关于 Newton-GMRES 方法的有效变型与全局收敛性研究 [*1)]

白中治　安恒斌

(中国科学院数学与系统科学研究院，计算数学与科学工程计算研究所，科学与工程计算国家重点实验室，北京 100080)

摘　要

Newton-GMRES 方法是求解大规模稀疏非线性方程组的有效方法之一. 由 Newton-GMRES 方法可以得到具有全局收敛性质的 Newton-GMRES 后退 (NGB) 方法. 我们就如何提高 NGB 方法的强健性问题进行了深入探讨，提出了两种改进 NGB 方法的全局策略，并由此相应地得到了两种更为强健且具全局收敛性质的 Newton-GMRES 方法.

关键词： 非线性方程组，不精确 Newton 法，广义极小残量 (GMRES) 法，全局收敛性.

ON EFFICIENT VARIANTS AND GLOBAL CONVERGENCE OF THE NEWTON-GMRES METHOD

Bai Zhongzhi　An Hengbin

(*State Key Laboratory of Scientific/Engineering Computing*
Institute of Computational Mathematics and Scientific/Engineering Computing
Academy of Mathematics and Systems Science
Chinese Academy of Sciences, Beijing 100080)

Abstract

Newton-GMRES method is one of the efficient methods for solving large sparse systems of nonlinear equations. Based on Newton-GMRES method, we can derive the Newton-GMRES with backtracking (NGB) method which is of global convergence property. We focus on in-depth investigation about how to improve the robustness of the NGB method, present two global strategies for further improving the NGB method, and correspondingly, we obtain two globally convergent Newton-GMRES method with strong robustness.

Key words: System of nonlinear equations, inexact Newton method, generalized minimal residual (GMRES) method, global convergence.

* 2004 年 2 月 4 日收到.

1) 国家自然科学基金资助项目 (No.10471146)

§1. 引 言

随着现代科学技术的迅速发展，科学与工程计算的许多领域中所出现的非线性问题越来越多，关于各种非线性问题的研究也日益受到人们普遍高度的重视，各门交叉学科中的非线性问题已经逐渐成为科学研究的热点之一. 利用计算机求解各类非线性问题，最终总可归结为非线性代数问题的数值近似，而非线性代数方程组的数值求解，则是这些非线性代数问题的数值近似的基础和关键所在.

考虑非线性代数方程组 [18, 19]

$$F(x)=0, \tag{1}$$

其中 $F:\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}^n$ 为非线性函数. 这里， F 可以是光滑函数，也可以是非光滑或者是半光滑函数. 在本文中，我们主要考虑 F 为光滑的情形.

对于光滑非线性方程组 (1) 的数值求解，已经有许多学者做了大量的广泛深入且富有成效的研究工作，并且已经得到了一系列实用高效的计算方法，见 [6], [8]-[10] 和 [13, 18, 19]. 尽管如此，对于非线性方程组的算法设计和理论分析仍然远远不如线性方程组成熟和深刻. 在迄今发展起来的各种求解非线性方程组 (1) 的数值方法中，可以说 Newton 法是最基本和最重要者之一. 包括割线法，拟 Newton 法，不精确 Newton 法以及信赖域方法在内的许多非线性迭代算法，都是以它为基础，经过进一步改进，推广和发展而得到的. Newton 法的显著优点是收敛速度快，其不足则是好的初值难以选到，并且在迭代的每步均需计算和形成 Jacobi 矩阵，以及需要精确求解 Newton 方程. 当 Jacobi 矩阵难以形成，或者当问题的规模较大时， Newton 法的计算代价就很昂贵. 此外，不具有全局收敛性质则是 Newton 法的另一个缺点.

为降低 Newton 法的使用成本，在 1982 年，文 [8] 的作者提出了求解非线性方程组的不精确 Newton 法. 顾名思义，不精确 Newton 法就是在 Newton 法的每步迭代只对 Newton 方程进行近似求解. 因此，不精确 Newton 法实质上就是一类内外迭代算法，外迭代为经典 Newton 法，内迭代则可采用任何能够准确而有效地计算 Newton 方程解的线性迭代法. 这种内外迭代技术由于能够充分利用 Jacobi 矩阵的结构和稀疏性，因此可以大大降低 Newton 法的计算代价. 理论分析和实际应用均表明，不精确 Newton 法是求解大规模稀疏非线性方程组的有效方法 [19].

