

МЕТОД НАХОЖДЕНИЯ ВСЕХ КОРНЕЙ СИСТЕМЫ НЕЛИНЕЙНЫХ АЛГЕБРАИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ, ОСНОВАННЫЙ НА ОПЕРАТОРЕ КРАВЧИКА

Аннотация. Предложен метод вычисления всех корней системы нелинейных уравнений в многомерном интервале. Основная идея метода состоит в разбиении исходного интервала поиска корней на подынтервалы, в каждом из которых либо отсутствуют корни, либо выполняется критерий единственности корня, основанный на операторе Кравчика (Krawczyk). Приведен алгоритм, выполняющий такое разбиение. Работа алгоритма проиллюстрирована на примерах.

Ключевые слова: система нелинейных уравнений, локализация корней, оператор Кравчика.

ВВЕДЕНИЕ

Многие прикладные задачи приводят к решению систем нелинейных алгебраических уравнений (СНАУ) вида

$$\begin{cases} f_1(x_1, \dots, x_n) = 0, \\ f_2(x_1, \dots, x_n) = 0, \\ \dots \\ f_n(x_1, \dots, x_n) = 0 \end{cases} \quad (1)$$

в некотором n -мерном интервале $D = [a_1; b_1] \times \dots \times [a_n; b_n]$. Полагаем, что функции $f_k(x_1, \dots, x_n) \in C^{(2)}(D)$, $k = 1, \dots, n$, т.е. дважды дифференцируемы на интервале D . Будем также использовать векторное представление системы (1)

$$F(x) = 0, \quad x = (x_1, x_2, \dots, x_n).$$

К таким задачам относятся, например, поиск точек экстремумов функции, приближенное решение нелинейных дифференциальных и интегральных уравнений, определение параметров акустических сигналов, исследование устойчивости динамических систем и др. Система (1) может иметь более одного корня.

Известны различные методы поиска одного корня системы нелинейных уравнений (1) [1, 2]. Большинство этих методов — модификации метода Ньютона (см., например, исторический обзор в [1]). Однако более сложной проблемой является нахождение всех корней системы (1), т.е. задача выделения подмножеств, содержащих один корень системы. Первые результаты в этом направлении были получены в 60-х годах вследствие развития аппаратных и программных средств вычислительной техники. Появились алгоритмы и программные пакеты, работающие с существенными нелинейностями и большим числом переменных. Ниже приведены некоторые сформировавшиеся подходы к решению СНАУ.

- Основная идея методов branch-and-bound (ветвей и границ) состоит в рекурсивном разбиении (разветвлении) исходной области поиска корней на меньшие подобласти, в каждой из которых проверяется наличие/отсутствие корней (подробные структуры branch-and-bound алгоритмов приведены, например, в [3]). Результатом такого разбиения является список \mathcal{D} подобластей, в каждой из которых есть только один корень, а также список \mathcal{R} подобластей, в которых ситуация неопределенна. Очевидно, что более «качественным» будет алгоритм, имеющий меньший размер списка \mathcal{R} .

Часто методы branch-and-bound применяют вместе с методами интервальной арифметики. Аппарат интервальной арифметики впервые детально был представлен в 1962 г. в работе Мура [4]. Позднее появились различные методы поиска всех корней системы нелинейных уравнений, использующие аппарат интервальной арифметики (см. обзор в [3]). В частности, получил распространение оператор Кравчика, который рассматривается в данной статье.

- Основной областью применения гомотопных методов являются полиномиальные системы. Базисом для данных методов служит теорема Бернштейна, устанавливающая связь между числом комплексных нулей отображения F в области D и его топологической степенью. На ее основе находят решения полиномиальных систем методами «гомотопного продолжения» (homotopy continuation или path following). Недостатком этих методов является их применимость к поиску только комплексных корней, хотя часто необходимо определение действительных корней. Так, топологическая степень отображения $f(z) = z^2 + 10^{-20}$ относительно точки $z = 0$ равна двум, но действительных нулей данная функция не имеет. В то же время эти методы дают возможность проверки наличия вырожденных и плохо обусловленных корней. Однако вычисление топологической степени обычно связано с вычислением поверхностного интеграла и является более сложным подходом по сравнению, например, с методами интервальной арифметики, применяемыми в методах branch-and-bound.

