УДК 519.622, 004.021, 004.942

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ КВАДРАТИЧНОЙ ИНТЕРПОЛЯЦИИ ДЛЯ УСКОРЕНИЯ СХОДИМОСТИ НЕПРЕРЫВНОГО АНАЛОГА МЕТОДА НЬЮТОНА

Никонов Эдуард Германович[1], Казаков Дмитрий Сергеевич[2]

[1]*Доктор физико-математических наук, профессор;*
ГБОУ ВО МО «Университет «Дубна»,
Институт системного анализа и управления;
141980, Московская обл., г. Дубна, ул. Университетская, 19;
e-mail: e.nikonov@jinr.ru.

[2]*Студент;*
ГБОУ ВО МО «Университет «Дубна»,
Институт системного анализа и управления;
141980, Московская обл., г. Дубна, ул. Университетская, 19;
e-mail: mitya_kazakov@inbox.ru.

В работе проанализировано изменение характеристик сходимости Непрерывного аналога метода Ньютона (НАМН) при различном поведении невязки функции в процессе применения метода для решения нелинейного уравнения. Исследовано влияние итерационного параметра в НАМН на область и скорость сходимости. На основе проведённого анализа было предложено ввести дополнительные условия применения ряда модификаций алгоритма НАМН в соответствии с поведением невязки. Предложен подход к оптимизации процесса сходимости НАМН, основанный на применении квадратичной интерполяции приближенных решений, полученных на предыдущих итерациях. Был разработан механизм управления характеристиками сходимости НАМН с использованием ряда управляющих параметров, таких как, коэффициент изменения шага разностной схемы для численного решения дифференциального уравнения НАМН. На основе разработанного механизма управления процессом сходимости предложена модификация непрерывного аналога метода Ньютона.

Ключевые слова: итерационные методы, скорость сходимости, нелинейные уравнения, непрерывный аналог метода Ньютона.

USING QUADRATIC INTERPOLATION TO ACCELERATE THE CONVERGENCE OF A CONTINUOUS ANALOG OF THE NEWTON METHOD

Nikonov Eduard[1], Kazakov Dmitriy[2]

[1]*Doctor of Science (Phys & Math), professor;*
Dubna State University,
Institute of the system analysis and management;
141980, Dubna, Moscow reg., Universitetskaya str., 19;
e-mail: e.nikonov@jinr.ru.

[2]*Student;*
Dubna State University,
Institute of the system analysis and management;
141980, Dubna, Moscow reg., Universitetskaya str., 19;
e-mail: mitya_kazakov@inbox.ru.

The paper analyzes the change in the characteristics of the convergence of the Continuous analogue of the Newton's method (NAMN) with different behavior of the residual function in the process of applying the method to solve a nonlinear equation. The influence of iterative option in the NAMS on the area and speed of convergence. Based on the analysis, it was proposed to introduce additional conditions for the use of a number of modifications of the NAMN algorithm in accordance with the behavior of the residual. An approach to the optimization of THE namh convergence process based on the use of quadratic interpolation of approximate solutions obtained in previous iterations is proposed. A mechanism was developed to control the convergence characteristics of NAMN using a number of control parameters, such as the step change coefficient of the difference scheme for the numerical solution of the differential equation NAMN. On the basis of the developed *mechanism of convergence process control, a modification of the continuous analogue of Newton's method is proposed.*

Keywords: Iterative methods, rate of convergence, nonlinear equations, continuous analogue of Newton's method.

Введение

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. Использование традиционных итерационных методов часто является малоэффективным из-за довольно большого количества итераций, что неминуемо приводит к значительному увеличению времени вычислений. 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 НАМН.

В данной работе проанализированы итерационные численные схемы, основанные на методе Ньютона. Проведено сравнение различных численных методов ньютоновского типа. Исследовано влияние итерационного параметра в непрерывном аналоге метода Ньютона на область и скорость сходимости. Предложен подход к оптимизации процесса сходимости непрерывного аналога метода Ньютона (НАМН). На основании данного подхода разработан механизм управления скоростью сходимости непрерывного аналога метода Ньютона с использованием в качестве управляющего параметра коэффициента изменения шага разностной схемы для численного решения дифференциального уравнения НАМН. На основе разработанного механизма управления процессом сходимости была предложена модификация непрерывного аналога метода Ньютона.

