36985651$ является точным решением тестового уравнения. В окрестности корня в точке $x = 3,825049$ производная $f'(x)$ обращается в ноль, что может привести при неудачном выборе начального приближения x_0 к зацикливанию стандартного НАМН.

Таблица 1

Зависимость количества итераций N от выбора начального значения x_0 при фиксированном $\tau_0 = 0,1$

x_0	$\lvert f(x_N) \rvert$	N
2,5	$1 \cdot 10^{-6}$	8
3	$1 \cdot 10^{-4}$	3
3,2	$1 \cdot 10^{-10}$	3
3,3	$1 \cdot 10^{-5}$	4

Таблица 2

Зависимость количества итераций N от выбора начального значения τ_0 при фиксированном $x_0 = 2,5$

τ_0	$\lvert f(x_N) \rvert$	N
0,1	$1 \cdot 10^{-6}$	8
0,2	$1 \cdot 10^{-4}$	7
0,4	$1 \cdot 10^{-10}$	6
0,7	$1 \cdot 10^{-5}$	4

Анализ данных из табл. 1, 2 позволяет сделать следующие выводы. Как видно из табл. 1, чем ближе к корню выбирается начальное приближение x_0, тем меньше итераций N необходимо для получения заданной точности приближенного решения тестового уравнения при помощи метода (2), (4). Данное свойство присуще всем методам ньютоновского типа. Данные табл. 2 демонстрируют возможность уменьшения количества итераций при фиксированном начальном приближении с помощью предложенного в статье метода (2), (4) за счет адекватного выбора начального значения шага численного интегрирования эволюционного уравнения НАМН τ_0. При этом предложенная в статье модификация НАМН позволяет не допустить расходимости численного метода даже в случае зацикливания, если в окрестности корня, в некоторой точке, производная $f'(x)$ обращается в ноль.

Заключение

В статье предложен новый подход к построению устойчивых численных схем на основе НАМН. Данный подход при помощи описанной в статье процедуры выбора шага численного интегрирования эволюционного уравнения НАМН не позволяет зацикливаться итерационному процессу численного решения уравнения $f(x) = 0$ в случае, если в окрестности корня уравнения производная $f'(x)$ обращается в ноль. Тестовые расчеты для модельной задачи показали высокую эффективность предложенного авторами подхода для повышения устойчивости численных методов решения нелинейных уравнений на основе НАМН.

Список литературы

1. Nikonov E.G. One class of conservative difference schemes for solving molecular dynamics equations of motion. [Electronic resource]. URL: https://arxiv.org/pdf/1605.05714v1.pdf (date of access: 22.09.2020).

2. Cordero A., Torregrosa J., Vassileva M. Three-step iterative methods with optimal eighth-order convergence. Journal of Computational and Applied Mathematics. 2011. V. 235. P. 3189–3194.

3. Chun C., Neta B.A. Analysis of a new family of eighth-order optimal methods. Mathematics, Computer Science. 2014. V. 245. P. 86–107.

4. Жанлав Т., Узийбаяр В., Чуулунбаатар О. Необходимые и достаточные условия сходимости двух- и трехшаговых итераций ньютоновского типа // Журнал вычислительной математики и математической физики. 2017. Т. 57. № 7. С. 1093–1102.

5. Жанлав Т., Чуулунбаатар О. Сходимость непрерывного аналога метода Ньютона для решения нелинейных уравнений // Вычислительные методы и программирование. 2009. Т. 10. № 4. С. 402–407.