

改进 Monte Carlo 算法在非线性方程组求解中的应用

王启明 袁永生 任浩林

(河海大学理学院 江苏 南京 210098)

摘要 :借鉴数值方法中梯度方法的思想 ,引进了广义负梯度方向的概念 ,给出了一种基于广义负梯度方向的 Monte Carlo 方法——GGMC 方法 .该方法保持了 Monte Carlo 算法的普适性和稳定性 ,并改善了原方法搜索的盲目性和随机性 ,提高了原方法的搜索效率 ,缩短了计算时间 .将 GGMC 方法用于算例 ,收敛速度明显提高 .

关键词 :广义负梯度 ;Monte Carlo 方法 ;非线性方程组 ;数值解

中图分类号 :O231.2 文献标识码 :A 文章编号 :1000-198X(2005)06-0729-04

多数复杂的非线性方程组无法找到其解析解 .常见的经典解法有 Newton 迭代法、割线法、拟 Newton 迭代方法等 .这几种经典方法都有应用上的缺陷 :Newton 迭代法需要一阶导数存在 ,对初值的依赖性强^[1,2] ;割线法稳定性较差^[1,2] ,对于工程中复杂的问题收敛性难以保证 ;拟 Newton 迭代方法同样也有对初值的依赖性 ,而且算法复杂 ,涉及矩阵求逆^[1] ,工程中应用范围有限 .1958 年 ,Brooks 等提出了 Monte Carlo(文中简称 MC)算法 .Metropolis ,Ulam ,Von Neumann 等于 20 世纪 50 年代首先将 MC 方法应用于原子弹的研制工作^[1] .随着电子计算机性能的飞速提升 ,MC 方法广泛应用于随机服务模拟、线性方程组和非线性方程组数值解、积分方程求解及核安全计算等领域^[3~5] .MC 方法在求解非线性方程组时最大的优势在于强适应性、对初值无依赖性、收敛速度与维数的无关性 ,然而 MC 方法由于算法本身的限制 ,存在收敛速度较慢、计算时间较长等缺点^[3] .Clarke 等对非光滑分析做出了奠基性的工作 ,文献[6]定义了向量函数的广义梯度 ,但是 Clarke 定义的广义梯度在解决实际问题时难以计算 ,造成了算法在具体实现时的困难 .为了克服 MC 方法的缺点 ,本文在 MC 方法的基础上 ,将 Clarke 广义梯度思想^[3]引入 Monte Carlo 方法中 ,并为了避免 Clarke 广义梯度的计算复杂性 ,重新定义了便于数值计算的广义负梯度方向 ,给出了一种基于广义负梯度方向的 Monte Carlo 方法——GGMC(General Gradient Monte Carlo)方法 .该算法有机地将梯度算法的快速搜索能力和 MC 算法的普适性、稳定性结合起来 ,改善了搜索的盲目性和随机性 ,较大程度上缩短了搜索时间 .

1 非线性方程组求解原理

设所求非线性方程组为

$$\begin{cases} f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \\ f_2(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \\ \vdots \\ f_n(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \end{cases} \tag{1}$$

式中 $x_1, x_2, \dots, x_n$ ——实变量 ; $f_1(x_1, x_2, \dots, x_n), \dots, f_n(x_1, x_2, \dots, x_n)$ ——未知量 $x_1, x_2, \dots, x_n$ 的非线性的实函数 .不失一般性 ,假设上述方程组为非矛盾方程 ,存在一组解 $x_{10}, x_{20}, \dots, x_{n0}$.

构造能量函数

$$\Phi(x) = \sum_{i=1}^n f_i^2(x) \tag{2}$$

其中 $x=(x_1, x_2, \dots, x_n)$,这样 ,求非线性方程组解的问题就转化为求解能量函数极小值的问题 .即给定一个充分小的实常数 ϵ ,在求根区域内 ,搜索 $x_0=(x_{10}, x_{20}, \dots, x_{n0})$,使得 $\Phi(x_0)<\epsilon$,则 x_0 即是非线性方程组(1)

对应的近似解.

2 梯度概念的推广及性质

最速下降方法的搜索具有一定的方向性,但对能量函数要求过高.MC方法搜索具有盲目性和随机性,但具有很强的适应性.若将MC方法和梯度思想结合起来,在不破坏MC方法的普适性的基础上,改进搜索策略,则必将大大提高搜索效率,节约运算成本.因此本文提出了广义负梯度的概念,让MC方法搜索沿广义负梯度方向,使得改进后的MC既大大提高搜索效率又不破坏MC方法的普适性.

