

Глава 13. НЕКОТОРЫЕ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ АЛГОРИТМЫ, ИСПОЛЬЗУЮЩИЕ ПРОИЗВОДНЫЕ

13.1. Решение нелинейных уравнений и систем методом простой итерации

Рассмотрим уравнение, записанное в специальном виде

$$x = f(x), \quad (13.1.1)$$

где f – непрерывно дифференцируемая функция из \mathbb{R} в \mathbb{R} .

Теорема 1. Если $|f'(x)| \leq q < 1$ при всех $x \in \mathbb{R}$, то

- 1) уравнение (13.1.1) имеет единственное решение (обозначим его \tilde{x});
- 2) для любого $x_0 \in \mathbb{R}$ последовательность

$$x_1 = f(x_0), \dots, x_k = f(x_{k-1}), \dots \quad (13.1.2)$$

сходится к \tilde{x} ;

- 3) $|x_k - \tilde{x}| \leq q^k \cdot |x_0 - \tilde{x}|$.

Доказательство. Заметим для начала, что по формуле Лагранжа (п.10.2) для всех $x, y \in \mathbb{R}$

$$|f(x) - f(y)| = |f'(\xi) \cdot (x - y)| \leq q \cdot |x - y| \quad (13.1.3)$$

(здесь ξ – некоторая точка между x и y).

Докажем *существование* решения. Если $f(0) = 0$, то доказывать нечего. Если $f(0) \neq 0$, то из (13.1.3) имеем $|f(x) - f(0)| \leq q \cdot |x|$ или

$$f(0) - q \cdot |x| - x \leq f(x) - x \leq f(0) + q \cdot |x| - x. \quad (13.1.4)$$

При $\hat{x}_1 = |f(0)|/(1 - q) > 0$ правая часть неравенства (13.1.4) даст

$$f(\hat{x}_1) - \hat{x}_1 \leq f(0) + (q - 1) \cdot |f(0)|/(1 - q) = f(0) - |f(0)| < 0.$$

При $\hat{x}_2 = -|f(0)|/(1 - q) < 0$ левая часть неравенства (13.1.4) даст

$$f(\hat{x}_2) - \hat{x}_2 \geq f(0) + (1 - q) \cdot |f(0)|/(1 - q) = f(0) + |f(0)| > 0.$$

Итак, $(f(\hat{x}_2) - \hat{x}_2) \cdot (f(\hat{x}_1) - \hat{x}_1) < 0$, и теорема Коши (п.9.2) гарантирует существование хотя бы одного решения уравнения $f(x) - x = 0$ на сегменте $[\hat{x}_2, \hat{x}_1]$.

Теперь докажем *единственность* решения. Если \tilde{x}_1 и \tilde{x}_2 – два решения уравнения (13.1.1), то

$$|\tilde{x}_1 - \tilde{x}_2| = |f(\tilde{x}_1) - f(\tilde{x}_2)| \leq q \cdot |\tilde{x}_1 - \tilde{x}_2| \implies |\tilde{x}_1 - \tilde{x}_2| \cdot (1 - q) \leq 0 \implies |\tilde{x}_1 - \tilde{x}_2| = 0.$$

Далее, для любого $x_0 \in \mathbb{R}$ значения последовательности (13.1.2) удовлетворяют неравенству

$$|x_k - \tilde{x}| = |f(x_{k-1}) - f(\tilde{x})| \leq q \cdot |x_{k-1} - \tilde{x}| \leq \dots \leq q^k \cdot |x_0 - \tilde{x}|,$$

т.е. итерации сходятся к единственному решению уравнения не медленнее, чем геометрическая прогрессия со знаменателем q .

Замечания. 1. Отображение, удовлетворяющее условию (13.1.3), называется *сжимающим отображением* или *сжатием*. Из доказательства теоремы видно, что ее утверждение верно для любого сжимающего отображения $\mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$. Выполнение условия $|f'(x)| \leq q < 1$ гарантирует, что f – сжатие. Решение уравнения (13.1.1) называется *неподвижной точкой* отображения f .

2. Условие $|f'(x)| \leq q < 1$ нельзя заменить условием $|f'(x)| < 1$. Приведем простой пример.

Если $f(x) = (x^2 + 1)^{1/2}$, то $f'(x) = \frac{x}{(x^2 + 1)^{1/2}}$. Поскольку $|x| < (x^2 + 1)^{1/2}$, то $|f'(x)| < 1$. Однако уравнение $x = (x^2 + 1)^{1/2}$, очевидно, не имеет решений.