Метод Ньютона для решения нелинейных уравнений

При необходимости численного решения нелинейного уравнения:

$$f(x) = 0. \tag{1}$$

определяется участок $[a, b]$ где, согласно теореме Канторовича [2], должны выполняться условия:

$$\frac{1}{F'(x)} < B;$$

$$\frac{F(x)}{F'(x)} < A; \tag{2}$$

$$\exists F''(x) \in [a, b], |F''(x)| \le C \le \frac{1}{2AB};$$

$$|a - b| \le \frac{1}{AB}\left(1 - \sqrt{1 - 2ABC}\right).$$

Если условия (2) выполнены, тогда на отрезке $[a, b]$ существует единственный корень уравнения (1), который может быть найден итерационным методом Ньютона:

$$x_i = x_{i-1} - \frac{f(x_{i-1})}{f'(x_{i-1})}, i = 1,2,3, \dots, n. \tag{3}$$

Значительный недостаток метода Ньютона – это крайне малая область $[a, b]$ из-за этого необходимо x_0 подбирать достаточно близко к корню уравнения x^*, иначе, возможна расходимость метода. Для решения проблемы сходимости метода Ньютона на, в достаточной степени, произвольном отрезке $[a, b]$ авторы предлагают ввести условие, в случае выполнения которого, применяется алгоритм, обеспечивающий сходимость, близкую к теоретической.

Теорема 1. Пусть на отрезке $[a, b]$ существует точное решение x^* уравнения (1) и при решении данного уравнения итерационным методом Ньютона для некоторого значения i выполняется условие:

$$\frac{f(x_i)}{f(x_{i-1})} < 0. \quad (4)$$

Тогда $x^* \in [x_i, x_{i-1}]$ при этом $|x_i - x_{i-1}| \leq |a - b|$.

Доказательство

В случае применения метода Ньютона необходимо выполнение условия:

$$|\boldsymbol{a} - \boldsymbol{b}| \geq \left|\frac{\boldsymbol{f(x_{i-1})}}{\boldsymbol{f'(x_{i-1})}}\right|. \quad (5)$$

При невыполнении условия (5) следующая итерация $f(x_i)$ по методу (3) удовлетворяет условию:

$$\boldsymbol{f(x_i) \notin [a, b]}. \quad (6)$$

Что значит расходимость метода Ньютона, поэтому для сходимости метода (3) необходимо выполнение условия:

$$[\boldsymbol{x_i}, \boldsymbol{x_{i-1}}] \subset [\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}]. \quad (7)$$

Из этого следует что $|x_i - x_{i-1}| \leq |a - b|$, тогда, в соответствии с теоремой об отделении корней [3], если выполняется утверждение (7) и утверждение (4) то, следовательно, $x^* \in [x_i, x_{i-1}]$. Теорема доказана.

Зная границы области $[x_i, x_{i-1}]$, несложно найти условия для x такие что:

$$\boldsymbol{x_{i+1} \in [x_i, x_{i-1}]}, \quad (8)$$

что исключит расходимость итерационного процесса.

Алгоритм решения уравнения до выполнения условия

$$\frac{f(x_i)}{f(x_{i-1})} < \boldsymbol{0}.$$

В данном случае необходимо выполнение условия достаточно близкого расположения x_0 к корню уравнения для успешной сходимости метода Ньютона на участке $[a, b]$.

Для уменьшения величины расходимости используется метод, предложенный Гавуриным [4].

$$\boldsymbol{x_i} = \boldsymbol{x_{i-1}} - \boldsymbol{\tau_i} * \frac{f(x_{i-1})}{f'(x_{i-1})}; \quad (9)$$

$$\boldsymbol{0 < \tau_i \leq 1}.$$

Преимущество, связанное с уменьшением области сходимости этого метода по сравнению с методом Ньютона, представлено в статье [5] и реализуется при условии применения алгоритма для поиска значения коэффициента:

$$\tau_i = \frac{\tau_{i-1} * |f(x_{i-1})|}{|f(x_i)|}. \qquad (10)$$

Использование алгоритма (10) наиболее эффективно только при достаточно малых τ_0 , что приводит к очевидному уменьшению значения $|x_{i-1} \ - x_i|$ по сравнению с методом Ньютона.