- Метод, предложенный Деллнитцем в работе [5], основан на рассмотрении метода Ньютона как динамической системы. При этом локализация корней системы нелинейных уравнений осуществлялась путем поиска инвариантов данных динамических систем.

- Подход Каловича [6] зиждется на использовании разработанного им аппарата «исключающих» функций.

- Ямамура [7] использовал проверку отсутствия решения в некоторой области, основанную на анализе задачи линейного программирования, допустимое множество которой содержит все нули рассматриваемой системы уравнений. Данная методология по своей конструкции предназначена для решения систем, в которых число нелинейных слагаемых весьма мало по сравнению с числом линейных слагаемых.

- Родственный подход предложен в работе Булатова [8]. Задача поиска всех нулей СНАУ заменена вспомогательной задачей нелинейного программирования, допустимое множество которой включает все искомые корни. При этом не приводились оценки сложности метода и конкретные численные примеры.

- В статье [9] для отделения корней предложен так называемый ε -алгоритм, использующий аппарат ε -сетей.

- В работах [10–12] приведены методы, основанные на проверке невырожденности якобиана, а также теореме Канторовича.

Многообразие методов объясняется тем, что решаемые задачи отличаются числом уравнений, характером нелинейности, гладкостью рассматриваемых функций, информацией о местоположении корней и т.д. Вследствие этого не существует универсальных подходов к решению таких задач.

В данной статье предложенные в [10–12] методы совершенствуются за счет использования оператора Кравчика в качестве критерия наличия/отсутствия корней.

КРИТЕРИЙ ЕДИНСТВЕННОСТИ КОРНЯ

Группа критериев единственности корня в некоторой области D сформировалась вследствие попыток показать сходимость метода Ньютона без начальной

информации о наличии корня. Первый результат в этой области был получен в 1829 г. Коши [1], который сформулировал достаточные условия наличия корня функции $f(x)$, $x \in \mathbb{R}$, на некотором одномерном отрезке $D = [a, b]$.

Первый «многомерный» результат, когда $D = \mathbb{R}^n$, получен в 1916 г. Файном [13]. Однако наиболее известный и обобщающий результат в этом направлении сформулирован в 1948 г. Канторовичем [14].

Теорема 1. Обозначим M_2 константу Липшица матрицы Якоби $F'(x)$ отображения $F(x)$ на интервале $D = [a_1; b_1] \times \dots \times [a_n; b_n]$, т.е.

$$\|F'(x^{(1)}) - F'(x^{(2)})\| \leq M_2 \|x^{(1)} - x^{(2)}\| \quad \forall x^{(1)}, x^{(2)} \in D.$$

Пусть для некоторой точки $x^{(0)} \in D$ существуют константы B и η такие, что

$$\|[F'(x^{(0)})]^{-1}\| \leq B; \|[F(x^{(0)})]^{-1}F(x^{(0)})\| \leq \eta; B\eta M_2 \leq 0.5.$$

Введем обозначения $r_{1,2} = 2\eta / (1 \pm \sqrt{1 - 2B\eta M_2})$. Тогда отображение F имеет корень в пересечении $D \cap S(x^{(0)}, r_1)$, причем в пересечении $D \cap S(x^{(0)}, r_2)$ он единственный.

Критерий Кравчика наличия корней. Принципиально новые возможности для проверки наличия корней открыли теоремы, основанные на аппарате интервальной арифметики, впервые детально разработанном в 1962 г. в работе Мура [4]. Одним из фундаментальных понятий интервальной арифметики является оператор Кравчика, который для n -мерного интервала $D = [a_1; b_1] \times \dots \times [a_n; b_n]$ определяется как

$$\mathbf{K}(D) = x^{(0)} - CF(x^{(0)}) + (I - CF(x^{(0)}, D))(D - x^{(0)}), \quad (2)$$

