非线性方程组数值解法实现

1 问题

非线性方程组的一般形式为

$$F(x)=0 \tag{1.1}$$

其中 $F(x)=(f_1(x),\ldots,f_n(x))^{\mathrm{T}}$，$x$ 是 n 维实向量，$F_i(x)$ 是 x 的实值函数，且至少有一个不是线性的，n 是正整数。

2 算法简介

2.1 Newton 法

设 $x^k=(x_1{}^k,\ldots,x_n{}^k)^{\mathrm{T}}$ 是方程组(1.1)的一个近似解，将 $F(x)=(f_1(x),\ldots,f_n(x))^{\mathrm{T}}$ 在 x^k 处展开可得

$$F(x)\approx F(x^k)+F'(x^k)(x-x^k)=0 \tag{2.1}$$

其中 $F'(x^k)$ 表示 $F(x)$ 在 x^k 处的 Jacobi 矩阵，方程(2.1)为方程(1.1)的局部线性化方程，假定矩阵 $F'(x^k)$ 非奇异，并设方程(2.1)的解为 x^{k+1}，则非线性方程组(1.1)求解的 Newton 迭代公式为

$$x^{k+1}=x^k-(F'(x^k))^{-1}F(x^k),\ k=0,1,2,\ldots \tag{2.2}$$

实际计算中采用下列公式避免求 $F'(x^k)$ 的逆：

$$\begin{cases}F'(x^k)\Delta x^k=-F(x^k),\\ x^{k+1}=x^k+\Delta x^k,\end{cases}\quad k=0,1,2,\ldots \tag{2.3}$$

2.2 Samaski-Newton 法

由于 Newton 法每迭代一步需要计算 n^2 个分量的偏导数和求一次矩阵的逆，其计算量是很

大的，如果将计算出的$F'(x^0)$用于以后的多次迭代，即令$F'(x^k)\equiv F'(x^0)$，这时的迭代公式(2.3)为

$$x^{k+1}=x^k-(F'(x^0))^{-1}F(x^k),\ k=0,1,2,\ldots \tag{2.4}$$

这个做法大大减少了计算量，但它以降低收敛速度为代价，只有线性收敛速度，一种策略是将 Newton 法与这种迭代结合起来，即把 m 步简化 Newton 步组成一次 Newton 迭代步，这就得到如下的迭代公式：

$$\begin{cases} x^{k,0}=x^k, \\ x^{k,i}=x^{k,i-1}-(F'(x^k))^{-1}F(x^{k,i-1}), \quad i=1,2,\ldots;k=0,1,2,\ldots \\ x^{k+1}=x^{k,m}, \end{cases} \tag{2.5}$$

从x^k到x^{k+1}时用简单 Newton 法迭代 m 次（实际计算中，一般只要 2~3 次即可），此方法又称为 Samaski 技巧，可以证明这种方法具有 m+1 阶收敛速度。

2.3 Gauss-Newton 法

通常我们也可将非线性方程组(1.1)转化为非线性最小二乘问题

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n}\frac{1}{2}\|F(x)\|_2^2 \tag{2.6}$$

来求解，Gauss-Newton 法是求解非线性最小二乘问题的基本方法，每次迭代把(2.6)转化为线性最小二乘问题：

$$\min_{d\in\mathbb{R}^n}\frac{1}{2}\|F(x^k)+F'(x^k)d\|^2 \tag{2.7}$$

如果$F'(x^k)^{\mathrm{T}}F'(x^k)$非奇异，则(2.7)的唯一解为$-(F'(x^k)^{\mathrm{T}}F'(x^k))^{-1}F'(x^k)^{\mathrm{T}}F(x^k)$，则 Gauss-Newton 法的迭代公式为

$$x^{k+1}=x^k-[F'(x^k)^{\mathrm{T}}F'(x^k)]^{-1}F'(x^k)^{\mathrm{T}}F(x^k) \tag{2.8}$$

如果 Jacobi 矩阵$F'(x)$Lipschitz 连续，且在非线性方程组的解处非奇异，则 Gauss-Newton 法是二次收敛的。

2.4 Levenberg-Marquardt 法

为了克服$F'(x^k)^{\mathrm{T}}F'(x^k)$奇异或坏条件所带来的困难，Levenberg-Marquardt 法引入了非负参数λ_k，每次迭代计算

$$x^{k+1}=x^k-[F'(x^k)^{\mathrm{T}}F'(x^k)+\lambda_k I]^{-1}F'(x^k)^{\mathrm{T}}F(x^k) \tag{2.9}$$