在不精确 Newton 法中，如果特别采用 Krylov 子空间方法对 Newton 方程进行求解，我们即可得到 Newton-Krylov 子空间方法 (见 [1]-[2], [4]-[7] 和 [13]). 这类方法在迭代的每步只需用有限差分替代 Jacobi 矩阵与向量的乘积运算，从而无需显式形成 Jacobi 矩阵，且避免了 Jacobi 矩阵的存储. 因此， Newton-Krylov 子空间方法可以大大节省计算机内存，提高计算效率. 也正是缘于此，我们又称这类方法为无 Jacobi 矩阵的 Newton-Krylov (Jacobi-free Newton-Krylov(JFNK)) 方法 [14]. 目前， JFNK 方法在计算物理等许多领域已经得到了广泛应用 [14]. 值得指出的是， Newton-GMRES 方法是这类 JFNK 方法的典型代表.

由于不精确 Newton 法只具有局部收敛性质，因此，为了保证由其所产生的迭代序列收敛，通常要求迭代初值必须与问题的真解充分靠近，但是这一要求是十分苛刻的，尤其在实际应用中更是难以得到实现．鉴于此，许多学者通过各种途径将不精确 Newton 法加以改造，建立了具有全局收敛性质的不精确 Newton 方法，（见 [5]-[7], [10]）．特别地，如果在 Newton-GMRES 方法中配以线搜索技巧，便可得到具有全局收敛性质的 Newton-GMRES 后退 (NGB) 方法 [5]．理论分析和数值计算表明， NGB 方法是一类健壮，有效的求解大规模稀疏非线性方程组 (1) 的方法．令人遗憾的是，在利用 NGB 方法求解一些坏条件非线性方程组时，却并不能得到令人满意的计算效果 [21]．

通过深入剖析 NGB 方法的机理和思想，扬弃其缺点，继承其优点，在本文中，我们进一步提出了两种具有全局收敛性质的 Newton-GMRES 方法，它们分别被称之为 Newton-GMRES with quasi-conjugate-gradient backtracking (NGQCGB) 方法和 Newton-GMRES with Levenberg-Marquardt (NGLM) 方法．理论分析和数值计算均表明，这两种方法的健壮性和有效性均要高于 NGB 方法．

§2. 不精确 Newton 法

在 Newton 法的每步迭代，我们都需要求解 Newton 方程

$$F'(x_k)s = -F(x_k). \tag{2}$$

当该线性方程组的维数较高时，计算其精确解的开销就会很大．相应地， Newton 法的计算量也会很大．如果利用不精确 Newton 法，则既可减少算法的工作量，又能保持 Newton 法的局部二阶敛速．因此，不精确 Newton 法是求解大规模稀疏非线性方程组的十分有效的工具之一．

算法 2.1 (不精确 Newton 法 [8])

1. 给定初值 $x_0 \in \mathbb{R}^n$.
2. 对于 $k = 0, 1, 2, \ldots$ 直至 $\{x_k\}$ 收敛，
   2.1. 选取 $\bar{\eta}_k \in [0, 1)$.
   2.2. 近似求解 Newton 方程 (2)，并得到 $\bar{s}_k$，使其满足

$$\|F(x_k) + F'(x_k)\bar{s}_k\| \leq \bar{\eta}_k \|F(x_k)\|. \tag{3}$$

   2.3. 置 $x_{k+1} := x_k + \bar{s}_k$.

在上述不精确 Newton 法中， $\bar{\eta}_k$ 称作强制项， $\bar{s}_k$ 称作不精确 Newton 步，而约束条件 (3) 则称作不精确 Newton 条件．

在算法 2.1 的每个迭代步，我们只需近似求解 Newton 方程，得到满足不精确 Newton 条件 (3) 的解．显然，由于 $F(x_k) + F'(x_k)\bar{s}_k$ 既是 Newton 方程的残量，又是 $F(x)$ 在 x_k 处的局部线性模型，所以 $\bar{\eta}_k$ 的大小在本质上刻划出了对 Newton 方程求解的精确程度．特别，如果选取所有的 $\bar{\eta}_k = 0$，则不精确 Newton 法就退化为 Newton 法．

值得指出的是，在不精确 Newton 法中，当迭代点 x_k 远离非线性方程组 (1) 的真解

时，不宜选用过小的强制项. 因为如果选用过小的强制项，就很可能会导致 "oversolving" 现象：即对于 Newton 方程的求解达到适当的精度时，$\|F(x_k)\|$ 就会得到最好的下降，若这时再对 Newton 方程一味地去精确求解，则可能会造成大量的计算开销，并且对 $\|F(x_k)\|$ 的下降也起不到任何好的作用，更有可能会导致迭代中断现象 [21].