Практическая ценность доказанной теоремы невелика – ограничения, накладываемые на функцию f , слишком жесткие. Поэтому на практике удобной оказывается следующая *локальная* ее модификация.

Теорема 2. Пусть \tilde{x} – решение уравнения (13.1.1), причем $|f'(\tilde{x})| < 1$. Тогда существует такая окрестность точки \tilde{x} , что при x_0 , взятом из этой окрестности, последовательность (13.1.2) сходится к \tilde{x} .

Доказательство. Пусть $|f'(\tilde{x})| = q < 1$. В силу непрерывности f' существует такая окрестность точки \tilde{x} , в которой $|f'(x)| \leq \tilde{q} = \frac{1+q}{2} < 1$. Если взять x_0 из этой окрестности и построить последовательность (13.1.2), то

$$|x_1 - \tilde{x}| = |f(x_0) - f(\tilde{x})| \leq \tilde{q} \cdot |x_0 - \tilde{x}|.$$

Отсюда следует, что x_1 лежит в этой же окрестности. Поэтому

$$|x_2 - \tilde{x}| \leq \tilde{q} \cdot |x_1 - \tilde{x}| \leq \tilde{q}^2 \cdot |x_0 - \tilde{x}|, \text{ и т.д.}$$

Таким образом, если $|f'(\tilde{x})| < 1$, то итерационный процесс (13.1.2), начатый из любой точки, *лежащей в некоторой окрестности точки \tilde{x} (решения уравнения)*, сходится к этому решению. Неподвижную точку отображения f называют в этом случае *точкой притяжения* итерационного процесса (13.1.2).

Если же \tilde{x} – решение уравнения (13.1.1), но $|f'(\tilde{x})| > 1$, то в некоторой окрестности точки \tilde{x} имеем $|f'(x)| > 1$ и взяв $x_0 \neq \tilde{x}$ из этой окрестности, получим

$$|x_1 - \tilde{x}| = |f(x_0) - f(\tilde{x})| = |f'(\xi) \cdot (x_0 - \tilde{x})| > |x_0 - \tilde{x}|.$$

Теперь последовательность итераций "выталкивается" из окрестности точки \tilde{x} (решения уравнения). Таковую неподвижную точку отображения f называют *точкой отталкивания* итерационного процесса (13.1.2).

Пример. Пусть $f(x) = \exp(ax)$, ($a > 0$). Уравнение $x = \exp(ax)$ имеет при $a < 1/e$ два решения (рис. 13.1). При этом $0 < f'(x_1) < 1$, $f'(x_2) > 1$, т.е. x_1 – точка притяжения, а x_2 – точка отталкивания итерационного процесса. В этом нетрудно убедиться, выполнив несколько шагов (хотя бы с помощью микрокалькулятора).

Если функция f имеет обратную, то неподвижные точки f являются и неподвижными точками f^{-1} . Из формулы для производной обратной функции (п.8.2) следует, что

$$(f^{-1})'(\tilde{x}) = \frac{1}{f'(f^{-1}(\tilde{x}))} = \frac{1}{f'(\tilde{x})}.$$

Видно, что точки отталкивания функции f будут точками притяжения для функции f^{-1} . Найдите x_2 , преобразовав уравнение $x = \exp(ax)$ к виду $x = \frac{\ln(x)}{a}$.

Замечание. При $a = 1/e$ решения уравнения сливаются (рис. 13.2), причем $f'(\tilde{x}) = 1$. В этом случае теорема не работает. Можно показать, что при $x_0 < \tilde{x} = e$ последовательность (13.1.2) в этом примере сходится к \tilde{x} , а при $x_0 > \tilde{x} = e$ – нет. При $a > 1/e$ уравнение решений не имеет.

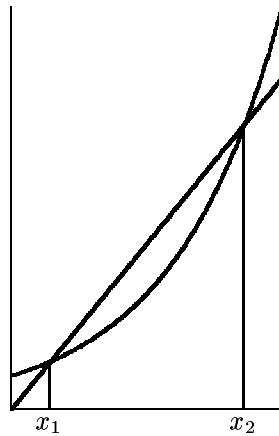


Рис. 13.1

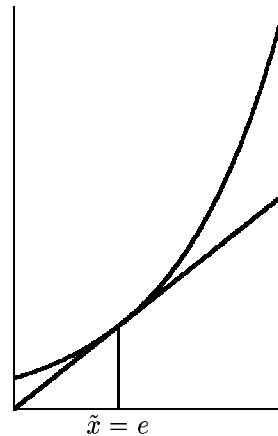


Рис. 13.2

По аналогии с уравнением (13.1.1) рассмотрим систему уравнений специального вида

$$x = F(x), \quad x \in \mathbb{R}^n, \quad F: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n. \quad (13.1.5)$$