当 Jacobi 矩阵奇异时，正参数λ_k保证了$F'(x^k)^{\mathrm{T}}F'(x^k)+\lambda_k I$非奇异，从而 LM 法有意义，如果 Jacobi 矩阵 Lipschitz 连续，且在非线性方程组的解处非奇异，适当选取λ_k，LM 法是二次收敛的。

对于参数λ_k，当下降太快，使用较小的λ_k，使之更接近 Gauss-Newton 法，当下降太慢，使用较大的λ_k，使之更接近梯度下降法，在本问中选取$\lambda_k=\left\|F(x^k)\right\|$

2.5 牛顿同伦法

在求解非线性方程(1.1)的过程中，初值x^0与方程组的解x^*足够接近才能保证迭代序列的收敛，而在实际应用中很难快速找到这样的初值x^0，这时能够扩大收敛范围的同伦算法是一种很好的选择，其中数值延拓法首先引进参数t，并且构造同伦算子$H:[0,1]\times D\subset[0,1]\times\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}^n$代替原问题，使当$t=0$时$H(0,x)=x$存在一已知解$x^0$，使当$t=1$时$H(1,x)\equiv F\left(x\right)$，若方程

$$H(t,x)=0,\ t\in[0,1] \tag{2.10}$$

有解$x=x(t)$，则$x(1)$就是方程组(1.1)的解。

首先将区间$[0,1]$等分，划分为 N 个小区间段$0=t_0<t_1<\ldots<t_N=1$，此时同伦方程的解在t_k处的数值解为$x^k=x(t_k)$，用 Newton 法对这一过程求解，则迭代序列为

$$\begin{cases}x^{k,j+1}=x^{k,j}-[H_x(x^{k,j},t_k)]^{-1}H(x^{k,j},t_k),\ j=0,1,\ldots,j_k-1\\ x^{1,0}=x^0=x(0),x^{k,j}=x^k,\ k=0,1,\ldots,N-1.\end{cases} \tag{2.11}$$

又因为目的是求$t=1$时$x=x(1)$的数值，只需要找到足够近似的解即可，取$j_k=1$：

$$x^{k+1}=x^k-[H_x(x^k,\frac{k}{N})]^{-1}H(x^k,\frac{k}{N}),\ k=0,1,\dots,N-1. \tag{2.12}$$

求出 x^N 后，再结合 Newton 法有

$$x^{k+1}=x^k-[H_x(x^k,1)]^{-1}H(x^k,1),\ k=N,N+1,\dots \tag{2.13}$$

此处选用 Newton 同伦 $H(x,t)=F(x)+(t-1)F(x^0)$ 代入(2.12)和(2.13)得迭代公式：

$$\begin{cases} x^{k+1}=x^k-[F'(x^k)]^{-1}[F(x^k)+(\frac{k}{N}-1)F(x^0)],\ k=0,1,\dots,N-1 \\ x^{k+1}=x^k-[F'(x^k)]^{-1}F(x^k),\ k=N,N+1,\dots \end{cases} \tag{2.14}$$

其中 x^0 可为任意初值。由于 $N\to\infty$ 时总有通过数值延拓法解 Newton 同伦方程可求得足够接近精确解的初始近似 x^N，使得后半段 Newton 法收敛，所以(2.14)有大范围收敛性。

2.6 拟 Newton 法

设 $F:\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}^n$ 在开凸集 $D\subset\mathbb{R}^n$ 上连续可微，$F(x)$ 在 x^{k+1} 附近的一次近似为

$$F(x)\approx F(x^{k+1})+F'(x^{k+1})(x-x^{k+1})=0 \tag{2.15}$$

令 $x=x^k,s_k=x^{k+1}-x^k,y_k=F(x^{k+1})-F(x^k)$，则

$$F'(x^{k+1})s_k\approx y_{k+1} \tag{2.16}$$

当 $F(x)$ 是线性函数时，关系式(2.16)精确成立，现在我们要求在拟 Newton 法中构造 Jacobi 矩阵的近似矩阵 B_{k+1} 满足这种关系，即