где $x^{(0)} \in D$, $F(x)$ — вектор-функция левой части системы (1), $\mathbf{F}(x^{(0)}, D)$ — интервальное приращение (slope) [15] отображения F на n -мерном интервале D относительно точки $x^{(0)}$. Интервальное приращение определяется следующим образом. Сначала зададим функцию приращения $F(x^{(0)}, x)$ как

$$F(x) - F(x^{(0)}) = F(x^{(0)}, x)(x - x^{(0)}). \quad (3)$$

Матрица $\mathbf{F}(x^{(0)}, D)$ является интервальным расширением [15] функции $F(x^{(0)}, x)$ на интервале D . Это означает, что каждый элемент матрицы представляет собой одномерный интервал, содержащий диапазон значений соответствующего элемента матрицы $F(x^{(0)}, x)$.

Матрица C выбирается как $C = [F'(x^{(0)})]^{-1}$. При этом все действия в формуле (2) выполняются по правилам интервальной арифметики [15]. Ключевым результатом здесь является теорема Мура [16].

Теорема 2. Пусть образ оператора Кравчика входит в интервал D , $D = [a_1; b_1] \times \dots \times [a_n; b_n]$:

$$\mathbf{K}(D) \subset D. \quad (4)$$

Тогда система (1) имеет в D единственный корень.

Очевидное преимущество оператора Кравчика по сравнению с теоремой Канторовича заключается в том, что не вычисляется константа Липшица для матрицы Якоби. В [17] показано, что тест Кравчика (4) определяет наличие корня в более широком интервале D по сравнению с теоремой Канторовича.

КРИТЕРИЙ ОТСУТСТВИЯ КОРНЕЙ

В данной работе используем критерий отсутствия корней на интервале $D = [a_1; b_1] \times \dots \times [a_n; b_n]$, предложенный в [10].

Теорема 3. Пусть $f_k(x_1, \dots, x_n) \in C^{(1)}(D)$, $k = 1, \dots, n$, и справедливы ограничения

$$\left| \frac{\partial f_k}{\partial x_i} \right| \leq M_{ki}, \quad i, k = 1, \dots, n. \quad (5)$$

Тогда если для некоторого m выполнено условие

$$|f_m(x^{(0)})| > \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n M_{mi} (b_i - a_i), \quad (6)$$

где $x^{(0)} = [0.5(a_1 + b_1), 0.5(a_2 + b_2), \dots, 0.5(a_n + b_n)]$, то система (1) не имеет корней в D .

Другой способ проверки отсутствия корней основан на операторе Кравчика (2). Как утверждалось, например, в [17], достаточным условием наличия корня является вложенность образа оператора Кравчика в исходный интервал (соотношение (4)). Отсюда следует теорема.

Теорема 4. Пусть образ оператора Кравчика имеет пустое пересечение с интервалом D :

$$\mathbf{K}(D) \cap D = \emptyset. \quad (7)$$

Тогда система (1) не имеет корней в D .

АЛГОРИТМ ЛОКАЛИЗАЦИИ КОРНЕЙ

Назначение алгоритма. Локализовать и вычислить все корни системы (1) в интервале $D = [a_1; b_1] \times \dots \times [a_n; b_n]$.

Входные данные. Формулы вычисления функций $f_k(x_1, \dots, x_n)$, $k = 1, \dots, n$, и оператора Кравчика (2); константы M_{ki} в ограничениях (5); ε — минимальный размер анализируемого интервала.

Выходные данные. Список \mathcal{D} интервалов, включающих изолированные корни системы (1); список интервалов \mathcal{R} размером менее ε , содержащих все остальные корни.

Алгоритм локализации корней

В начале работы алгоритма выполняется присвоение $D_0 = D$.

Шаг 1. Если размер D_0 меньше ε , интервал D_0 заносится в список \mathcal{R} .

Шаг 2. Проверяются условия (6) и (7). Если хотя бы одно из них выполнено, интервал D_0 исключается из рассмотрения.

Шаг 3. Проверяется условие (4). Если оно выполнено, интервал D_0 заносится в список \mathcal{D} . Значение корня уточняется одним из итеративных методов, например методом Ньютона. Начальным значением для уточнения корня является точка $x^{(0)}$, использовавшаяся при проверке (4).