Можно показать, что справедлив следующий аналог теоремы 1:

Теорема 1'. Пусть $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ – непрерывно дифференцируемое векторное поле, и для любого $x \in \mathbb{R}^n$ $\|F'(x)\| \leq q < 1$ (здесь $\|\cdot\|$ – норма матрицы). Тогда

- 1) система (13.1.5) имеет единственное решение (обозначим его \tilde{x});
- 2) для любого $x^{(0)} \in \mathbb{R}^n$ последовательность

$$x^{(1)} = F(x^{(0)}), \dots, x^{(k)} = F(x^{(k-1)}), \dots \quad (13.1.6)$$

сходится к \tilde{x} ;

$$3) \|x^{(k)} - \tilde{x}\| \leq q^k \cdot \|x^{(0)} - \tilde{x}\|.$$

Пример. Пусть $F(x) = Ax + b$, A – квадратная матрица порядка n , $b \in \mathbb{R}^n$. Поскольку $F'(x) = A$, теорема в этом случае совпадает с известной из курса линейной алгебры теоремой о сходимости метода простой итерации.

Замечание. Условия теоремы гарантируют, что отображение является сжатием. Можно показать, что любое сжимающее отображение \mathbb{R}^n в себя имеет единственную неподвижную точку. Это утверждение справедливо и для всех конечномерных нормированных пространств.

Также можно показать, что для систем справедлив следующий аналог теоремы 2:

Теорема 2'. Пусть непрерывно дифференцируемое отображение $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ имеет неподвижную точку \tilde{x} и $\|F'(\tilde{x})\| < 1$. Тогда \tilde{x} – точка притяжения итерационного процесса (13.1.6), т.е. существует такая окрестность точки \tilde{x} , что для любого $x^{(0)}$ из нее последовательность (13.1.6) сходится к этой точке.

Замечания. 1. Теоремы 2 и 2' обладают двумя общими недостатками: во-первых, необходимо знать заранее, что неподвижная точка есть; во-вторых, неизвестна окрестность, в которой следует брать начальное приближение.

2. В многомерном случае нет простого способа превратить точку отталкивания в точку притяжения (переходом к обратной функции). Хотя матрица $(F^{-1})'(\tilde{x})$ обратна матрице $F'(\tilde{x})$, но из того, что $\|A\| > 1$ вовсе не следует, что $\|A^{-1}\| < 1$!

13.2. Метод Ньютона для решения нелинейных уравнений и систем

Начнем с рассмотрения одного уравнения

$$f(x) = 0. \quad (13.2.1)$$

Пусть \tilde{x} – решение этого уравнения, $x_0 \in \mathbb{R}$ – произвольная точка и $f'(x_0) \neq 0$.

Запишем левую часть уравнения (13.2.1) по формуле Тейлора:

$$f(x_0) + f'(x_0) \cdot (x - x_0) + \frac{f''(\xi)}{2} \cdot (x - x_0)^2 = 0$$

и отбросим остаточный член. Получим *линейное* уравнение

$$f(x_0) + f'(x_0) \cdot (x - x_0) = 0, \quad (13.2.2)$$

решение которого обозначим x_1 :

$$x_1 = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)}.$$

Если точка \tilde{x} лежит достаточно близко к x_0 , то остаточный член формулы Тейлора мал по сравнению с ее первыми слагаемыми, и можно ожидать, что решения уравнений (13.2.2) и (13.2.1), т.е. точки x_1 и \tilde{x} будут мало отличаться друг от друга. Это наводит на мысль, что последовательность

$$x_1 = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)}, \dots, x_k = x_{k-1} - \frac{f(x_{k-1})}{f'(x_{k-1})}, \dots \quad (13.2.3)$$

должна сходиться к \tilde{x} .

Действительно, рассмотрим уравнение

$$x = \phi(x) \equiv x - \frac{f(x)}{f'(x)}, \quad (13.2.4)$$

которое равносильно (13.2.1), если $f'(\tilde{x}) \neq 0$.