$$B_{k+1}s_k=y_k \tag{2.17}$$

(2.17)被称为拟 Newton 条件，它表明矩阵 B_{k+1} 关于点 x^k,x^{k+1} 具有“差商”的性质。

算法实际实现步骤如下：

步 1 给出 $x^0\in\mathbb{R}^n$ 和 $B_0\in\mathbb{R}^{n\times n}$; $k=0$

步 2 如果 $\|F(x^k)\|<eps$，则停机；求解线性方程组

$$B_{k+1}d=-F(x^k) \tag{2.18}$$

得到拟 Newton 步 d_k

步 3 令 $x^{k+1}=x^k+d_k$，更新 B_{k+1} 使得(2.8)成立; $k=k+1$,转**步 2**

对 B^k 的更新，我们希望从 B_k 产生 B_{k+1}，即 $B_{k+1}=B_k+\Delta_k$，其中 Δ_k 是一个低秩矩阵。在秩 1 校正情形，有 Broyden 秩 1 校正公式：

$$B_{k+1}=B_k+\frac{(y_k-B_ks_k){s_k}^{\mathrm{T}}}{{s_k}^{\mathrm{T}}s_k} \tag{2.19}$$

在对称问题中，有秩 1 对称拟 Newton 校正公式：

$$B_{k+1}=B_k+\frac{(y_k-B_ks_k)(y_k-B_ks_k)^{\mathrm{T}}}{(y_k-B_ks_k)^{\mathrm{T}}s_k} \tag{2.20}$$

和常用的秩 2 的 BFGS 校正公式：

$$B_{k+1}=B_k-\frac{B_ks_k{s_k}^{\mathrm{T}}B_k}{{s_k}^{\mathrm{T}}B_ks_k}+\frac{y_k{y_k}^{\mathrm{T}}}{{y_k}^{\mathrm{T}}s_k} \tag{2.21}$$

3 数值实验

3.1 算例 1

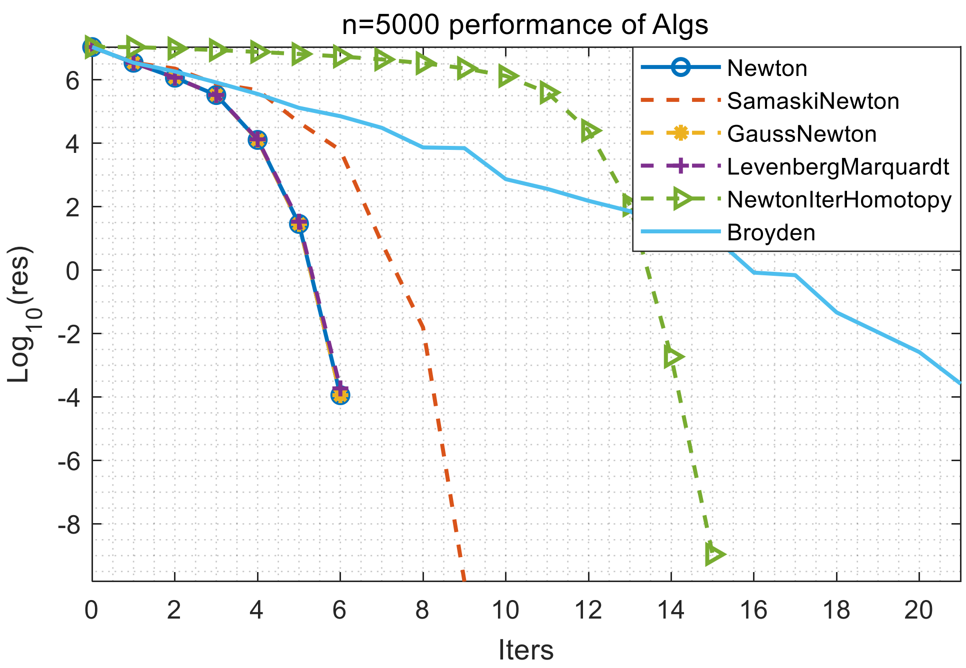
$$F(x)=(f_1(x),f_2(x),\ldots,f_n(x))^{\mathrm{T}}$$

其中

$$f_j(x)=(\sum_{i=1}^{n}{x_i}^2+j)(x_j-1)+x_j\sum_{i\neq j}x_i-n+1,\ j=1,2,\ldots,n$$

本测试函数的 Jacobi 矩阵稠密且 $x^*=(1,1,\ldots,1)^{\mathrm{T}}$ 是其精确解，Jacobi 矩阵在 x^* 附近也是严格对角占优的，这里我们选取初始迭代点 $x_0=(-3,3,-3,3,\ldots)^{\mathrm{T}}$，计算精度为 ε=10^{-6}，最小迭代步长 $\varepsilon'=\frac{\varepsilon}{10}$ 最大迭代步数 $k=1000$