Шаг 4. Интервал D_0 заменяется $\mathbf{K}(D_0) \cap D_0$.

Шаг 5. Если ни одно из упомянутых условий не выполнено, D_0 разбивается на две части ($D_{0,1}$ и $D_{0,2}$) следующим образом. Пусть индекс k_0 соответствует наибольшей стороне интервала D_0 , т.е. $k_0 = \arg \max_k \{b_k - a_k\}$. Тогда

$$D_{0,1} = [a_1; b_1] \times \dots \times [a_{k_0}; 0.5(a_{k_0} + b_{k_0})] \times \dots \times [a_n; b_n],$$
$$D_{0,2} = [a_1; b_1] \times \dots \times [0.5(a_{k_0} + b_{k_0}); b_{k_0}] \times \dots \times [a_n; b_n].$$

Для каждой части выполняются шаги 1–4.

ПРИМЕРЫ

Т а б л и ц а 1

Пример 1. Рассмотрим поиск приближенных решений нелинейного интегрального уравнения, описанного в [9]. Данная задача сводится к решению системы нелинейных уравнений, каждое из которых представляет собой квадратичную форму относительно вектора неизвестных коэффициентов $x = [x_1, \dots, x_n]$:

Размерность n задачи (8)	Число корней	Число разбиений	Время, с
2	2	15	0.03
3	2	14	0.05
4	2	14	0.08
5	2	14	0.14
10	2	14	0.8
15	2	14	2.7
20	2	14	6
25	2	17	15
30	2	17	25

$$f_k(x) = (A_k x, x) + (b_k, x) + c_k, \quad k = 1, \dots, n. \quad (8)$$

Значения матриц A_i , векторов b_i и свободных коэффициентов c_i известны априорно. Поиск корней осуществлялся на n -мерном интервале $[-10; 10] \times \dots \times [-10; 10]$.

Покажем, как вычислять интервальное приращение (3) для функций (8). Из тождества

$$f_k(x) - f_k(x^{(0)}) = (x + x^{(0)})A_k(x - x^{(0)}) + (b_k, x - x^{(0)})$$

следует выражение для k -й строки интервального приращения

$$\{F(x^{(0)}, D)\}_k = \left[\min_{x \in D} A_k x, \max_{x \in D} A_k x \right] + A_k x^{(0)} + b_k^T.$$

В табл. 1 отражена зависимость количества разбиений при решении системы (8) от размерности задачи n . Приводится также время работы алгоритма в вычислительной среде MATLAB®. Для каждого n были найдены два корня системы (8).

Как видно из таблицы, число разбиений слабо растет при увеличении размерности задачи n . Заметим, что алгоритм, предложенный в работе [10], не позволял осуществлять вычисления за приемлемое время (в пределах 1 ч) для размерностей $n \geq 8$.

Пример 2. Рассмотрим систему уравнений, описывающую нелинейную цепь из n туннельных диодов [7]:

$$g(x_i) + x_1 + x_2 + \dots + x_n - i = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n,$$

где

$$g(x_i) = 2.5x_i^3 - 10.5x_i^2 + 11.8x_i. \quad (9)$$

Покажем, как вычислять интервальное приращение (3) для функций (9). Запишем тождество

$$\begin{aligned} f_k(x) - f_k(x^{(0)}) &= \\ &= (2.5(x_k^2 + x_k x_k^{(0)} + (x_k^{(0)})^2) - 10.5(x_k + x_k^{(0)}) + 11.8)(x_k - x_k^{(0)}) + \sum_{m=1}^n (x_m - x_m^{(0)}). \end{aligned}$$

Отсюда вытекает, что матрица интервального приращения (3) заполнена интервалами $[1, 1]$, за исключением диагональных элементов, которыми являются следующие интервалы:

$$\begin{aligned} F(x^{(0)}, D)_{k,k} &= [\min_{x_k \in D_k} (2.5x_k^2 + (x_k^{(0)} - 10.5)x_k), \max_{x_k \in D_k} (2.5x_k^2 + (x_k^{(0)} - 10.5)x_k)] + \\ &+ 2.5(x^{(0)})^2 - 10.5x^{(0)} + 12.8. \end{aligned}$$

В табл. 2 представлена зависимость количества разбиений при решении задачи (9) от размерности задачи n . Приводится также время выполнения алгоритма в вычислительной среде MATLAB®.