2.1 广义负梯度的定义

设 R 为一维实空间, S 是 n 维实线性空间.对于 $x \in S, r \in R^+$,定义集合 $N(x, r) = \{y \mid \|y - x\|_2 = r, y \in S\}$ 为 x 的 r -边界,其中 $\|\cdot\|_2$ 为二范数.设 $\Phi: S \rightarrow R^+$ 是一个映射.若满足以下两个条件:(a) $y \in N(x, r)$ (b) $\Phi(y) < \Phi(x)$,且对 $\forall t \in N(x, r)$,有 $\Phi(y) \leq \Phi(t)$ 则称 $\nabla B(x) = (y - x)/r$ 为映射 Φ 在 x 处的广义负梯度方向.

本文定义的广义负梯度本质上与Clarke广义梯度的思想一致,皆为在 x 周围寻找最快速增(递减)方向的过程,但Clarke广义梯度计算需要复杂的求上确界和求极限的过程^[3],而本文提出的广义负梯度的概念回避了上述的复杂过程,使得广义负梯度方向可以较方便地利用各种数值方法求得.

2.2 相容性定理

讨论当能量函数 $\Phi(x)$ 可微时,广义负梯度与负梯度方向的一致性,定理描述如下:

对 $\forall x_0 \in S$,定义 $\nabla B(x_0)$ 为 Φ 在 x_0 处的广义负梯度方向,若 $\Phi(x)$ 可导,为 Φ 在 x_0 处梯度方向,且 $\nabla \Phi(x_0) \neq 0$,则有如下定理成立:

$$\lim_{r \rightarrow 0} \nabla B(x_0) = -\nabla \Phi(x_0)$$

证明 由于 $\nabla \Phi(x_0) \neq 0$ 且 r 充分小,对于 $x \in N(x_0, r)$,有泰勒展开式

$$\Phi(x) = \Phi(x_0) + \nabla \Phi(x_0) \cdot (x - x_0) + o(\|x - x_0\|)$$

又由于 $x - x_0 = \nabla B(x) \cdot r$,代入上式得

$$\Phi(x) = \Phi(x_0) + \nabla \Phi(x_0) \cdot \nabla B(x_0) \cdot r + o(r)$$

由于 $\Phi(x_0), \nabla \Phi(x_0)$ 已知, $r = \|x - x_0\|_2 \rightarrow 0$,根据向量点积得, $\Phi(x)$ 取得最小值等价于 $\nabla B(x_0) = -\nabla \Phi(x_0)$.定理得证.

当能量函数在 x_0 处局部可微时,上述定理仍成立.

定理说明了广义负梯度适合光滑或非光滑的函数,且在能量函数可微时,与通常负梯度定义一致,因此此处定义的广义负梯度是负梯度方向的推广.

对于复杂能量函数,其导数可能难以求出,或者能量函数不可导,此时函数的梯度是难以得到的或不存在的,但广义梯度不涉及函数的可导性,只要函数值可以求出,广义负梯度可用本文将讨论的数值方法较方便地求得.

根据上述定理,能量函数可导时,只要邻域足够小,广义负梯度方向即为负梯度方向,因此根据负梯度的性质,沿广义负梯度方向能量函数值递减最快,若能量函数不可导,根据广义负梯度的定义,沿广义负梯度方向能量函数值仍然是递减最快.广义负梯度保留了原梯度的良好方向性.

3 GGMC原理及实现

本文借助引进的广义负梯度的定义,将MC方法和梯度方法有机结合,提出了GGMC方法,使MC方法搜索过程中的盲目、随机的搜索变为具有方向性的梯度搜索.