Теорема 2. Сходимость для метода (9), при использовании алгоритма (10) определения коэффициента τ , возможна только при выполнении условия:

$$|\boldsymbol{f'(x_i)}| \geq \frac{\boldsymbol{\tau_0 * |f(x_0)|}}{\boldsymbol{|a-b| - |c_i|}} \qquad (11)$$

$$\text{При } \boldsymbol{c_i = c_{i-1} + \ |x_{i-1} - x_{i-2}|}, \quad c_0 = 0. \qquad (12)$$

Доказательство

В статье [5] упоминается зависимость:

$$\boldsymbol{\tau_i * |f(x_i)| = \tau_{i+1} * \ |f(x_{i+1})| = \tau_{i+2} * |f(x_{i+2})| = \tau_0 * |f(x_0)|}$$

Формулу (10) для расчёта значения τ_i, можно представить в виде:

$$\boldsymbol{\tau_i = \frac{\tau_{i-1} * |f(x_{i-1})|}{|f(x_i)|} = \frac{\tau_{i-2} * |f(x_{i-2})| * |f(x_{i-1})|}{|f(x_{i-1})| * |f(x_i)|} = \frac{\tau_0 * |f(x_0)|}{|f(x_i)|}}, \qquad (13)$$

Если применить (13) для расчёта по методу (9), получим

$$\boldsymbol{x_i = \ x_{i-1} - \frac{\tau_0 * |f(x_0)|}{|f(x_{i-1})|} * \frac{f(x_{i-1})}{f'(x_{i-1})}}. \qquad (14)$$

В соответствии с утверждением о том, что мы рассматриваем случай, где

$$\boldsymbol{\frac{f(x_i)}{f(x_{i-1})} > 0}, \qquad (15)$$

можно сделать вывод о том, что при введении дополнительного условия, $\tau_0 * |f(x_0)| < |f(x_i)|$ будет выполнено ограничение $0 < \tau_i \leq 1$.

Рассмотрим условия сходимости для метода (14):

$$|a-b| \geq \frac{\tau_0 * |f(x_0)|}{|f(x_0)|}. \qquad (16)$$

Учитывая (15) очевидно, что условие (16) не гарантирует сходимость, поскольку

$$|a-b| - |c_i| \geq |x_i - x_{i-1}|$$

значение $|a-b|$ уменьшается на $|x_{i-1} \ - x_i|$ после каждой итерации, участком сходимости метода (14) будет:

$$(\boldsymbol{|a-b| - |c_i|}) \geq \frac{\boldsymbol{\tau_0 * |f(x_0)|}}{\boldsymbol{|f'(x_i)|}}, \qquad (17)$$

при $c_i = c_{i-1} + |x_{i-1} - x_{i-2}|$, $c_0 = 0$.

Из (17) получается условие (11). Теорема доказана.

Условие (11) значит, что метод (10) сильно зависит от значения $|f'(x_i)|$, это доказывает необходимость алгоритма, учитывающего её поведение.

Для контроля сходимости метода (9) предлагается ввести управляющий коэффициент, рассчитывающийся в зависимости от поведения функции на предыдущих итерациях:

$$\boldsymbol{\theta_i = x_0 - (x_0 - x_{i-1})\frac{f(x_0)}{f(x_0) - f(x_{i-1})}}. \tag{18}$$

Значение θ_i является решением уравнения прямой, проходящей через точки $f(x_0)$ и $f(x_{i-1})$ это позволяет использовать его для контроля значения $|f'(x_i)|$ в случае её уменьшения, что приводит к выполнению условия (11). Это позволяет привести следующий алгоритм:

$$\begin{gathered}\boldsymbol{\Delta x_i = x_{i-1} - \tau_i \frac{f(x_{i-1})}{f'(x_{i-1})}};\\ \boldsymbol{\vartheta = \left|\frac{f(x_0)*(x_0-\theta_i)}{f(x_{i-1})*(x_0-\Delta x_i)}\right|,\ 0 < \vartheta \le 2};\\ \boldsymbol{x_i = \theta_i + \frac{(\Delta x_i - \theta_i)}{2}\vartheta}.\end{gathered} \tag{19}$$

Алгоритм (19) способен обеспечивать устойчивую сходимость при достаточно малом τ_0 и применять его для расчёта x_i стоит только при условиях:

$$\begin{gathered}\boldsymbol{|f'(x_{i-1})| \le |f'(x_{i-2})|};\\ \boldsymbol{|x_{i-1} - \Delta x_i| > |x_{i-1} - \theta_i|};\\ \boldsymbol{\frac{f(x_{i-1})}{f(x_{i-2})} > 0}.\end{gathered} \tag{20}$$

Очевидно уменьшение значения $|x_{i-1} - x_i|$ по сравнению с (9), для этого алгоритма.

