Aplikace matematiky

Petr Liebl

# Přizpůsobení Newtonovy metody k dodatečným nerovnostem pro neznámé

*Aplikace matematiky*, Vol. 12 (1967), No. 6, 419--424

Persistent URL: http://dml.cz/dmlcz/103123

# PŘIZPŮSOBENÍ NEWTONOVY METODY K DODATEČNÝM NEROVNOSTEM PRO NEZNÁMÉ

PETR LIEBL

(Došlo dne 25. ledna 1967.)

**1.** Budeme se zabývat řešením soustavy $n$ rovnic o $n$ neznámých

$$f_i(x_1, x_2, \ldots, x_n) = 0\,, \quad i = 1, 2, \ldots, n\,, \tag{1}$$

o níž budeme předpokládat, že má v jisté oblasti právě jedno řešení. Je pak zřejmé, že v podstatě stejné řešení lze najít i řešením jiných soustav, vzniklých „přepsáním" soustavy (1) „do jiného tvaru". Tak například lze provést „záměnu závisle proměnných" použitím $n$ funkcí o $n$ proměnných

$$g_i(y_1, y_2, \ldots, y_n)\,, \quad i = 1, 2, \ldots, n\,,$$

kde všech $n$ funkcí $g_i$ má vlastnost

$$g_i(0, 0, \ldots, 0) = 0\,,$$
$$g_i(y_1, y_2, \ldots, y_n) \neq 0\,,$$

když alespoň jedno $y_j \neq 0$. Místo soustavy (1) lze pak řešit soustavu

$$g_i(f_1(x_1, \ldots, x_n), f_2(x_1, \ldots, x_n), \ldots, f_n(x_1, \ldots, x_n)) = 0\,, \quad i = 1, \ldots, n\,.$$

Jiná možnost je „záměna nezávisle proměnných", kde použijeme $n$ funkcí o $n$ proměnných

$$h_i(z_1, z_2, \ldots, z_n)\,, \quad i = 1, 2, \ldots, n$$

a řešíme soustavu

$$f_i(h_1(z_1, \ldots, z_n), h_2(z_1, \ldots, z_n), \ldots, h_n(z_1, \ldots, z_n)) = 0\,, \quad i = 1, \ldots, n\,. \tag{2}$$

Je-li pak $\bar{z}_1, \bar{z}_2, \ldots, \bar{z}_n$ řešení soustavy (2), je

$$\bar{x}_i = h_i(\bar{z}_1, \bar{z}_2, \ldots, z_n)\,, \quad i = 1, \ldots, n$$

řešením soustavy (1).

Přejdeme-li k vektorovému zápisu, přepíšeme soustavu (1) jako vektorovou rovnici

(3) $$f(\mathbf{x}) = 0\,,$$

kde $\mathbf{x}$ je sloupcový $n$-členný vektor o $i$-té složce $x_i$, a $f(\mathbf{x})$ je sloupcový vektor o $i$-té složce $f_i(x_1, x_2, \ldots, x_n)$. „Záměna nezávisle proměnných" je pak dána vektorovou funkcí $h(\mathbf{z})$, a soustava (2) přejde v rovnici

(4) $$p(\mathbf{z}) = f(h(\mathbf{z})) = 0\,.$$

**2.** Zabývejme se otázkou, jak taková „záměna proměnných" ovlivní postup řešení rovnice (3) Newtonovou metodou. Jeden iterační krok touto metodou je dán, jak známo, vztahy

(5) $$\mathbf{F}(\mathbf{x}^{(m)})\,\mathbf{d}^{(m)} = -f(\mathbf{x}^{(m)})\,,$$

(6) $$\mathbf{x}^{(m+1)} = \mathbf{x}^{(m)} + \mathbf{d}^{(m)}\,,$$

kde $\mathbf{F}(\mathbf{y})$ je matice parciálních derivací $\partial f_i / \partial x_j$, vzatých v bodě $\mathbf{y}$. Předpokládejme v dalším, že tyto parciální derivace existují a že $\det \mathbf{F}(\mathbf{x}^{(m)}) \neq 0$. Provedeme-li jeden krok Newtonovy metody se soustavou (4) místo se soustavou (3), řešíme místo soustavy lineárních rovnic (5) soustavu