方程组维数 n	Newton		Samaski-Newton		Gauss-Newton	
	迭代次数 k	运行时间/s	迭代次数 k	运行时间/s	迭代次数 k	运行时间/s
100	6	0.008317	9	0.005465	6	0.008772
500	6	0.053977	9	0.056372	6	0.076075
1000	6	0.252276	9	0.229399	6	0.330792
方程组维数 n	LevenbergMarquardt		牛顿同伦		Broyden	
	迭代次数 k	运行时间/s	迭代次数 k	运行时间/s	迭代次数 k	运行时间/s
100	6	0.008169	14	0.014368	20	0.015601
500	6	0.080956	14	0.103136	20	0.153546
1000	6	0.392836	14	0.514611	20	0.579232



在不同的方程组维数下，各算法均收敛。

3.2 算例 2

$$F(x) = (f_1(x), f_2(x), \ldots, f_n(x))^{\mathrm{T}}$$

其中

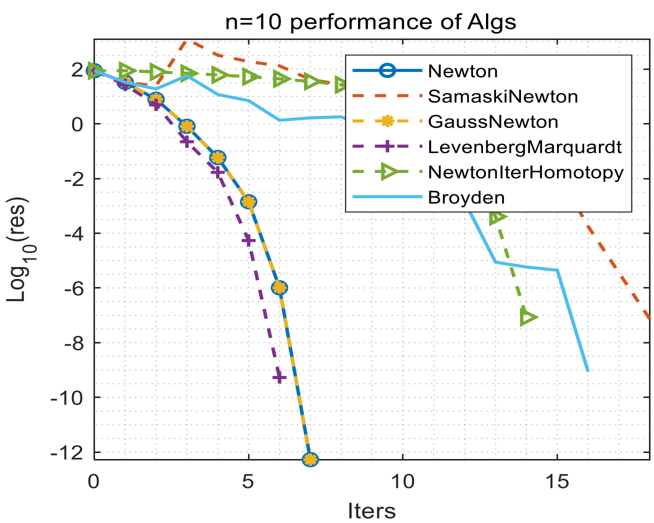
$$f_1(x)=\sum_{i=1}^{n}x_i^2-n$$

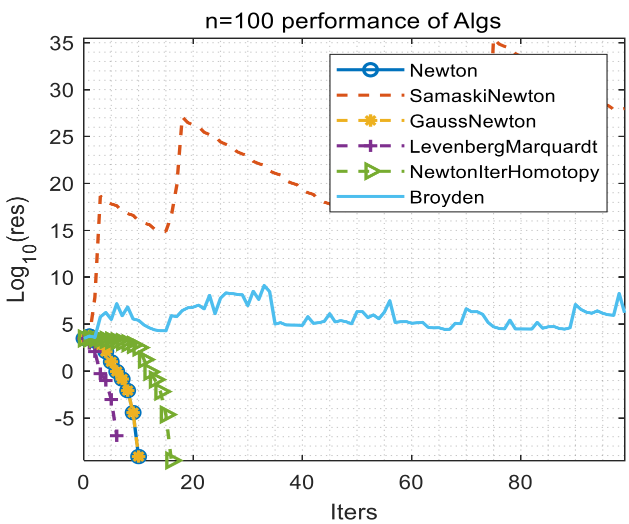
$$f_j(x)=(\sum_{i=1}^{n}x_i^2+1)(x_j-1)+x_j\sum_{i\neq j}x_i-n+1,\ j=2,\dots,n$$

本测试函数的 Jacobi 矩阵稠密且 $x^*=(1,1,\dots,1)^{\mathrm{T}}$ 是其精确解，这里我们分别选取初始迭代点 $x_0=(0,2,0,2,\dots)^{\mathrm{T}}$、$x_0=(-10,5,-10,5,\dots)^{\mathrm{T}}$，$x_0=(-10,30,-10,30,\dots)^{\mathrm{T}}$，计算精度为 ε=10^{-6}，最小迭代步长 $\varepsilon'=\dfrac{\varepsilon}{10}$ 最大迭代步数 $k=1000$