Так как

$$\phi'(x) = 1 - \frac{(f'(x))^2 - f(x) \cdot f''(x)}{(f'(x))^2} = \frac{f(x) \cdot f''(x)}{(f'(x))^2},$$

то $\phi'(\tilde{x}) = 0$ и по теореме 2 из п.13.1 \tilde{x} – точка притяжения итерационного процесса (13.2.3), т.е. последовательность (13.2.3) действительно сходится к решению уравнения, *если начальное приближение взято достаточно близко к решению*.

Алгоритм, основанный на итерациях по формулам (13.2.3), называют алгоритмом Ньютона¹

Замечания. 1. Мы доказали сходимость алгоритма Ньютона, предполагая наличие у функции второй производной. Можно показать, что для сходимости достаточно существования лишь непрерывной первой производной и отличия ее от нуля в точке-решении.

2. Естественно, знание того факта, что искомое решение \tilde{x} есть точка притяжения итерационного процесса (13.2.3), ничего нам не говорит об окрестности, в которой этот процесс сходится. Однако алгоритм Ньютона обладает приятным свойством: он сходится не всюду, но если уж сходится, то обычно очень быстро. Это дает возможность проводить машинный эксперимент: брать различные начальные приближения x_0 и смотреть, сходится ли последовательность итераций.

Пример. Решить уравнение $f(x) = \arctg(x) = 0$. Итерационная формула принимает вид

$$x_k = x_{k-1} - \frac{\arctg(x_{k-1})}{\arctg'(x_{k-1})} = x_{k-1} - (1 + x_{k-1}^2) \cdot \arctg(x_{k-1}).$$

Попробуйте выполнить несколько итераций, начиная с $x_0 = 1$, а затем – с $x_0 = 1.5$.

Геометрическая интерпретация метода Ньютона очень проста: уравнение $y = f(x_0) + f'(x_0) \cdot (x - x_0)$ определяет касательную к графику функции f в точке x_0 . Поэтому замена уравнения (13.2.1) уравнением (13.2.2) означает, что мы вместо точки пересечения с осью абсцисс графика функции берем точку пересечения с осью абсцисс касательной к этому графику (рис. 13.3). Поэтому метод Ньютона называют также *методом касательных*.

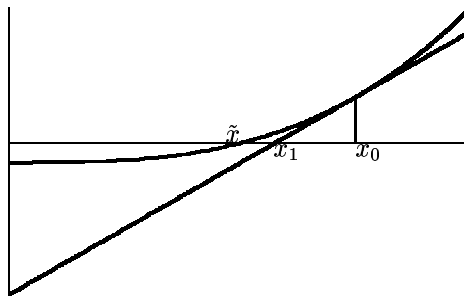


Рис. 13.3

Перейдем теперь к рассмотрению системы уравнений

$$F(x) = \theta_n, \quad (13.2.5)$$

где $x \in \mathbb{R}^n$, $F: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ – векторное поле. Будем действовать аналогично случаю одного уравнения.

Пусть \tilde{x} – решение системы (13.2.5). Если матрица $F'(\tilde{x})$ не вырождена, то в некоторой окрестности точки \tilde{x} система (13.2.5) равносильна системе

$$x = \psi(x) \equiv x - (F'(x))^{-1} \cdot F(x).$$

¹Исаак НЬЮТОН (1643-1727) – крупнейший английский математик, физик и астроном, президент Лондонского Королевского общества, член Парижской АН, один из основателей (наряду с Г.В. Лейбницем) математического анализа. Ньютону принадлежит современная формулировка законов классической механики и закона всемирного тяготения, а также важнейшие открытия в оптике.

Как и в случае одного уравнения можно показать, что $\psi'(\tilde{x}) = \Theta_n$ (нуль-матрица размера $n \times n$). Поэтому $\|\psi'(\tilde{x})\| = 0$, и по теореме 2' из п.13.1 решение \tilde{x} является точкой притяжения итерационного процесса

$$x^{(k)} = x^{(k-1)} - \left(F'(x^{(k-1)})\right)^{-1} \cdot F(x^{(k-1)}). \quad (13.2.6)$$

Замечания. 1. Конечно, не следует на каждом шаге алгоритма обращать матрицу $F'(x^{(k-1)})$. Следует просто решить линейную систему $F'(x^{(k-1)}) \cdot y = F(x^{(k-1)})$ и положить $x^{(k)} = x^{(k-1)} - y$.

2. Матрица Якоби ψ' существует лишь при наличии *второй* производной (матрицы Гессе) у векторного поля F . Однако, как и в случае одного уравнения, для сходимости итерационного процесса (13.2.6) достаточно существования непрерывной первой производной этого поля (при условии, конечно, что начальное приближение выбрано достаточно близко к решению). Остается также в силе замечание 2 к одномерной задаче.