(7) $$\mathbf{P}(\mathbf{z})\,\bar{\mathbf{d}} = -f(h(\mathbf{z}))\,,$$

kde $h(\mathbf{z}) = \mathbf{x}^{(m)}$ a $\mathbf{P}(\mathbf{t})$ je matice parciálních derivací funkcí $p_i$ podle proměnných $z_j$ v bodě $\mathbf{t}$, tedy

$$\mathbf{P}(\mathbf{z}) = \mathbf{F}(\mathbf{x}^{(m)})\,\mathbf{H}(\mathbf{z})\,,$$

kde $\mathbf{H}(\mathbf{z})$ je matice parciálních derivací funkcí $h_i$ podle proměnných $z_j$, o nichž budeme předpokládat, že existují. Lineární soustavu (7) je tedy možno psát jako

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}^{(m)})\,\mathbf{H}(\mathbf{z})\,\bar{\mathbf{d}} = -f(\mathbf{x}^{(m)})\,,$$

což vzhledem k (5) značí

$$\mathbf{H}(\mathbf{z})\,\bar{\mathbf{d}} = \mathbf{d}^{(m)}\,,$$

a tato soustava má pro $\det \mathbf{H}(\mathbf{z}) \neq 0$ jediné řešení. Předpokládáme-li také, že v okolí bodu $\mathbf{x}$ je funkce $h$ prostá a má tedy inverzní funkci $k = h^{-1}$, je krok Newtonovou metodou pak dokončen obdobou vztahu (6)

$$\mathbf{z}' = \mathbf{z} + \bar{\mathbf{d}}\,,$$

kde $\mathbf{z} = h^{-1}(\mathbf{x}^{(m)}) = k(\mathbf{x}^{(m)})$. Označíme-li $h(\mathbf{z}') = \tilde{\mathbf{x}}^{(m+1)}$, máme vztah

(8) $$\tilde{\mathbf{x}}^{(m+1)} = h(\mathbf{z} + \mathbf{H}^{-1}(\mathbf{z})\,\mathbf{d}^{(m)})\,,$$

který nahrazuje vztah (6). Všimněme si, že $\mathbf{d}^{(m)}$ značí v (6) i v (8) stejnou veličinu, totiž řešení lineární soustavy (5).

Vidíme, že rozhodnutí provést krok Newtonovou metodou na modifikované soustavě (4) místo na původní soustavě (3) značí pouze zaměnit vztah (6) vztahem (8) a není třeba „záměnu proměnných" skutečně provést.

Poznamenejme ještě, že za rozumných předpokladů

$$(9) \qquad |\tilde{\mathbf{x}}^{(m+1)} - \mathbf{x}^{(m+1)}| = O(|\mathbf{d}^{(m)}|^2),$$

Předpokládáme-li totiž, že funkce $h_i$ mají totální diferenciál v bodě $\mathbf{z}$, plyne z věty o přírůstku funkce vztah

$$|h(\mathbf{z} + \mathbf{t}) - h(\mathbf{z}) - \mathbf{H}(\mathbf{z})\,\mathbf{t}| = O(|\mathbf{t}|^2),$$

a tedy

$$|h(\mathbf{z} + \mathbf{H}^{-1}(\mathbf{z})\,\mathbf{d}^{(m)}) - h(\mathbf{z}) - \mathbf{H}(\mathbf{z})\,\mathbf{H}^{-1}(\mathbf{z})\,\mathbf{d}^{(m)}| =$$
$$= |\tilde{\mathbf{x}}^{(m+1)} - \mathbf{x}^{(m)} - \mathbf{d}^{(m)}| = O(|\mathbf{H}^{-1}(\mathbf{z})\,\mathbf{d}^{(m)}|^2) = O(|\mathbf{d}^{(m)}|^2).$$

**3.** Ukážeme, jak lze jednoduché záměny proměnných výhodně použít. Předpokládejme, že máme řešit soustavu (1) a že některé funkce $f_i$ mají smysl jen pro kladné hodnoty některých proměnných (které např. mají fyzikální význam tlaku, pravděpodobnosti nebo hmoty). Při použití Newtonovy metody s krokem (6) hrozí nebezpečí, že některý z prvních kroků zavede do „zakázané" oblasti, a výpočet je pak nutno přerušit, případně je třeba mít pohotově speciální postup pro takovýto případ. Zvolme tedy funkce $h_i$ tak, že pro ta $i$, kde $x_i$ má zůstat kladné, položíme