文 [8] 中关于不精确 Newton 法的局部收敛性分析表明，如果强制序列 $\{\bar{\eta}_k\}$ 一致地小于 1, 则不精确 Newton 法具有局部线性收敛速度；如果 $\bar{\eta}_k \to 0$, 则不精确 Newton 法具有局部超线性收敛速度；更进一步，如果 $\bar{\eta}_k = \mathcal{O}(\|F(x_k)\|)$, 则不精确 Newton 法具有局部二阶收敛速度. 不精确 Newton 法的这些特征，为我们恰当地选取强制序列提供了理论依据.

强制序列对于不精确 Newton 法的收敛性质和数值行为起着至关重要的作用. 它不仅影响着算法的计算效率，还影响着算法的准确性和强健性. 在具体实施时，一般总是预先给定强制序列的上界 $\eta_{max} < 1$, 然后再在迭代过程中选取强制项 $\bar{\eta}_k \le \eta_{max}$. 强制序列的最简单的选取方法就是选取常数序列. 当然，要选取一个能够使得不精确 Newton 法的整体计算效率达到最高的强制序列，是十分困难的. 尤其是在实际应用中，由于无法判断当前迭代点与真解之间的距离，因此很难确定当前强制项的大小. 就我们所知，迄今只有文 [11] 的作者于 1996 年通过理论分析给出了关于强制序列的两种选取方法. 这两种方法现已得到了广泛而成功的应用 [5, 21].

在不精确 Newton 法中，我们可以根据 Jacobi 矩阵的结构和特点，运用高效的线性迭代法 (譬如：分裂迭代法，Krylov 子空间迭代法等) 去近似求解 Newton 方程. 特别，Newton-GMRES 方法就是采用 GMRES[20] 为内迭代的一类典型的不精确 Newton 法 [14].

§3. NGB 方法

众所周知， Newton-GMRES 方法仅具有局部收敛性质 (见 [1]-[8] 和 [10, 11]). 但是在实际应用中，具有全局收敛性质的方法则往往更为有效. 对于 Newton-GMRES 方法来说，如果在其不精确 Newton 方向 $\bar{s}_k$ 上配以线搜索策略，则可得到具有全局收敛性质的 Newton-GMRES with backtracking(NGB) 方法. 该方法可简述如下：

算法 3.1 (NGB 方法 [5])

1. 给定 x_0, ϵ_0, $\eta_{max} \in [0,1)$, $\alpha \in (0,1)$, $0 < \theta_l < \theta_u < 1$. 置 $k := 0$.
2. 如果 $\|F(x_k)\| > \epsilon_0$
   2.1. 选取 $\bar{\eta}_k \in [0, \eta_{max}]$.
   2.2. 执行 **GNE** (GMRES for the kth Newton equation) 过程：
   (a) 选取 $s_k^0 \in \mathbb{R}^n$, 令 $r_k^0 = -F(x_k) - F'(x_k)s_k^0$.
   (b) 执行 **GMRES** 迭代 m 次得到 Krylov 子空间

$$\mathcal{K}_m := span\left\{r_k^0, F'(x_k)r_k^0, \left(F'(x_k)\right)^2 r_k^0, \dots, \left(F'(x_k)\right)^{m-1} r_k^0\right\}$$

及其标准正交基 $V_m := [v_1, v_2, \dots, v_m] \in \mathbb{R}^{n\times m}$, 使其满足 $F'(x_k)V_m = V_{m+1}\bar{H}_m$ 和 (3), 其中 $\bar{H}_m \in \mathbb{R}^{(m+1)\times m}$ 为上 Hessenberg 矩阵， $\bar{s}_k := \operatorname{argmin}_{s\in s_k^0+\mathcal{K}_m}\|F'(x_k)s + F(x_k)\|$.

2.3. 执行 **BL** (backtracking loop:)

(a) 置 $s_k := \bar{s}_k$, $\eta_k := \bar{\eta}_k$.

(b) 如果 $\|F(x_k + s_k)\| > [1 - \alpha(1 - \eta_k)]\,\|F(x_k)\|$

- 选取 $\theta \in [\theta_l, \theta_u]$.
- 置 $s_k := \theta s_k$, $\eta_k := 1 - \theta(1 - \eta_k)$.

2.4. $x_{k+1} = x_k + s_k$.

2.5. $k := k + 1$.