Таблица 2

Размерность n задачи (9)	Число корней	Число разбиений	Время, с
2	1	36	0.04
3	1	109	0.18
4	3	324	0.8
5	5	918	4
6	5	2747	17
7	7	7995	73
8	7	23537	308

Пример 3. Рассмотрим поиск нулей полинома с действительными коэффициентами:

$$f(z) = a_1 z^p + a_2 z^{p-1} + a_3 z^{p-2} + \dots + a_p z + a_{p+1}.$$

Подразумевая $z = x_1 + ix_2$, ищем корни эквивалентной системы 2×2

$$\begin{cases} \operatorname{Re}(f(z)) = 0, \\ \operatorname{Im}(f(z)) = 0 \end{cases}$$

на некотором двумерном интервале $[a_1, b_1] \times [a_2, b_2]$.

Покажем, как вычислять интервальное приращение для полинома. Запишем тождество

$$f(z) - f(z_0) = G(z_0, z)(z - z_0),$$

где коэффициенты полинома $G(z_0, z)$ относительно z можно найти по рекуррентным формулам

$$g_1 = a_1; g_k = z_0 g_{k-1} + a_k, \quad k = 2, \dots, p.$$

Для подсчета матрицы интервального расширения нужно оценить диапазон значений $G(z, z_0)$. Используя методику, предложенную в [11, 12], получаем

$$|G(z_0, z)| \leq |G(z_0, z_0)| + \sum_{k=1}^{p-1} \frac{|G^{(k)}(z_0, z_0)| l^k}{k!} \quad \forall z \in D. \quad (10)$$

Обозначим правую часть (10) как M :

$$M = |G(z_0, z_0)| + \sum_{k=1}^{p-1} \frac{|G^{(k)}(z_0, z_0)| l^k}{k!} \quad \forall z \in D. \quad (11)$$

Заметим, что

$$\frac{G^{(k)}(z_0, z_0)}{k!} = \frac{f^{(k+1)}(z_0)}{(k+1)!}.$$

Подставляя эти соотношения в (11), получаем выражение для M :

$$M = |f'(z_0)| + \sum_{k=1}^{p-1} \frac{|f^{(k+1)}(z_0)| l^k}{(k+1)!} \quad \forall z \in D.$$

Отсюда следует

$$\begin{aligned} \operatorname{Re}(G(z_0, z)) &\in \mathbf{I}_1, \quad \mathbf{I}_1 = [\operatorname{Re}(f'(z_0)) - M, \operatorname{Re}(f'(z_0)) + M], \\ \operatorname{Im}(G(z_0, z)) &\in \mathbf{I}_2, \quad \mathbf{I}_2 = [\operatorname{Im}(f'(z_0)) - M, \operatorname{Im}(f'(z_0)) + M]. \end{aligned}$$

Таким образом, в качестве интервального расширения матрицы приращения можно использовать интервальную матрицу

$$\mathbf{F}(x^{(0)}, D) = \begin{pmatrix} \mathbf{I}_1 & -\mathbf{I}_2 \\ \mathbf{I}_2 & \mathbf{I}_1 \end{pmatrix}$$

(операция инвертирования интервала выполняется в соответствии с правилами интервальной арифметики).

Рассмотрим пример из работы [12]. Необходимо найти нули полинома

$$f(z) = z^{50} + z^{12} - 1 \quad (12)$$

на интервале $[-1, 1] \times [-1, 1]$.

Применение предложенного алгоритма для $n = 50$ потребовало 1589 разбиений исходного интервала, т.е. меньше по сравнению с методом работы [12], основанным на теореме Канторовича (1665 разбиений). В результате локализованы все 50 корней уравнения (12). Разбиение исходного множества поиска корней показано на рис. 1. Пустые прямоугольники не содержат корней, а найденные корни отмечены жирными точками внутри соответствующих прямоугольников.