$$(10) \qquad h_i(z_1, \ldots, z_n) = e^{z_i},$$

zatímco pro ostatní $i$ jednoduše položíme

$$(11) \qquad h_i(z_1, \ldots, z_n) = z_i.$$

Protože každé $h$ závisí jen na svém $z$, je matice $\mathbf{H}(\mathbf{z})$ diagonální, s diagonálními prvky rovnými $e^{z_i}$ resp. 1, a inverzní matice $\mathbf{H}^{-1}(\mathbf{z})$ má diagonální prvky rovné $e^{-z_i}$ resp. 1. Pro složky vektoru $\tilde{\mathbf{x}}^{(m+1)}$ přejde (8) v případě (10) v

$$(12) \qquad \tilde{x}_i^{(m+1)} = \exp\left(\ln x_i^{(m)} + \frac{d_i^{(m)}}{x_i^{(m)}}\right) = x_i^{(m)} \exp\left(\frac{d_i^{(m)}}{x_i^{(m)}}\right),$$

resp. pro (11) je prostě

$$\tilde{x}_i^{(m+1)} = x_i^{(m)} + d_i^{(m)}.$$

Jiná možnost volby funkce $h$ by byla např. $h_i(z_1, \ldots, z_n) = z_i^2$, která vede pro $x_i^{(m)} > 0$ na vztah

$$\tilde{x}_i^{(m+1)} = \left(\sqrt{[x_i^{(m)}]} + \frac{d_i^{(m)}}{2\sqrt{[x_i^{(m)}]}}\right)^2 = x_i^{(m)} + d_i^{(m)} + \frac{d_i^{(m)2}}{4x_i^{(m)}}.$$

Je-li třeba udržet hodnotu $x_i$ v mezích $(-a, a)$, použijeme výhodně funkce $h_i(z_i) = 2a/\pi \operatorname{arctg} z_i$, pro kterou (8) přejde v

$$\tilde{x}_i^{(m+1)} = \frac{2a}{\pi} \operatorname{arctg}\left(\operatorname{tg}\frac{\pi x_i^{(m)}}{2a} + \frac{\pi d_i^{(m)}}{2a} \cos^{-2}\frac{\pi x_i^{(m)}}{2a}\right).$$

**4.** Uvedeného postupu bylo s dobrým výsledkem užito při řešení soustavy devíti částečně nelineárních rovnic pro tepelnou rovnováhu tlakové plynárny [1]. Proměnné jsou objemy plynů resp. teplota. Ukázalo se, že nahrazení vzorce (6) vzorcem (12) nejen zabrání přesáhnutí proměnných do záporných hodnot (tomu se dá mechanicky zabránit i jinak – např. položením

$$\tilde{x}_i^{(m+1)} = \max\left(\varepsilon, x_i^{(m)} + d_i^{(m)}\right),$$

kde $\varepsilon$ je nějaké malé kladné číslo), ale působí i jako pružný nárazník, který nedovolí hodnotám proměnných příliš se přiblížit nule. Opačné nebezpečí, že totiž některá iterace „vystřelí" daleko k vysokým hodnotám, je ovšem tímto postupem zvýšeno. V daném konkrétním případě se toto nebezpečí ukázalo jako nepodstatné; a kromě toho by bylo možno vhodnou modifikací funkcí $h_i$ (tak, aby jejich derivace při $z \to \infty$ klesala a ne stoupala jako u exponenciální funkce) vypořádat se i s tímto nebezpečím.

Poznamenejme, že výsledky odst. 1 a 2 lze vyložit i takto: Všechny způsoby určení nové aproximace $\tilde{\mathbf{x}}^{(m+1)}$, pro něž platí (9), kde $\tilde{\mathbf{x}}^{(m+1)}$ je určeno (5) a (6), jsou teoreticky rovnocenné, protože je lze chápat jako krok obvyklou Newtonovou metodou po jisté záměně nezávisle proměnných. Odst. 3 je možno chápat jako návod, jak při dodržení vztahu (9) volit různé vzorce pro $\tilde{\mathbf{x}}^{(m+1)}$, tak aby zůstaly zachovány jisté nerovnosti pro proměnné. Prakticky lze doporučit řídit se při sestavování rovnic (1) hledisky přehlednosti a jednoduchosti a dodržení určitých nerovností zajistit až pomocí vztahů pro novou aproximaci (8). Je dobře možné, že lze s výhodou užít prakticky i složitějších funkcí $h$, než zde bylo provedeno v odst. 3, zejména takových, kde některé $h_i$ je funkcí několika $z_j$ a matice $\mathbf{H}(\mathbf{z})$ již není diagonální.