Алгоритм решения уравнения при условии

$$\boldsymbol{\frac{f(x_i)}{f(x_{i-1})} < 0}$$

Согласно Теореме 1 для этого случая необходим алгоритм, при котором выполнялось бы условие (8). В таком случае справедливо неравенство:

$$\boldsymbol{|x_i - x_{i-1}| > |x_i - x_{i+1}|}. \tag{21}$$

Подставив значение $\tau\left|\frac{f(x_i)}{f'(x_i)}\right|$ вместо $|x_i - x_{i+1}|$ в неравенство (21) мы получим:

$$\boldsymbol{|x_i - x_{i-1}| > \tau\left|\frac{f(x_i)}{f'(x_i)}\right|}. \tag{22}$$

Из чего следует:

$$\boldsymbol{\tau} < \frac{|\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_{i-1}|}{|\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_{i-1})\boldsymbol{f}'(\boldsymbol{x}_{i-1})^{-1}|}. \tag{23}$$

Очевидно, что выполнение условия (23) гарантирует выполнение условия (8) для значения x_{i+1}. Однако для значений следующих итераций, получаемых по методу (9), необходимо задать параметр *k*, обозначающий такое x_{i-1}, при котором последний раз выполнялось условие (4), и, в таком случае, выполнение условия:

$$\boldsymbol{\tau} < \frac{|\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{k}|}{|\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_i)\boldsymbol{f}'(\boldsymbol{x}_i)^{-1}|} \tag{24}$$

гарантирует сходимость метода (9) на участке $[x_n, k]$, где *n* – номер текущей итерации.

Применение метода Ньютона в случае выполнения условия (4) может столкнуться с такими проблемами, как зацикливание. В этом случае приближенное решение уравнения с заданной точностью не может быть получено, в принципе.

Теорема 3. При решении нелинейного уравнения (1) с помощью метода (9), при выполнении условия (4), показателем сходимости, является:

$$|\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}^*| \geq |\boldsymbol{x}_{i-1} - \boldsymbol{x}_i| - \boldsymbol{a}|\boldsymbol{x}_{i-2} - \boldsymbol{x}^*|^2; \tag{25}$$

$$\boldsymbol{0} < \boldsymbol{a} < \infty.$$

Доказательство

Согласно теореме Канторовича (2), сходимость метода (9) при условии (15) определяется неравенством :

$$|\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}^*| \leq \boldsymbol{a}|\boldsymbol{x}_{i-1} - \boldsymbol{x}^*|^2. \tag{26}$$

Настолько высокая скорость сходимости возможна, потому что выполняется условие:

$$[\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}^*] \subset [\boldsymbol{x}_{i-1}, \boldsymbol{x}^*]. \tag{27}$$

В этом случае очевидно, что в случае *(15)* для метода Ньютона будет верно равенство:

$$|\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}^*| = |\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_{i-1}| + |\boldsymbol{x}_{i-1} - \boldsymbol{x}^*|. \tag{28}$$

И при достаточно большом значении $\left|\frac{f(x_i)}{f'(x_i)}\right|$ очевидно:

$$|\boldsymbol{x}_{i-1} - \boldsymbol{x}^*| \ll |\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}^*|. \tag{29}$$

Согласно теореме 1 в случае применения метода (9) при условии (4):

$$\boldsymbol{x}^* \in [\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_{i-1}]. \tag{30}$$

При этом $x^* \neq x_i$ и $x^* \neq x_{i-1}$ и это значит, что:

$$[\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}^*] \not\subset [\boldsymbol{x}_{i-1}, \boldsymbol{x}^*]. \tag{31}$$

Из этого следует что погрешность приближенного решения x_i для алгоритма (9) при выполнении условия (4) можно выразить следующим образом:

$$|\boldsymbol{x_i - x^*}| = |\boldsymbol{x_i - x_{i-1}}| - |\boldsymbol{x_{i-1} - x^*}|. \tag{32}$$

Подставив (26) в (28) для значения $|x_{i-1} - x^*|$ мы получим:

$$|\boldsymbol{x_i - x^*}| \leq |\boldsymbol{x_i - x_{i-1}}| + \boldsymbol{a}|\boldsymbol{x_{i-2} - x^*}|^{\boldsymbol{2}}. \tag{33}$$

Аналогичным образом, использовав (26) для случая (32) мы получаем (25). Теорема доказана.