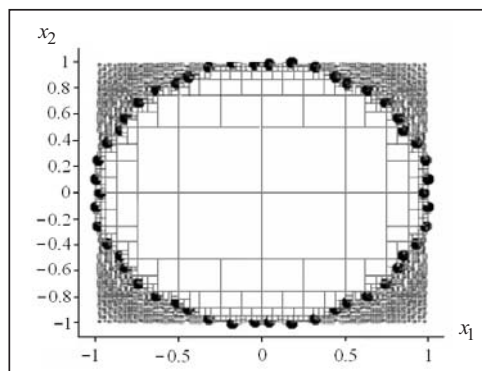


Рис. 1. Графическое изображение примера работы алгоритма при локализации корней уравнения (12)

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Рассмотрен ряд существующих методов локализации всех корней СНАУ. В развитие ранее предложенных методов представлен метод локализации корней, использующий оператор Кравчика. На различных примерах показано, что данный метод имеет преимущество по сравнению с методами, основанными на анализе якобиана [10] и теореме Канторовича [12].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Yamamoto T. Historical developments in convergence analysis for Newton's and Newton-like methods // J. Comput. Appl. Math. — 2000. — **124**. — P. 1–23.
2. Деннис Дж., Шнабель Р. Численные методы безусловной оптимизации и решения нелинейных уравнений. — М.: Мир, 1988. — 440 с.
3. Kearfott R. B. Empirical evaluation of innovations in interval branch and bound algorithms for nonlinear algebraic systems // SIAM J. Sci. Comput. — 1997. — **18**, N 2. — P. 574–594.
4. Moore R. E. Interval arithmetic and automatic error analysis in digital computing: Ph.D. Thesis. — Stanford Univ., 1962.
5. Dellnitz M., Shutze O., Serfl S. Finding zeros by multilevel subdivision techniques // IMA J. Numer. Anal. — 2002. — **22**, N 2. — P. 167–185.
6. Kalovics F. Box valued functions in solving systems of equations and inequalities // Numerical Algorithms. — 2004. — **36**. — P. 1–12.
7. Yamamura K., Fujioka T. Finding all solutions of nonlinear equations using the dual simplex method // SIAM J. Numer. Anal. — 1977. — **14**. — P. 611–615.
8. Булатов В. П. Численные методы поиска всех решений систем нелинейных уравнений // Журнал вычисл. математики и мат. физики. — 2000. — **40**, № 3. — С. 348–355.
9. Бабич М. Д., Шевчук Л. Б. Об одном алгоритме приближенного решения систем нелинейных уравнений // Кибернетика. — 1982. — № 2. — С. 75–79.
10. Семенов В. Ю. Метод нахождения всех действительных некротных корней системы нелинейных уравнений // Журнал вычисл. математики и мат. физики. — 2007. — № 9. — С. 1486–1493.
11. Semenov V. Method for the calculation of all non-multiple zeros of an analytic function // Comput. Methods Appl. Math. — 2011. — **11**, N 1. — P. 67–74.
12. Semenov V. Method for the calculation of all zeros of an analytic function based on the Kantorovich theorem // Comput. Methods Appl. Math. — 2014. — **14**, N 3. — P. 385–392.
13. Fine H. B. On Newton's method of approximation // Proc. Nat. Acad. Sci. USA. — 1916. — **2**. — P. 546–552.
14. Канторович Л. В. О методе Ньютона для функциональных уравнений // Докл. АН СССР. — 1948. — **59**. — С. 1237–1240.
15. Kearfott R. B. Rigorous global search: continuous problems. — Dordrecht: Kluwer Acad. Publ., 1996. — 264 p.
16. Moore R. E. A test for existence of solutions to nonlinear systems // SIAM J. Numer. Anal. — 1977. — **14**. — P. 611–615.
17. Neumaier A., Zuhe S. The Krawczyk operator and Kantorovich theorem // J. Math. Anal. Appl. — 1990. — **149**, N 2. — P. 437–443.

Поступила 27.02.2015