

# Aplikace matematiky

---

Petr Liebl

Přizpůsobení Newtonovy metody k dodatečným nerovnostem pro neznámě

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

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

## Terms of use:

© Institute of Mathematics AS CR, 1967

Institute of Mathematics of the Czech Academy of Sciences provides access to digitized documents strictly for personal use. Each copy of any part of this document must contain these *Terms of use*.



This document has been digitized, optimized for electronic delivery and stamped with digital signature within the project *DML-CZ: The Czech Digital Mathematics Library* <http://dml.cz>

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

$$(1) \quad f_i(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n,$$

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

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

kde všech  $n$  funkcí  $g_i$  má vlastnost

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

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

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

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

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

a řešíme soustavu

$$(2) \quad f_i(h_1(z_1, \dots, z_n), h_2(z_1, \dots, z_n), \dots, h_n(z_1, \dots, z_n)) = 0, \quad i = 1, \dots, n.$$

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

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

řešením soustavy (1).

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

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

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  $f_i(x_1, x_2, \dots, x_n)$ . „Záměna nezávisle proměnných“ je pak dána vektorovou funkcí  $h(\mathbf{z})$ , a soustava (2) přejde v rovnici

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

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

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

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

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

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

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

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

kteřý 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

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

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

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

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

$$(10) \quad h_i(z_1, \dots, z_n) = e^{z_i},$$

zatímco pro ostatní  $i$  jednoduše položíme

$$(11) \quad h_i(z_1, \dots, z_n) = z_i.$$

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

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

resp. pro (11) je prostě

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

Jiná možnost volby funkce  $h$  by byla např.  $h_i(z_1, \dots, z_n) = z_i^2$ , 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  $h_i(z_i) = 2a/\pi \arctg z_i$ , pro kterou (8) přejde v

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

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 vztorce (6) vztorcem (12) nejen zabrání přesáhnutí proměnných do záporných hodnot (tomu se dá mechanicky zabránit i jinak – např. položením

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

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  $z \rightarrow \infty$  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 vztorce 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

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

была прежде изменена подстановкой неизвестных

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

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

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

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

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

для приращений  $\bar{d}_i$  переменных  $z_i$ , где  $h(\mathbf{z}) = \mathbf{x}^{(m)}$  и  $\mathbf{H}(\mathbf{z})$  — 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

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

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

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

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.*