算法的关键在于如何选取搜索方向.不失一般性,设迭代至第 k 次,得到点 $x^k = (x_1^k, x_2^k, \dots, x_n^k)$,本文利用MC方法搜索广义负梯度方向,从而确定第 $k+1$ 步搜索方向.首先,对自变量 $x_1, x_2, \dots, x_n$ 进行极坐标映射变换,使得满足如下极坐标性质:

$$\begin{cases} x_1 = g_1(\rho, \theta_1, \theta_2, \dots, \theta_{n-1}) \\ x_2 = g_2(\rho, \theta_1, \theta_2, \dots, \theta_{n-1}) \\ \vdots \\ x_n = g_n(\rho, \theta_1, \theta_2, \dots, \theta_{n-1}) \end{cases} \quad (3)$$

$$\sum_{i=1}^n g_i(\rho, \theta_1, \theta_2, \dots, \theta_{n-1}) = \rho^2 \quad (4)$$

式中： ρ ——矢径 ($0 \leq \rho < \infty$)； $\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_{n-1}$ ——极角。然后选取合适的、较小的矢径 ρ ，并选定恰当的随机搜索集 M ，利用 MC 方法随机抽样理论生成 M 组随机数 θ_{ij} ($i = 1, 2, \dots, n-1; j = 1, 2, \dots, M$)，其中 θ_{ij} 服从 $[0, 2\pi]$ 上均匀分布，且相互独立。令 $\Delta x_{ij} = g_i(\rho, \theta_{1j}, \theta_{2j}, \dots, \theta_{n-1,j})$ ($i = 1, 2, \dots, n; j = 1, 2, \dots, M$)，则有 $\sum_{i=1}^n (\Delta x_{ij})^2 = \rho^2$ ，将扰动 Δx_{ij} 叠加至 $\mathbf{x}^k$ ，得到 $\mathbf{y}_j^k = (x_1^k + \Delta x_{1j}, x_2^k + \Delta x_{2j}, \dots, x_n^k + \Delta x_{nj})$ ($j = 1, 2, \dots, M$)，计算各 $\mathbf{y}_j^k$ 对应的能量函数值 $\Phi(\mathbf{y}_j^k)$ 。设 $\mathbf{y}_m^k$ 为 M 组随机坐标中的能量函数最小者，并设 $\mathbf{y}_{\min}^k$ 为 $\mathbf{x}^k$ 的 r -边界上的最小值。易知对 $\forall \epsilon > 0$ 有 $\lim_{M \rightarrow \infty} p\{|\mathbf{y}_m^k - \mathbf{y}_{\min}^k| < \epsilon\} = 1$ 。因此，对于较小的半径 ρ 和较大的搜索集 M ($\Delta x_{1m}, \Delta x_{2m}, \dots, \Delta x_{nm}$)， ρ 逼近广义负梯度方向，故选择 $(\Delta x_{1m}, \Delta x_{2m}, \dots, \Delta x_{nm})$ 为广义负梯度的数值解。

搜索方向确定后，前进步长的判断关系到收敛速度快慢，也是算法的一个关键问题。由于搜索方向确定后，问题简化为一维搜索，本文为了保持算法的普适性，采取的是一维搜索算法中效率较高的黄金分割法^[1,2]。设在 $\mathbf{x}_0$ 处，方向为 $\nabla B(\mathbf{x}_0)$ ，进行步长搜索，则过程可以简述如下：

- a. 初始化阶段：给定合适的初始前进步长 α ($\alpha > 1$) 及步长伸缩率 k ($k > 1$)，搜索结束控制参数 δ 。
- b. 比较 $\Phi(\mathbf{x}_0)$ 、 $\Phi(\mathbf{x}_0 + \alpha \nabla B(\mathbf{x}_0))$ 、 $\Phi(\mathbf{x}_0 + k\alpha \nabla B(\mathbf{x}_0))$ 三个能量函数的大小，并进行搜索。分多种情况分析：(a) 如果 $\Phi(\mathbf{x}_0) \leq \Phi(\mathbf{x}_0 + \alpha \nabla B(\mathbf{x}_0))$ ，则在 $[0, \alpha]$ 中利用黄金分割法搜索最小值点的步长 l ；(b) 若 $\Phi(\mathbf{x}_0) > \Phi(\mathbf{x}_0 + \alpha \nabla B(\mathbf{x}_0))$ ，且 $\Phi(\mathbf{x}_0) > \Phi(\mathbf{x}_0 + k\alpha \nabla B(\mathbf{x}_0))$ ，则比较 $\Phi(\mathbf{x}_0 + \alpha \nabla B(\mathbf{x}_0))$ 和 $\Phi(\mathbf{x}_0 + k\alpha \nabla B(\mathbf{x}_0))$ ，这里可分两种情况：如若 $\Phi(\mathbf{x}_0 + \alpha \nabla B(\mathbf{x}_0)) < \Phi(\mathbf{x}_0 + k\alpha \nabla B(\mathbf{x}_0))$ ，则在 $[\alpha, k\alpha]$ 中利用黄金分割法搜索最小值点的步长 l ；如若 $\Phi(\mathbf{x}_0 + \alpha \nabla B(\mathbf{x}_0)) \geq \Phi(\mathbf{x}_0 + k\alpha \nabla B(\mathbf{x}_0))$ ，则给 α 重新赋值： $\alpha \leftarrow k\alpha$ ，再次比较 $\Phi(\mathbf{x}_0 + \alpha \nabla B(\mathbf{x}_0))$ 、 $\Phi(\mathbf{x}_0 + k\alpha \nabla B(\mathbf{x}_0))$ ，如此比较下去，直至 $\Phi(\mathbf{x}_0 + \alpha \nabla B(\mathbf{x}_0)) < \Phi(\mathbf{x}_0 + k\alpha \nabla B(\mathbf{x}_0))$ ，这时在 $[\alpha, k\alpha]$ 中利用黄金分割法搜索最小值点的步长 l ；(c) 若 $\Phi(\mathbf{x}_0) > \Phi(\mathbf{x}_0 + \alpha \nabla B(\mathbf{x}_0))$ ，且 $\Phi(\mathbf{x}_0) < \Phi(\mathbf{x}_0 + k\alpha \nabla B(\mathbf{x}_0))$ ，则取定步长为 $l = \alpha$ 。