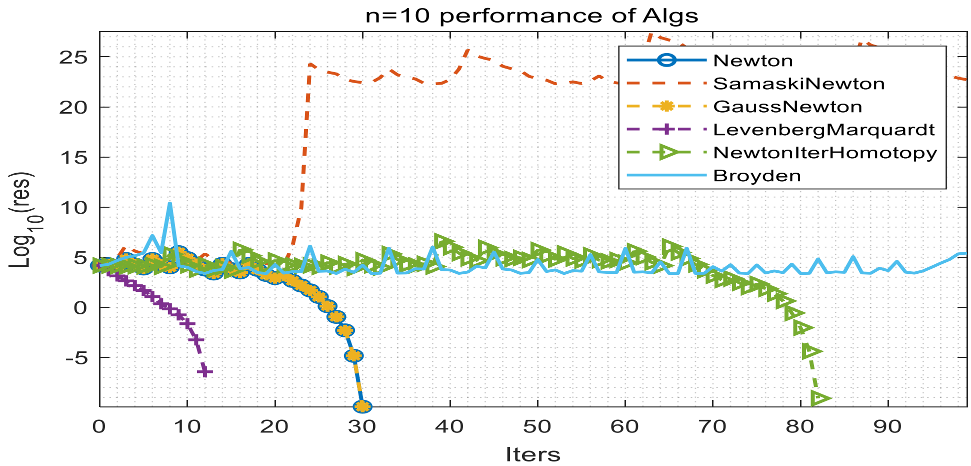
取 $x_0=(0,2,0,2,\dots)^{\mathrm{T}}$ 时：

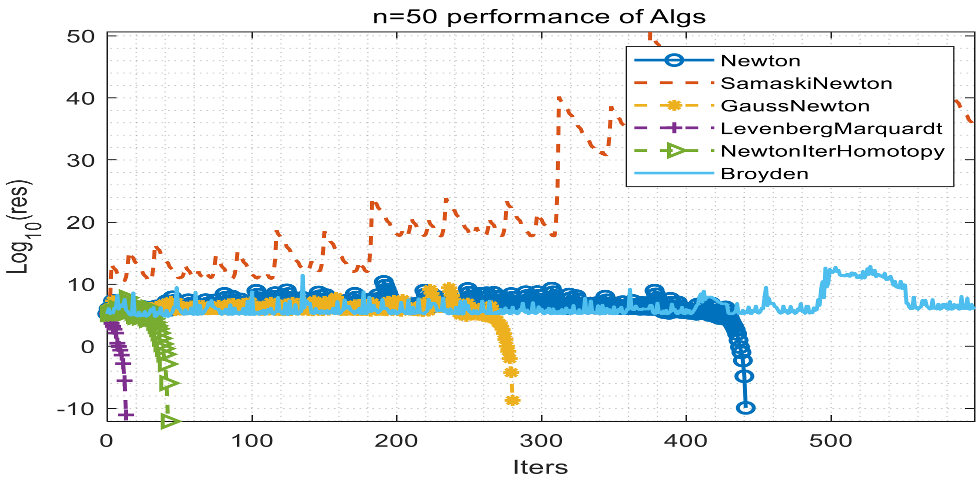
方程组维数 n	Newton		Samaski-Newton		Gauss-Newton	
	迭代次数 k	运行时间/s	迭代次数 k	运行时间/s	迭代次数 k	运行时间/s
10	7	0.055320	18	0.011439	7	0.009887
100	9	0.010643	不收敛		9	0.009550
1000	10	0.009409			10	0.004430
方程组维数 n	LevenbergMarquardt		牛顿同伦		Broyden	
	迭代次数 k	运行时间/s	迭代次数 k	运行时间/s	迭代次数 k	运行时间/s
10	6	0.010755	14	0.009687	16	0.016495
100	6	0.007106	15	0.007886	不收敛	
200	6	0.004831	16	0.006501		





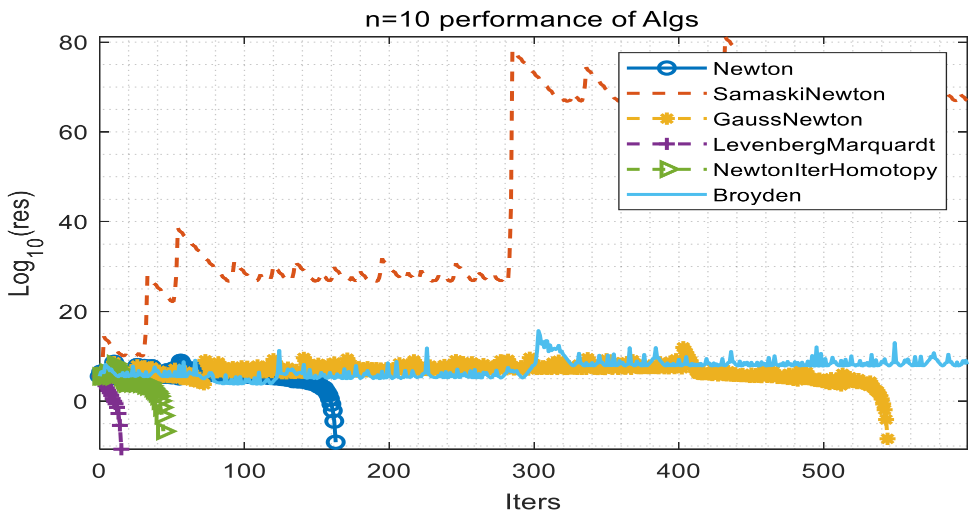
取 $x_0 = (-10, 5, -10, 5, \ldots)^{\mathrm{T}}$ 时：