13.3. Производная скалярного поля по направлению.

Метод градиентного спуска

Определение. Пусть $f : U \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ — непрерывно дифференцируемый функционал (скалярное поле), $e \in \mathbb{R}^n$, $\|e\| = 1$. Производной скалярного поля f в точке $a \in U$ по направлению вектора e называется число

$$D_e f(a) = \lim_{t \rightarrow 0+} \frac{f(a + te) - f(a)}{t}.$$

Запишем формулу Тейлора первого порядка для функции $\phi(t) = f(a + te)$

$$\phi(t) - \phi(0) = \phi'(t) = f'(a + \xi e) \cdot et \quad (\xi \in]0, t[). \quad \text{Отсюда}$$

$$D_e f(a) = \lim_{t \rightarrow 0+} \frac{f(a + te) - f(a)}{t} = \lim_{t \rightarrow 0+} \frac{f'(a + \xi e) \cdot et}{t} = f'(a) \cdot e = \langle \nabla f(a), e \rangle.$$

Таким образом, производная скалярного поля по направлению некоторого вектора равна проекции градиента этого поля на это направление.

Замечание. Если $e = e^{(k)}$ — вектор из стандартного базиса, то $D_e f(a) = D_k f(a)$ — частная производная функционала f в точке a по переменной x_k .

По неравенству Коши-Буняковского-Шварца

$$|\langle \nabla f(a), e \rangle| \leq \|\nabla f(a)\| \cdot \|e\| = \|\nabla f(a)\|.$$

Равенство достигается, когда \vec{e} коллинеарен $\overrightarrow{\nabla f(a)}$. При этом, если \vec{e} сонаправлен $\overrightarrow{\nabla f(a)}$, то $D_e f(a) = \|\nabla f(a)\|$, если же \vec{e} противонаправлен $\overrightarrow{\nabla f(a)}$, то $D_e f(a) = -\|\nabla f(a)\|$.

Таким образом, скалярное поле "быстрее всего возрастает" в направлении своего градиента и "быстрее всего убывает" в направлении своего антиградиента, т.е. вектора $-\nabla f(a)$. Производная скалярного поля по направлению, ортогональному градиенту, равна нулю.

Опишем теперь так называемый *метод градиентного спуска* — вычислительный алгоритм, позволяющий находить *локальные* экстремумы функционала. Для определенности будем считать, что мы ищем точки локального минимума (для поиска максимума следует просто заменить f на $(-f)$). Также предположим, как обычно, что функционал непрерывно дифференцируем на \mathbb{R}^n .

Алгоритм. 1. Взять произвольную точку $x^{(0)} \in \mathbb{R}^n$.

2. Вычислить $\nabla f(x^{(0)})$.

3. Если $\nabla f(x^{(0)}) = \theta_n$, то $x^{(0)}$ — стационарная точка. Если она является точкой минимума, то работа алгоритма окончена. Иначе следует взять новую начальную точку и перейти к п.2.

Если $\nabla f(x^{(0)}) \neq \theta_n$, то построить сужение f на луч с началом в точке $x^{(0)}$ и направляющим вектором $(-\nabla f(a))$:

$$\psi(t) = f(x^{(0)} - t \cdot \nabla f(x^{(0)})), \quad t \geq 0.$$

4. Выйдя из точки $x^{(0)}$, двигаться по лучу $x = x^{(0)} - t \cdot \nabla f(x^{(0)})$ до тех пор, пока функционал убывает, т.е. следует найти t_0 — *наименьший положительный* корень уравнения

$$\psi'(t) = 0 \quad \text{или} \quad -f'(x^{(0)} - t \cdot \nabla f(x^{(0)})) \cdot \nabla f(x^{(0)}) = 0.$$

Если это уравнение не имеет положительных корней, то работа алгоритма закончена – минимум не найден.

5. Заменить $x^{(0)}$ на $x^{(0)} - t_0 \cdot \nabla f(x^{(0)})$ и перейти к п.2.

Идея алгоритма чрезвычайно проста: на каждом его шаге движутся в направлении антиградиента (направлении наискорейшего убывания функционала) до тех пор, пока функционал убывает.

Конечно, алгоритм не гарантирует нахождение локального минимума, так как, во-первых, этот минимум может просто отсутствовать, а во-вторых, мы можем его „не там искать“. Однако обсуждение технических проблем выходит за рамки нашего курса.