综上所述，具体算法的流程如下：(a) 初始化参数：合适的极坐标半径 ρ ，恰当的随机搜索集大小 M ，初始前进步长 α ，步长伸缩率 k ，一维搜索控制参数 δ ，精度控制参数 ϵ ；(b) 随机选择求根区域内的一点 $\mathbf{x}^0$ ，令 $k = 0$ ；(c) 利用乘同余法或者混合同余法生成 $n-1$ 个彼此独立的、均匀分布在 $[0, 1]$ 内的伪随机数 $r_1, r_2, \dots, r_{n-1}$ ，作线性变换： $\theta_i = 2\pi r_i$ ($i = 1, 2, \dots, n-1$)，令 $\Delta x_i = g_i(\rho, \theta_1, \theta_2, \dots, \theta_{n-1})$ ，得到随机点 $\mathbf{y}^k = (x_1^k + \Delta x_1, x_2^k + \Delta x_2, \dots, x_n^k + \Delta x_n)$ ；(d) 计算 $\Phi(\mathbf{y}^k)$ ，比较 $\Phi(\mathbf{y}^k)$ 、 $\Phi(\mathbf{x}^k)$ ，若 $\Phi(\mathbf{y}^k) > \Phi(\mathbf{x}^k)$ ，则记录 $\mathbf{y}^k$ ，重复步骤 (c) M 次，挑选其中能量函数最小者 $\mathbf{y}_{\min}^k$ ，计算广义负梯度 $\nabla B(\mathbf{x}^k)$ ；(e) 若 $\|\nabla B(\mathbf{x}^k)\| < \epsilon$ ，或者 $\Phi(\mathbf{x}^k) < \epsilon$ ，则得到方程组的解 $\mathbf{x}^k$ ，否则执行步骤 (f)；(f) 在已知搜索方向的基础上，利用黄金分割法计算步长 l ；(g) 令 $\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k + l \nabla B(\mathbf{x}^k)$ ，跳转至步骤 (c)。

4 GGMC 算例与分析

GGMC 算法在搜索的方向性方面优于 MC 算法。下面用一个非线性方程组求解过程说明 GGMC 算法的优势。设非线性方程组为

$$\begin{cases} x^2 \exp(-xy^2/2) = (x + y - 1)^3 \\ y^2 \cos(y + x^2) + x^2 \exp(x + y) = 0 \end{cases} \quad (5)$$

算法初始化参数如下：极坐标半径 $\rho = 0.001$ ，随机搜索集大小 $M = 50$ ，初始前进步长 $\alpha = 2$ ，步长伸缩率 $k = 2$ ，一维搜索控制参数 $\delta = 0.001$ ，精度控制参数 $\epsilon = 1 \times 10^{-5}$ 。