其中 Samaski-Newton 法和 Broyden 法均不收敛，其他算法收敛。

取 $x_0 = (-10, 30, -10, 30, \ldots)^{\mathrm{T}}$ 时：



其中 Samaski-Newton 法和 Broyden 法均不收敛，其他算法收敛。

3.3 算例 3：Extended Powell Singular Function

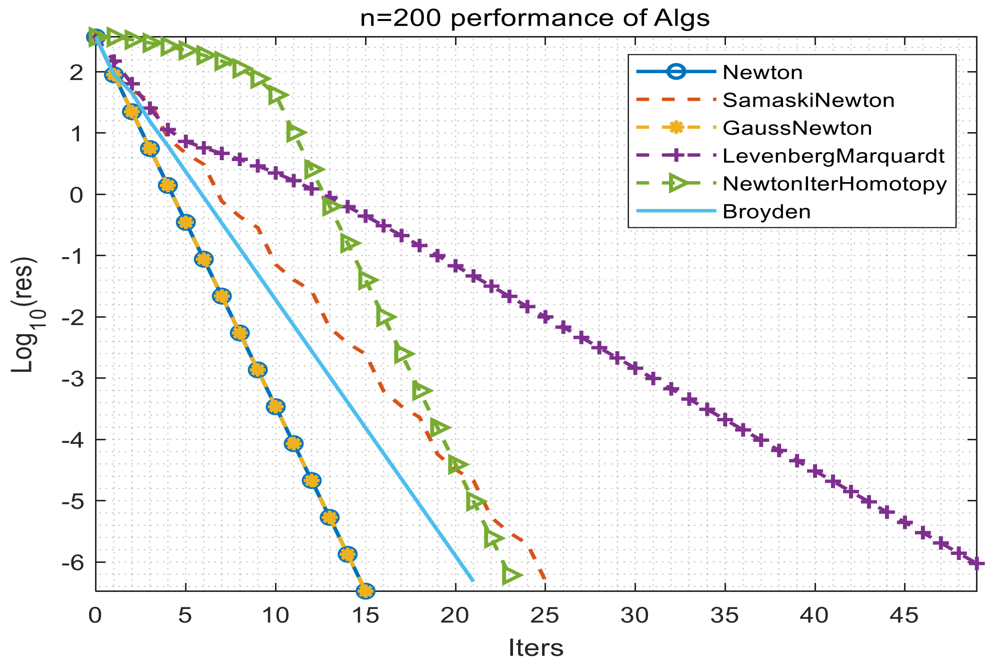
$$F(x)=(f_1(x),f_2(x),\dots,f_n(x))^{\mathrm{T}}$$

其中

$$\begin{cases} f_{4t-3}(x)=x_{4t-3}+10x_{4t-2}, \\ f_{4t-2}(x)=\sqrt{5}(x_{4t-1}-x_{4t}), \\ f_{4t-1}(x)=(x_{4t-2}-2x_{4t-1})^2, \\ f_{4t}(x)=\sqrt{10}(x_{4t-3}-x_{4t})^2, \end{cases} t=1,2,\dots,\frac{n}{4}$$

本测试函数的精确解 $x^*=(0,0,\dots,0)^{\mathrm{T}}$ 且 Jacobi 矩阵在 x^* 附近接近奇异，标准初始点为 $x_0=(3,-1,0,1,3,-1,0,1,\dots,3,-1,0,1)^{\mathrm{T}}$，方程组的维数为 4 的倍数。计算精度为 ε=10^{-6}，最小迭代步长 $\varepsilon'=\frac{\varepsilon}{10}$ 最大迭代步数 $k=1000$