上述 NGB 方法的优点是可以不显式地计算和形成 Jacobi 矩阵. 事实上，在算法的执行过程中，只用到了 Jacobi 矩阵 $F'(x)$ 与某一向量 y 的乘积，这可以通过有限差分

$$F'(x)y \approx \frac{F(x + \epsilon y) - F(x)}{\epsilon}$$

来近似实现. 这里 ϵ 是差分步长 [5, 13]. 在 NGB 方法中，由于在不精确 Newton 方向上应用了线搜索后退策略，从而使得 Newton-GMRES 方法具有了全局收敛性质. 因此，NGB 方法有效地扩大了 Newton-GMRES 方法的应用范围.

理论分析与数值实验均表明， NGB 方法具有很好的强健性，能够有效地计算大规模稀疏非线性方程组的近似解 (见 [1]-[2], [4]-[5] 和 [11]). 但是，对于一些坏条件问题， NGB 方法却常常不能得到令人满意的计算效果，甚至会发生迭代中断现象 [21].

为了进一步提高 NGB 方法的强健性，我们提出了两种新的全局策略：quasi-conjugate-gradient backtracking (QCGB) 策略和 Levenberg-Marquardt(LM) 策略. 相应地，得到了两种新型的 NGB 方法： Newton-GMRES with quasi-conjugate-gradient backtracking (NGQCGB) 方法 [1] 和 Newton-GMRES with Levenberg-Marquardt (NGLM) 方法 [2].

§4. NGQCGB 方法

如果在 NGB 方法的第 k 步迭代中发生了中断，则很有可能是由于内迭代所产生的不精确 Newton 方向 $\bar{s}_k$ 的质量太差所致 [11]. 鉴于此，基于 NGB 方法，我们在文 [1] 中提出了一种求解非线性方程组 (1) 的新方法，称之为 **NGQCGB** (*Newton-GMRES with quasi-conjugate-gradient backtracking*) 方法.

在 NGQCGB 方法中，沿着 $\bar{s}_k$ 的最大后退次数由预先给定的正整数 N_b 来控制. 如果经过最多 N_b 次后退就能够得到一个满足要求的步长 s_k, 则令 $\Delta_k = s_k$, 并得到下一非线性迭代点 $x_{k+1} = x_k + \Delta_k$; 否则，我们则转而采用一种有效的备选策略来产生一个充分下降步. 该备选策略将用到价值函数 $f_2(x) = \dfrac{1}{2}\|F(x)\|_2^2$ 的梯度 $g_k = F'(x_k)^T F(x_k)$ 在 Krylov 子空间 $\mathcal{K}_m$ 上的投影，以及前一次非线性迭代步 $\Delta_{k-1} = x_k - x_{k-1}$.

更为具体地， NGQCGB 方法的备选策略是沿着一个方向 d_k 的线搜索后退过程. 这里，d_k 位于由上一次的非线性迭代步 $\Delta_{k-1} = x_k - x_{k-1}$ 和 $g_k = F'(x_k)^T F(x_k)$ 在 Krylov 子空间 $\mathcal{K}_m$ 上的投影 $\tilde{g}_k$ 所张成的线性子空间中.

关于 $\tilde{g}_k$ 的计算，我们有下述方案：假定在 NGB 方法的第 k 步迭代中， Jacobi 矩阵

$F^{'}(x_k)$ 是非奇异的，并且以 $s_k^0=0$ 为迭代初值的 GMRES 过程没有重新启动，则易知 g_k 在 $\mathcal{K}_m$ 上的投影为

$$\tilde{g}_k=V_mV_m^Tg_k=V_mV_m^TF^{'}(x_k)^TF(x_k)=-\|F(x_k)\|V_m\bar{H}_m^Te_1.$$

因此，在 GNE 执行完毕后，便可方便而自然地得到 $\tilde{g}_k$.

为了得到备选策略中所需要的搜索方向 d_k, 我们引进二次函数 $\varphi_k(d)=g_k^Td+\frac{1}{2}d^TB_kd$. $d\in\Lambda_k$. 其中 $\Lambda_k:=\text{span}\{\tilde{g}_k,\,\Delta_{k-1}\}$, $\Delta_{k-1}:=x_k-x_{k-1}$, $B_k:=F^{'}(x_k)^TF^{'}(x_k)$. 因为 $d_k\in\text{argmin}_{d\in\mathbb{R}^n}\ \varphi_k(d)$ 的充要条件是 $d_k\in\text{argmin}_{d\in\mathbb{R}^n}\|F(x_k)+F^{'}(x_k)d\|$, 因此，我们可以通过求解优化问题

$$\min_{d\in\Lambda_k}\varphi_k(d) \tag{4}$$

来确定 d_k.