Выполнение неравенства (24) исключает расходимость метода (9) в случае (4) тем не менее, из-за небольшой скорости сходимости, выраженной неравенством (25), возможно выполнение условия $|k| = |x_{i+1}|$, в этом случае произойдёт зацикливание.

Настолько низкая скорость сходимости, возможна только при выполнении условия:

$$|\boldsymbol{x^* - x_{i+1}}| \approx |\boldsymbol{x^* - x_i}|. \tag{34}$$

На основе выполнения условия (25) и недопущения (34) возникает необходимость ввести алгоритм расчёта параметра γ, позволяющий контролировать размер величины $|k - x_{i+1}|$ при выполнении условия $\frac{f(k)}{f(x_{i+1})} > 0$ особенно он необходим, когда (24) не выполняется.

$$\boldsymbol{x_{i+1} = x_i - \gamma \frac{f(x_i)}{f'(x_i)}};$$

$$\boldsymbol{\gamma} = \mathbf{min}\,(\mathbf{0{,}8} * \frac{|\boldsymbol{x_i - k}|}{|\boldsymbol{f(x_i) f'(x_i)^{-1}}|}), \mathbf{1}). \tag{35}$$

Алгоритм (35) использует минимально возможное значение τ для выполнения условия (24), умноженное на 0.8, данное значение было наиболее эффективным в ходе ряда тестовых расчётов.

Так же стоить отметить возможность применения метода интерполяции по трём точкам, для определения значения τ. Коэффициенты квадратичной интерполяции вида $\varphi(x) = ax^2 + bx + c$, вычисляются по следующим формулам:

$$a = \frac{((f(x_i) - f(\text{ṃ}))(\text{k} - \text{ṃ}) - ((f(\text{k}) - f(\text{ṃ}))(x_i - \text{ṃ}))}{((x_i{}^2 - \text{ṃ}^2)(\text{k} - \text{ṃ}) - (\text{k}^2 - \text{ṃ}^2)(x_i - \text{ṃ}))};$$

$$b = \frac{(f(\text{k}) - f(\text{ṃ}) - a(\text{k}^2 - \text{ṃ}^2))}{(\text{k} - \text{ṃ})};$$

$$c = f(\text{ṃ}) - (a\text{ṃ}^2 + b\text{ṃ});$$

$$x_{*1} = \frac{b^2 + \sqrt{4ac}}{2a};$$

$$x_{*2} = \frac{b^2 - \sqrt{4ac}}{2a}.$$

Если $f'(\tau) < 0$ и $k < \tau < x_i$ или $f'(\tau) > 0$ и $k > \tau > x_i$, где τ точка в которой $\varphi(\tau) = 0$ тогда $\tau = x_{*1}$ иначе $\tau = x_{*2}$.

Алгоритм (35) обеспечивает лучшую сходимость при условии (4) по сравнению с методом (9) из-за особенностей поведения метода Ньютона при угрозе расходимости или зацикливания.

Примеры применения представленных алгоритмов

Алгоритм (19) обеспечивает лучшую сходимость в сравнении с методом (9) при малом значении производной на участке $[a, b]$. В таком случае коэффициент θ_i находится в области сходимости алгоритма (9), и это позволяет уменьшить $|x_{i-1} - x_i|$ таким образом что $x_i \in [\text{a}, \text{b}]$.