方程组维数 n	Newton		Samaski-Newton		Gauss-Newton	
	迭代次数 k	运行时间/s	迭代次数 k	运行时间/s	迭代次数 k	运行时间/s
10	14	0.004090	23	0.002101	14	0.002357
100	14	0.124165	25	0.005465	14	0.008772
1000	15	0.279135	26	0.395403	15	0.465401
方程组维数 n	LevenbergMarquardt		牛顿同伦		Broyden	
	迭代次数 k	运行时间/s	迭代次数 k	运行时间/s	迭代次数 k	运行时间/s
10	20	0.003801	22	0.004089	19	0.003693
100	39	0.008169	23	0.014368	20	0.015601
200	96	3.219584	24	0.386744	22	0.443497



3.4 算例 4：Extended Powell Badly Scaled Function

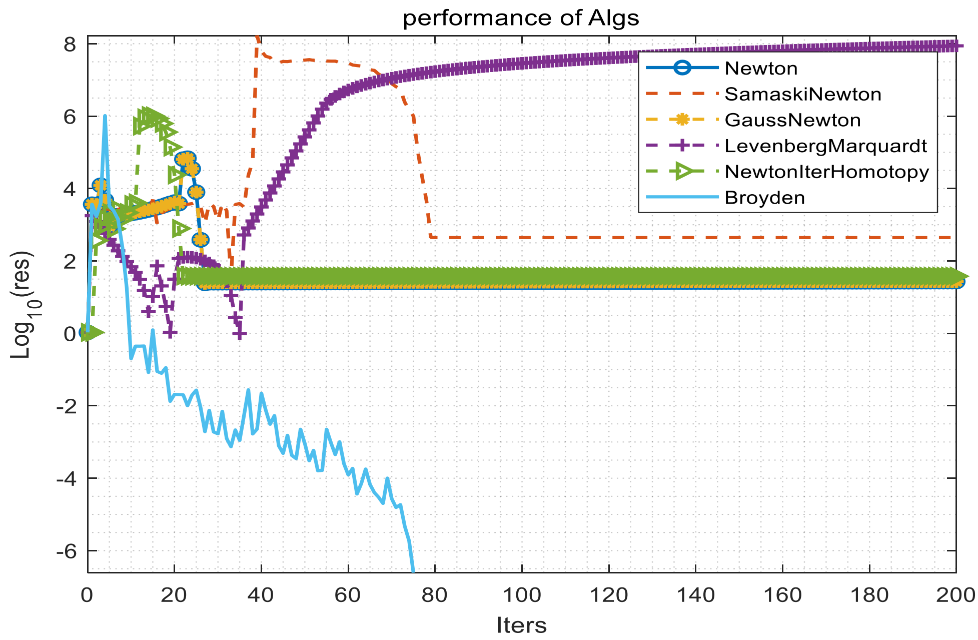
$$F(x)=(f_1(x), f_2(x),\dots, f_n(x))^{\mathrm{T}}$$

其中

$$\begin{cases} f_{2t-1}(x)=10^4 x_{2t-1}x_{2t}-1, \\ f_{2t}(x)=e^{-x_{2t-1}}+e^{-x_{2t}}-1.0001, \end{cases} \quad t=1,2,\dots,\frac{n}{2}$$

本测试函数的精确解为 $x^*=(1.098\ldots\times 10^5, 9.106\ldots, \ldots, 1.098\ldots\times 10^5, 9.106\ldots)^{\mathrm{T}}$，标准初始点 $x_0=(0,1,0,1,\dots,0,1)^{\mathrm{T}}$，方程组的维数为 2 的倍数，此问题的 Jacobi 矩阵各特征值相差若干数量级且条件数非常大。计算精度为 ε=10^{-6}，最小迭代步长 $\varepsilon'=\dfrac{\varepsilon}{10}$ 最大迭代步数 $k=200$

<table>
<tr><th rowspan="2">方程组
维数 n</th><th colspan="2">Broyden</th><td rowspan="4">除 Broyden 法外，其余
算法均不收敛</td></tr>
<tr><th>迭代次数 k</th><th>运行时间/s</th></tr>
<tr><td>2</td><td>75</td><td>0.003732</td></tr>
<tr><td>10</td><td>151</td><td>0.015428</td></tr>
</table>