基于上述准备，我们现在可将 NGQCGB 方法叙述如下：

算法 4.1(NGQCGB 方法 [1])

1. 给定 $x_0\in\mathbb{R}^n$, $\epsilon_0>0$, $\eta_{max}\in[0,1)$, $0<\alpha<\beta<1$, $0<\theta_l<\theta_u<1$, 及非负整数 N_b. 令 $k:=0$, $\Delta_{-1}:=0$.

2. 如果 $\|F(x_k)\|>\epsilon_0$

   2.1. 选取 $\bar{\eta}_k\in[0,\eta_{max}]$.

   2.2. 执行 m 步 GMRES 迭代以不精确求解第 k 个 Newton 方程，得到 $\bar{s}_k:=s_k^m$. 使其满足 $\|F(x_k)+F^{'}(x_k)\,\bar{s}_k\|\le\bar{\eta}_k\|F(x_k)\|$.

   2.3. 沿着 $\bar{s}_k$ 执行最多 N_b 次后退迭代，得到步长 s_k, 并得到相应的 η_k.

   2.4. 如果 s_k 满足充分下降条件 $\|F(x_k+s_k)\|\le[1-\alpha\,(1-\eta_k)]\,\|F(x_k)\|$, 则令 $\Delta_k:=s_k$, 转步 2.6. 否则

   2.5. 执行 QCGB 策略：

   (a) 通过 (4) 计算 d_k.

   (b) 令 $\Delta_k:=d_k$.

   (c) 如果

$$\begin{cases} f_2(x_k+\Delta_k)\le f_2(x_k)+\alpha\bigtriangledown f_2(x_k)^T\Delta_k,\\ \bigtriangledown f_2(x_k+\Delta_k)^T\Delta_k\ge\beta\bigtriangledown f_2(x_k)^T\Delta_k, \end{cases} \tag{5}$$

   则转步 2.6.

   (d) 选取 $\theta\in[\theta_l,\,\theta_u]$, 令 $\Delta_k:=\theta\Delta_k$. 转步 (c).

   2.6. $x_{k+1}=x_k+\Delta_k$.

   2.7. $k:=k+1$.

如果在 NGQCGB 方法的第 k 步迭代执行了 QCGB 策略，则成立

$$x_{k+1}=x_k+\Delta_k,\quad 其中\quad \Delta_k=\tilde{\mu}_k\tilde{g}_k+\tilde{\nu}_k\Delta_{k-1}, \tag{6}$$

这里 $\tilde{\mu}_k$，$\tilde{\nu}_k \in \mathbb{R}^1$. 可以看出，关系式 (6) 相似于文 [22] 中以 $f_2(x)$ 为目标函数的共轭梯度法. 事实上，只要将文 [22] 中共轭梯度法的方向 g_k 用 $\tilde{g}_k$ 代替，便可得到关系式 (6). 这也正是我们将由算法 4.1 中步 2.5 所定义的备选策略称为拟共轭梯度法后退策略 (quasi-conjugate-gradient backtracking strategy) 的原因.

由算法 4.1 可知，NGQCGB 方法的全局策略由两部分构成：即沿着不精确 Newton 方向的线搜索后退策略和另一可备选择的 QCGB 策略. QCGB 策略可以有效地避免迭代步中所产生的不精确 Newton 方向的质量过差的情形，从而它可从本质上改善 NGB 方法的强健性.

关于 NGQCGB 方法的全局收敛性质，我们证明了下述定理：

定理 4.1[1]. 在 NGQCGB 方法中，取 $\epsilon_0 = 0$，并设已由该方法产生了一个无穷序列 $\{x_k\} \subset \mathbb{R}^n$. 如果 $\{x_k\}$ 有一个聚点 $x^* \in \mathbb{R}^n$，使得 $F'(x^*)$ 可逆，则 $x_k \to x^*$ $(k \to +\infty)$. 并且 $F(x^*) = 0$. 另外，对于所有充分大的 k，均成立 $x_{k+1} = x_k + \bar{s}_k$.

定理 4.1 表明，如果由 NGQCGB 方法所产生的序列 $\{x_k\}$ 收敛于非线性方程组 (1) 的解 x^*，则 $\{x_k\}$ 的最终敛速将由 $\bar{\eta}_k$ 的衰减速度所决定.