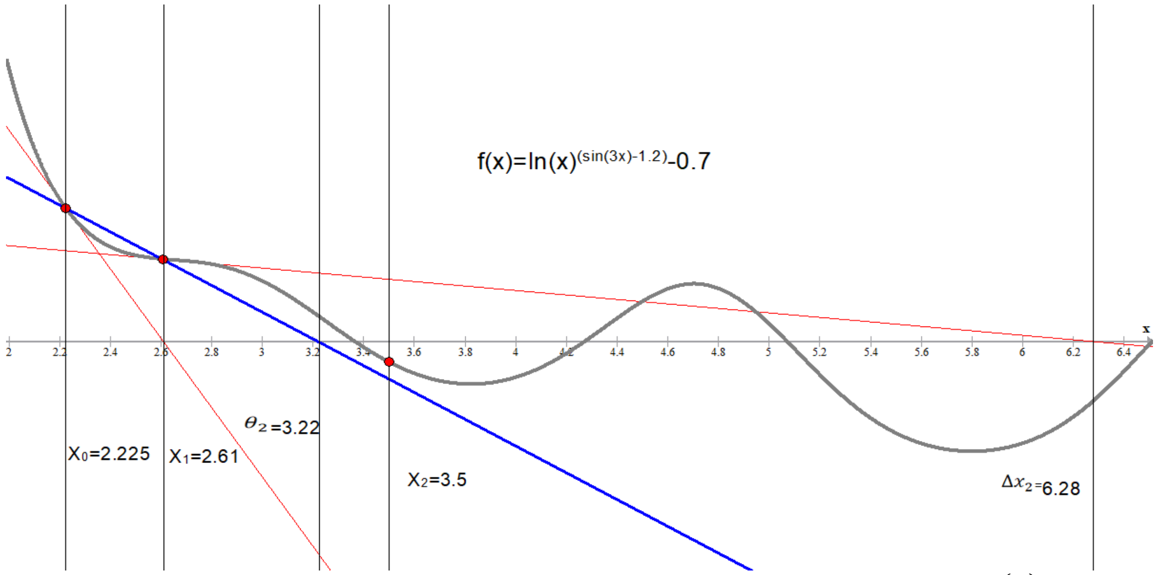

Рис. 1. Применение алгоритма (19) для решения уравнения при условии $\frac{f(x_i)}{f(x_{i-1})} > 0$

В случае $\frac{f(x_i)}{f(x_{i-1})} < 0$ применение алгоритма (9) может привести к зацикливанию или расходимости, на рисунке 2 приведён пример применения алгоритма (35), пунктирными линиями обозначены касательные проведённые с использованием алгоритма (9), применение алгоритма (35) гарантирует сходимость не более чем за 4 итерации.

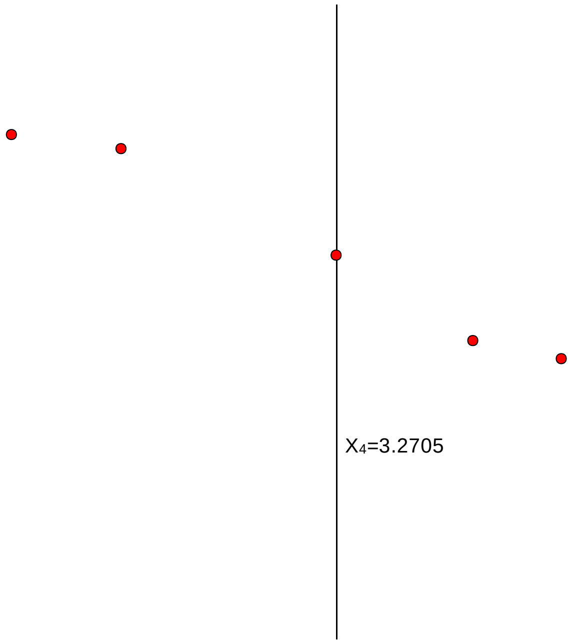

Рис. 2. Применение алгоритма (35) для решения уравнения при условии $\frac{f(x_i)}{f(x_{i-1})} < 0$

Заключение

В данной статье был рассмотрен процесс решения нелинейных уравнений при помощи непрерывного аналога метода Ньютона, на основе проведённых исследований были предложены модификации, позволяющие улучшить характеристики сходимости НАМН при задании подходящих значений для коэффициентов управления итерационным процессом решения нелинейных уравнений.

Список литературы

1. Nikonov E.G. One class of conservative difference schemes for solving molecular dynamics equations of motion. arXiv:1605.05714v1 [math.NA].
2. Бахвалов Н. С., Жидков Н. П., Кобельков Г. Г. Численные методы. 8-е издание (электронное. – БИНОМ. Лаборатория знаний, 2015.
3. Пирумов У. Г. Численные методы: учебное пособие для вузов по направлению «Прикладная математика» / У. Г. Пирумов. — 3-е изд., испр. — М.: Дрофа, 2004.
4. Гавурин М. К. Нелинейные функциональные уравнения и непрерывные аналоги итеративных методов [Текст]: Изв. Вузов\Гавурин М. К. — Матем., №5. — С. 18-31 (1958).
5. Жанлав Т., Пузынин И. В. О сходимости итераций на основе непрерывного аналога метода Ньютона // Вычисл. матем. и матем. физ. — 1992. — Том 32. — № 6. — С. 846-856.