在相同精度 $\epsilon = 1 \times 10^{-5}$ 下，从两个方面比较 GGMC 与 MC 算法的优劣。

4.1 搜索路径比较。

以方程组 (5) 为例，根据每次搜索得到的点，绘制搜索路径，如图 1~3 所示。

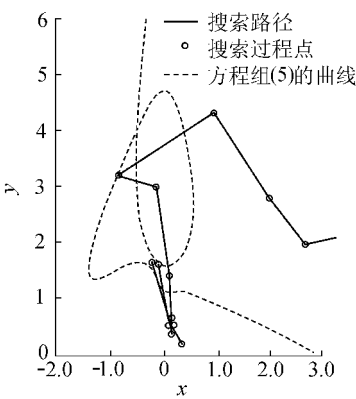


图1 MC方法搜索路径

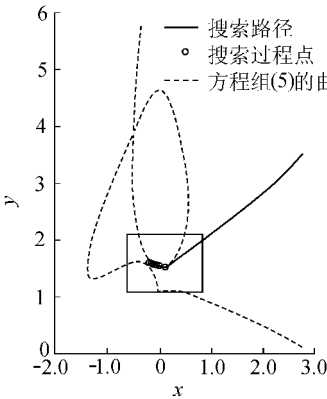


图2 GGMC方法搜索路径

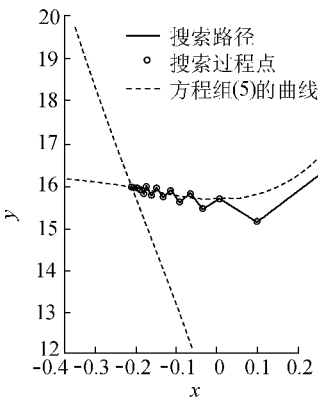


图3 图2中方框部分的放大

Fig.1 Search path of MC method Fig.2 Search path of GGMC method Fig.3 Magnified image of the frame in Fig.2

图1~3中虚线的交点为方程组(5)的根。

可以看出,图1的搜索是带有很大跳跃性的,出现了随机摇摆现象,产生了很多无用的搜索点,显然不利于复杂问题的求解;图2的过程带有明显的趋势性,总是沿着下降方向,因此,GGMC方法较MC方法有较大改进。

4.2 计算次数比较

方程组(5)的计算采用了两种方法,并且设置了相同的参数,其多次计算的结果见表1。

由表1可以看出,GGMC方法平均计算次数为1160,MC方法的平均计算次数为1964,GGMC较MC计算次数减少了40.9%,可见GGMC方法在计算次数方面优于MC方法。

表1 GGMC方法与MC方法
计算次数的比较

Table 1 Comparison of calculation groups
of GGMC method and MC method 次

计算批次	计算次数	
	GGMC方法	MC方法
第1次计算	1200	2031
第2次计算	1600	2424
第3次计算	800	2302
第4次计算	1400	1944
第5次计算	800	1374
第6次计算	1200	1710
平均值	1160	1964

5 结 论

本文在现有 Monte Carlo 方法的基础上,提出了一种求解复杂非线性方程组的改进 Monte Carlo 方法。检验结果表明,改进 Monte Carlo 方法具有很强的适用性,且较 MC 方法有了很大的改进。

参考文献:

[1] 解可新,韩立兴,林友联.最优化方法[M].天津:天津大学出版社,1997.99—126.
[2] 李庆扬,王能超,易大义.数值分析[M].北京:清华大学出版社,2001.261—290.
[3] 徐钟济.蒙特卡罗方法[M].北京:科学技术出版社,1985.167—170.
[4] 裴鹿成,张孝泽.蒙特卡罗方法及其在粒子输运问题中的应用[M].北京:科学出版社,1985.24—43.
[5] 裴鹿成,王仲奇.蒙特卡罗方法及应用[M].北京:海洋出版社,1998.93—102.
[6] CLARKE F H. Optimization and Nonsmooth analysis[M].New York:Wiley-Interscience,1983.227—231.

Application of improved Monte Carlo method to solution of nonlinear equations

WANG Qi-ming , YUAN Yong-sheng , REN Hao-lin
(College of Sciences , Hohai University , Nanjing 210098 , China)

Abstract :The concept of general gradient was introduced into the original Monte Carlo method , and an improved Monte Carlo method based on general negative gradient was proposed. The present method keeps the general suitability and stability of the original method , and overcomes the blindness and randomness of the original search method , so it improves the search efficiency and shortens the calculation time. A case study with the improved algorithm shows that the convergence speed is greatly improved.

Key words :general negative gradient ; Monte Carlo method ; nonlinear equations ; numerical solution