§5. NGLM 方法

在 NGQCGB 方法中，QCGB 策略作为 NGB 方法的一种补救措施，实质上是通过在一个子空间上极小化 $F(x)$ 在 x_k 的局部线性模型而得到一个方向 d_k，然后再通过线搜索技巧确定一个满足"充分下降"条件的步长因子 θ_k，并进而令 $x_{k+1} = x_k + \theta_k d_k$. 注意到执行 QCGB 策略的前提是在当前的不精确 Newton 方向 $\bar{s}_k$ 上后退 N_b 步后仍然没有得到一个"充分下降"步，因此我们可以断定在 Newton-GMRES 方法中所得到的不精确 Newton 方向 $\bar{s}_k$ 不是一个好方向. 导致这一结果的原因可能是 $F(x)$ 在 x_k 处的性态不够好，以至于由 Newton-GMRES 方法所计算出的 $\bar{s}_k$ 偏离 $f(x) = \dfrac{1}{2}\|F(x)\|_2^2$ 的最速下降方向 $-\bigtriangledown f(x_k)$ 太远，也可能是 $\|\bar{s}_k\|$ 太大，以至于 $F(x)$ 在 x_k 处的线性模型与 $F(x_k + \bar{s}_k)$ 的吻合太差.

基于上述分析，我们提出了另一种与 NGQCGB 方法相平行的，同样具有全局收敛性质的 Newton-GMRES 方法，简称为 NGLM 方法. 该方法是将 NGQCGB 方法中的 QCGB 策略用 Levenberg-Marquardt 策略替代而得到的. 在本质上来讲，LM 策略是一种信赖域型的方法.

假定在 NGB 方法的第 k 步迭代，Jacobi 矩阵 $F'(x_k)$ 是非奇异的，并且以 $s_k^0 = 0$ 为迭代初值的 GMRES 没有进行重启动. 我们构造子空间

$$\Omega_k = \mathrm{span}\{\tilde{g}_k, \Delta_{k-1}, v\},$$

其中

$$\Delta_{k-1} = x_k - x_{k-1}, \qquad \tilde{g}_k = V_m V_m^T g_k,$$

而 v 是 Krylov 子空间 $\mathcal{K}_m$ 的基 V_m 中满足

$$|v^T g_k| = \max_{1 \le j \le m} |v_j^T g_k|$$

的单位向量. 这样选取的向量 v 是 V_m 中与子空间 span$\{g_k\}$ 之间的夹角最小的向量.

如果在 Newton-GMRES 方法中所产生的不精确 Newton 方向 $\bar{s}_k$ 上后退 N_b 步以后, 仍然不能得到一个 "充分下降" 步, 则考虑在 Ω_k 上运用 Levenberg-Marquardt 方法来寻找一个新的搜索方向. 具体做法是: 首先确定 $\mu_k \geq 0$, 并求解

$$\left(W_k^T B_k W_k + \mu_k I\right) z_k = -W_k^T g_k, \tag{7}$$

其中 W_k 为 Ω_k 的标准正交基, $B_k = F'(x_k)^T F'(x_k)$. 如果 z_k 是 (7) 的解, 并且 $\tilde{s}_k = W_k z_k$ 满足充分下降条件, 则可得到下一迭代点 $x_{k+1} = x_k + \tilde{s}_k$. 否则, 适当增大 μ_k 的值, 并重新计算相应的 $\tilde{s}_k$, 直至得到满足充分下降条件的 $\tilde{s}_k$.

参数 μ_k 的确定, 对于算法的成功起着关键性的作用. 我们所采用的确定 μ_k 的方法为: $\mu_k = \rho_k \|F(x_k)\|^\tau$, 其中 $\tau \in (0,1]$ 为给定的常数.

定义函数 $F(x)$ 在点 x_k 处关于 s_k 的实际下降量 $\mathrm{Ared}_k(s_k)$ 及预计下降量 $\mathrm{Pred}_k(s_k)$ 分别为

$$\begin{aligned}\mathrm{Ared}_k(s_k) &= \|F(x_k)\| - \|F(x_k + s_k)\|,\\ \mathrm{Pred}_k(s_k) &= \|F(x_k)\| - \|F(x_k) + F'(x_k) s_k\|.\end{aligned}$$

现在, 我们即可给出 NGLM 方法的具体描述:

算法 5.1(NGLM 方法 [2])

1. 给定初值 x_0, 精度 ϵ_0, 及参数 $\eta_{max} \in [0,1)$, $0 < \alpha < 1$, $0 < \tau \leq 1, 0 < \theta_l < \theta_u < 1$, $N_b \geq 0$, $\vartheta > 1$. 置 $k := 0$, $\Delta_{-1} := 0$.