## Резюме

## ПРИСПОСОБЛЕНИЕ МЕТОДА НЬЮТОНА К ДОПОЛНИТЕЛЬНЫМ НЕРАВЕНСТВАМ ДЛЯ ПЕРЕМЕННЫХ

ПЕТР ЛИБЛ (PETR LIEBL)

Исследуются изменения, которые внесены в формулы метода Ньютона, когда решаемая система уравнений

$$f_i(x_1, \ldots, x_n) = 0\,, \quad i = 1, \ldots, n$$

была прежде изменена подстановкой неизвестных

$$x_i = h_i(z_1, \ldots, z_n), \quad i = 1, \ldots, n.$$

Оказывается, что в таком случае в шаге метода линейная система для приращения $d_i^{(m)}$ переменных $x_i^{(m)}$

$$\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}^{(m)})\, \boldsymbol{d}^{(m)} = -f(\boldsymbol{x}_i^{(m)}),$$

где $\boldsymbol{F}(\mathbf{t})$ — матрица частных производных функций $f$, взятых в точке $\mathbf{t} = (t_1, \ldots, t_n)$, заменяется линейной системой

$$\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}^{(m)})\, \boldsymbol{H}(\mathbf{z})\, \bar{\boldsymbol{d}} = -f(h(\mathbf{z}))$$

для приращений $\tilde{d}_i$ переменных $z_i$, где $h(\mathbf{z}) = \boldsymbol{x}^{(m)}$ и $\boldsymbol{H}(\mathbf{z})$ — матрица частных производных функций $h_i$. Это можно использовать таким образом, что не проводя фактически подстановку в систему, имеем все выгоды из нее вытекающие. Так, например, когда новые переменные суть логарифмы старых, эта подстановка влечет за собой только замену обычной формулы

$$x_i^{(m+1)} = x_i^{(m)} + d_i^{(m)}$$

формулой

$$\tilde{x}_i^{(m+1)} = x_i^{(m)} \exp \frac{d_i^{(m)}}{x_i^{(m)}},$$

которая, по-видимому, сохраняет положительность переменных. Тем же способом можно вывести формулы, сохраняющие выполнение и других неравенств для переменных, причем каждую такую формулу можно понимать как шаг метода Ньютона для системы после определенной подстановки.

Этот прием дал удовлетворительные результаты, будучи применен к системе девяти уравнений, где переменные должны были остаться положительными.

## Summary

# ADAPTING THE NEWTON-RAPHSON METHOD TO ADDITIONAL INEQUALITIES FOR THE VARIABLES

Petr Liebl

In the paper we are investigating the effect of a substitution

$$x_i = h_i(z_1, \ldots, z_n), \quad i = 1, 2, \ldots, n$$

of new variables $z_i$ for the unknowns $x_i$ on the solution of a system of equations

$$f_i(x_1, \ldots, x_n) = 0, \quad i = 1, 2, \ldots, n$$

by the Newton-Raphson method. It is shown that, in one step of the method, it results in the solution of a system of linear equations

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}^{(m)})\,\mathbf{H}(\mathbf{z})\,\bar{\mathbf{d}} = -f(h(\mathbf{z}))\,,$$

where $h(\mathbf{z}) = \mathbf{x}^{(m)}$, $\mathbf{H}(\mathbf{t})$ is the matrix of the partial derivatives of the functions $h_i$ with respect to $z_j$ at the point $\mathbf{t}$, and

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}^{(m)})\,\mathbf{d}^{(m)} = -f(\mathbf{x}^{(m)})$$

is the linear system which is solved for the step of the Newton-Raphson method without that substitution. This suggests a convenient way of benefitting from a substitution without actually performing it. For instance if the new variables are the logarithms of the old ones, this results merely in replacing the usual formula for the new approximation

$$x_i^{(m+1)} = x_i^{(m)} + d_i^{(m)}$$

by

$$\tilde{x}_i^{(m+1)} = x_i^{(m)} \exp \frac{d_i^{(m)}}{x_i^{(m)}}$$

which is obviously useful in keeping the variables positive. In a similar manner other formulas which keep the variables within certain bounds can be derived. All of them may be understood as the ordinary Newton-Raphson formula for the original system modified by a substitution. Good practical results have been obtained with a system of nine equations where the unknowns must remain positive.

*Adresa autora: Petr Liebl*, Matematický ústav ČSAV, Žitná 25, Praha 1; t.č. Dept. of Mathematics, University of Ghana.