4 结果分析与发现

（1） 在使用拟 Newton 法时有以下两点总结：

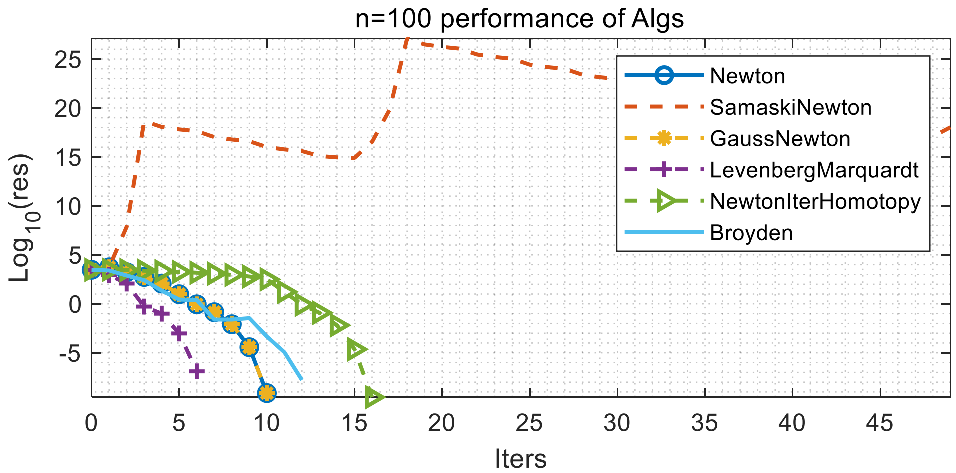
① 使用秩 1 公式更新的算法数值稳定性非常糟糕，在迭代次数比较大时若还没有收敛，结果会越来越差；秩 2 公式 BFGS 和 DFP 较之有较大改善。BFGS 的表现相较于 DFP 要更快一些，BFGS 有自校正的性质，如果某一步 B_k 对原问题的近似比较差，导致迭代变慢，BFGS 会在较少的迭代步数内校正 B_k。

② 拟 Newton 法中 B_0 的选择对于算法的表现影响非常明显， B_0 选得过大会造成前若干步步长太小，收敛速度非常低；选得过小会造成第一步走得太坏，也会增加收敛步数。本次实验中分别尝试了将 Newton 迭代第一步的 Jacobi 矩阵 $F'(x_0)$ 和 $n^{\alpha}I_n(0<\alpha<1)$ 作为 B_0 开始校正，最终前者在实现的便捷性和结果表现上都要优于后者。

（2） 算例 1 的 Jacobi 矩阵稠密且严格对角占优，是一个相当好的问题，原始 Newton 法、GN 法和 LM 法的收敛速度相同，略高于非精确 Newton 法和牛顿同伦法，拟 Newton 法最慢，计算量上非精确 Newton 法要优于原始 Newton 法，由于问题太好 GN 法和 LM

法的特性没有表现出来，运行时间也要长于原始 Newton 法。

（3） 算例 2 的第一种初值取法下，随着方程组维数上升 Jacobi 矩阵的条件数迅速增加，使得使用了一阶导数信息的几个方法的表现变差，其中非精确 Newton 法和拟 Newton 法不收敛，但经过分析，拟 Newton 法不收敛的主要原因是使用了 $F'(x_0)$ 作为 B_0 使算法第一步变得很糟糕，故其在问题导数信息非常差时能保持有效的特性没有表现出来，改用 $n^{\alpha}I_n(0<\alpha<1)$ 后与理论相符合。



（4） 算例 2 的后两种初值取法下，LM 法和拟 Newton 法的表现仍然很稳健，主要因为两者克服了 $F'(x)^{\mathrm{T}}F'(x)$ 接近奇异的问题，几乎没有受到影响；牛顿同伦法的表现逐渐优于原始 Newton 法和 GN 法，这是因为牛顿同伦法理论上具有大范围收敛性，对初值的要求不高。

（5） 算例 3 中主要可见 LM 法在此例中收敛速度不如其他几种算法，主要因为 LM 法的因子 λ_k 的取法造成的，因子的作用与信赖域的思想相似，缺点是降低了速度，若对 λ_k 引入合适的自适应过程会有一定改善，但收敛速度仍然不及 GN 法和原始 Newton 法。

（6） 算例 4 中主要可见 LM 法和牛顿同伦法也失效了，前者主要原因是所使用的 $\lambda_k=\|F'(x_k)\|$ 在面对各特征值数量级差别很大的 $F'(x_k)$ 时的作用不大；后者只是因为问题太接近奇异或者坏条件而失灵。

5 总结

在 Project 的算例中，课上算法理论上的特点基本上都有所体现，与课上内容和文献介绍大致相符。在算法实现的具体细节上，如 Broyden 法 B_0 的取法和 LM 法 λ_k 的取法上发现了一些文献上没有写清楚的策略，尝试了自己的方法，效果尚可接受。遗憾的是没有构造出能够将原始 Newton 法和 Gauss-Newton 法区分开的算例。