2. 如果 $\|F(x_k)\| > \epsilon_0$

   2.1. 选取 $\bar{\eta}_k \in [0, \eta_{max}]$.

   2.2. 通过 **GNE** 计算不精确 Newton 步 $\bar{s}_k$, 使其满足 $\|F(x_k) + F'(x_k)\,\bar{s}_k\| \leq \bar{\eta}_k$ $\|F(x_k)\|$.

   2.3. 在 $\bar{s}_k$ 上最多后退 N_b 步, 得到 s_k , 并得到相应的 η_k.

   2.4. 如果 $\|F(x_k + s_k)\| \leq [1 - \alpha\,(1 - \eta_k)]\,\|F(x_k)\|$, 则令 $\Delta_k := s_k$, 转步 2.6.

   2.5. 执行 LM 策略:

      2.5.1. 构造子空间 Ω_k, 并计算出相应的基 W_k. 取 $\rho_k = 10^{-4}$, $r_k = 0$.

      2.5.2. 如果 $r_k < \alpha$

      - 通过求解 $\left(W_k^T B_k W_k + \rho_k \|F(x_k)\|^\tau I\right) z = -W_k^T g_k$ 得到 z_k, 并计算 $\tilde{s}_k = W_k z_k$.
      - 令 $r_k = \mathrm{Ared}_k(\tilde{s}_k)/\mathrm{Pred}_k(\tilde{s}_k)$, $\rho_k := \vartheta \rho_k$.

      2.5.3. $\Delta_k := \tilde{s}_k$,

   2.6. $x_{k+1} = x_k + \Delta_k$.

   2.7. $k := k+1$.

算法 5.1 中步 2.5 是 LM 策略. 在每次执行 LM 策略时, 首先取 $\rho_k = 10^{-4}$, 然后在 LM 策略的循环体内不断地以 ϑ 倍来扩大 ρ_k. 循环终止的条件是 $\tilde{s}_k$ 对应的实际下降量

$\mathrm{Ared}_k(\tilde{s}_k)$ 与预计下降量 $\mathrm{Pred}_k(\tilde{s}_k)$ 的比值 r_k 大于常数 α.

在 NGLM 方法中，随着关于备选策略 LM 的循环体的执行，对应的步长 $\tilde{s}_k$ 在长度和方向上都在不断地发生着变化. 因此， LM 策略可以有效地克服不精确 Newton 方向不好的情形，从而大大提高 NGB 方法的强健性.

现在，我们给出 NGLM 方法的收敛定理.

定理 5.1[2]. 在 NGLM 方法中，取 $\epsilon_0 = 0$，并设已由该方法产生了一个无穷序列 $\{x_k\} \subset \mathbb{R}^n$. 如果 $\{x_k\}$ 有一个聚点 x^*，使得 $F'(x^*)$ 可逆，则 $x_k \to x^*$ $(k \to +\infty)$ 并且 $F(x^*) = 0$. 另外，当 k 充分大时，成立 $x_{k+1} = x_k + \bar{s}_k$.

定理 5.1 表明， NGLM 方法的最终敛速完全取决于强制序列 $\{\bar{\eta}_k\}$ 的衰减速度.

§6. 结论与注记

Newton-GMRES 方法是求解大规模稀疏非线性方程组的一种可行而有效的方法，它已在许多领域中得到了成功的应用 [15, 21]. 虽然纯粹的 Newton-GMRES 方法只具有局部收敛性质，难以满足实际应用对于算法的全局收敛性的需求，但当对它配以线搜索策略之后，即能将其改造为具有全局收敛性质的 NGB 方法. 尽管对于一些比较困难的问题 NGB 方法仍会失效，但是如果利用我们所提出的两种全局策略 (即 QCGB 和 LM) 对 NGB 方法加以修正和改进，则仍然能够得到具有较好强健性和全局收敛性的，并且能够快速而准确地求解坏条件非线性方程组的 Newton-GMRES 方法.

关于不精确 Newton 类算法，以下两个问题尚有待于进一步地去探讨和研究：

1. 如何选取恰当的强制序列？强制序列的性质对于不精确 Newton 法的可行性，强健性和计算效率等都起着重要作用，强制序列也是联系，协调和控制内外迭代的关键因素. 尽管现在对其选取已经有了若干较为可行的方法，但如何构造具有最优亦或拟最优性质的强制序列，则是值得去进一步探讨的.

2. 如何构造和分析非线性问题的非线性预处理子？目前，在非线性意义下对于预处理的研究还很少. 大量数值实验表明，当迭代初值远离原非线性方程组的真解时，由不精确 Newton 类算法所产生的迭代序列常常会收敛到 $\|F(x)\|$ 的一个局部极小点，从而导致算法出现 stagnation 现象. 为克服这种现象，对原非线性方程组进行合适的非线性预处理可能会是一种值得考虑的办法.

参 考 文 献

[1] H.-B. An and Z.-Z. Bai, *A globally convergent Newton-GMRES method for large sparse systems of nonlinear equations*, Preprint, 2003.

[2] H.-B. An and Z.-Z. Bai, *NGLM: A globally convergent Newton-GMRES method*, Math. Numer. Sinica. 27:2(2005) 151-174. (In Chinese)

[3] Z.-Z. Bai and P.-L. Tong, *On the affine invariant convergence theorems of inexact Newton method and Broyden's method*, J. Univ. Electr. Sci. Tech. China, 23:5(1994) 535-540. (In Chinese)

[4] S. Bellavia, M. Macconi and B. Morini, *A hybrid Newton-GMRES method for solving nonlinear equations*, Lecture Notes in Computer Science, L. Vulkov, J. Wasniewski and P. Yalamov eds., Vol. 1988, Springer-Verlag, (2000) 68-75.

[5] S. Bellavia and B. Morini, *A globally convergent Newton-GMRES subspace method for systems of nonlinear equations*, SIAM J. Sci. Comput., 23 (2001) 940-960.

[6] P.N. Brown and Y. Saad, *Hybrid Krylov methods for nonlinear systems of equations*, SIAM J. Sci. Statist. Comput., 11 (1990) 450-481.

[7] P.N. Brown and Y. Saad, *Convergence theory of nonlinear Newton-Krylov algorithms*, SIAM J. Optim., 4 (1994) 297-330.

[8] R.S. Dembo, S.C. Eisenstat and T. Steihaug, *Inexact Newton methods*, SIAM J. Numer. Anal., 19 (1982) 400-408.

[9] J.E. Dennis Jr. and R.B. Schnabel, *Numerical Methods for Unconstrained Optimization and Nonlinear Equations*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, N.J., 1983.

[10] S.C. Eisenstat and H.F. Walker, *Globally convergent inexact Newton methods*, SIAM J. Optim., 4 (1994) 393-422.

[11] S.C. Eisenstat and H.F. Walker, *Choosing the forcing term in an inexact Newton method*, SIAM J. Sci. Comput., 17 (1996) 16-32.

[12] I.E. Kaporin and O. Axelsson, *On a class of nonlinear equation solvers based on the residual norm reduction over a sequence of affine subspaces*, SIAM J. Sci. Comput., 16 (1995) 228-249.

[13] C.T. Kelley, *Iterative Methods for Linear and Nonlinear Equations*, SIAM, Philadelphia, 1995.

[14] D.A. Knoll and D.E. Keyes, *Jacobian-free Newton-Krylov methods: A survey of approaches and applications*, J. Comp. Phys., 193(2004) 357-397.

[15] D.A. Knoll and W.J. Rider, *A multigrid preconditioned Newton-Krylov method*, SIAM J. Sci. Statist. Comput., 21(1999) 691-710.

[16] J.M. Martinez, *Practical quasi-Newton methods for solving nonlinear systems*, J. Comput. Appl. Math., 124 (2000) 97-121.

[17] B. Morini, *Convergence behaviour of inexact Newton methods*, Math. Comp., 68(1999) 1605-1613.

[18] J.M. Ortega and W.C. Rheinboldt, *Iterative Solution of Nonlinear Equations in Several Variables*. Academic Press, New York, 1970.

[19] W.C. Rheinboldt, *Methods for Solving Systems of Nonlinear Equations*, SIAM, Philadelphia. 1998.

[20] Y. Saad and M.H. Schultz, *GMRES: A generalized minimal residual algorithm for solving nonsymmetric linear systems*, SIAM J. Sci. Comput., 7 (1986) 856-869.

[21] R.S. Tuminaro, H.F. Walker and J.N. Shadid, *On backtracking failure in Newton-GMRES methods with a demonstration for the Navier-Stokes equations*, J. Comp. Phys., 180(2002) 549-558.

[22] Y.-X. Yuan and J. Stoer, *A subspace study on conjugate gradient algorithms*, ZAMM, 75:11 (1995) 69-77.