

МЕТОД НЬЮТОНА–РАФСОНА ДЛЯ БЕЗУСЛОВНОЙ МИНИМИЗАЦИИ*

В. Н. Малозёмов
v.malozemov@spbu.ru

14 февраля 2019 г.

Аннотация. Приводится полный анализ метода Ньютона–Рафсона с регулировкой шага для безусловной минимизации дважды непрерывно дифференцируемых функций — от описания метода до оценки скорости сходимости.

1°. Пусть $f \in C^2(\mathbb{R}^n)$. Рассматривается экстремальная задача

$$f(x) \rightarrow \min_{x \in \mathbb{R}^n}. \quad (1)$$

На первом этапе решается более скромная задача: найти точку x_* , удовлетворяющую необходимому условию минимума $f'(x_*) = \mathbb{O}$. Далее, желательно выяснить, будет ли x_* точкой строгого локального минимума функции $f(x)$ на \mathbb{R}^n .

Для решения уравнения $f'(x) = \mathbb{O}$ будем применять метод последовательных приближений, основанный на идее линеаризации. Пусть имеется k -е приближение x_k . Возьмём линейную часть разложения вектор-функции $f'(x)$ в окрестности точки x_k :

$$f'(x) \approx f'(x_k) + f''(x_k)(x - x_k).$$

Решив линеаризованное уравнение

$$f'(x_k) + f''(x_k)(x - x_k) = \mathbb{O},$$

найдем очередное приближение x_{k+1} . Формально

$$x_{k+1} = x_k - (f''(x_k))^{-1} f'(x_k).$$

Обозначим

$$p_k = -(f''(x_k))^{-1} f'(x_k) \quad (2)$$

*Семинар по конструктивному негладкому анализу и недифференцируемой оптимизации «CNSA & NDO»: <http://www.apmath.spbu.ru/cnsa/>

и перепишем последнюю формулу в виде

$$x_{k+1} = x_k + p_k.$$

Сдвиг p_k может оказаться слишком большим и привести даже к увеличению значения функции $f(x)$. Мы проявим осторожность и положим

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k, \quad (3)$$

где α_k — некоторое число из промежутка $(0, 1]$. Обычно в качестве α_k берётся первое число в последовательности $1, \frac{1}{2}, \frac{1}{4}, \dots$, при котором выполнится неравенство

$$f(x_k + \alpha_k p_k) \leq f(x_k) + \varepsilon \alpha_k \langle f'(x_k), p_k \rangle. \quad (4)$$

Здесь $\varepsilon \in (0, \frac{1}{2})$ — параметр метода.

Приведённые соображения позволяют описать метод последовательных приближений для решения уравнения $f'(x) = \mathbb{O}$, ориентированный на минимизацию функции $f(x)$.

В качестве начального приближения берётся произвольная точка x_0 .

Пусть уже имеется k -е приближение x_k . Если $f'(x_k) = \mathbb{O}$, то вычисления заканчиваются. В противном случае строим очередное приближение x_{k+1} по формуле (3), где вектор p_k имеет вид (2) и α_k — первое число в последовательности $1, \frac{1}{2}, \frac{1}{4}, \dots$, при котором выполняется неравенство (4).

Данный метод называется *методом Ньютона–Рафсона с регуляризацией шага*.

2°. Доказательство сходимости метода Ньютона–Рафсона будет проводиться при дополнительном предположении. Будем считать, что при всех x и h из \mathbb{R}^n выполняются неравенства

$$m \|h\|^2 \leq \langle f''(x)h, h \rangle \leq M \|h\|^2, \quad (5)$$

где m и M — положительные константы. Левое неравенство характеризует функцию $f(x)$ как сильно выпуклую.

Нам потребуются три вспомогательных предложения.

ЛЕММА 1. *Если для функции $f(x)$ из $C^2(\mathbb{R}^n)$ выполняется условие (5), то при всех $x \in \mathbb{R}^n$ существует обратная матрица $(f''(x))^{-1}$ и при всех x и h из \mathbb{R}^n справедливы неравенства*

$$\frac{1}{M} \|h\|^2 \leq \langle (f''(x))^{-1}h, h \rangle \leq \frac{1}{m} \|h\|^2. \quad (6)$$

При этом

$$\|f''(x)\| \leq M \quad \text{и} \quad \|(f''(x))^{-1}\| \leq \frac{1}{m} \quad \text{для всех } x \in \mathbb{R}^n. \quad (7)$$

Доказательство. Зафиксируем $x \in \mathbb{R}^n$ и обозначим $A = f''(x)$. Матрица A симметричная, поэтому у неё существует полный набор ортонормированных собственных векторов h_1, \dots, h_n , соответствующих вещественным собственным числам $\lambda_1 \leq \dots \leq \lambda_n$. Напомним, что

$$\lambda_1 = \min_{\|h\|=1} \langle Ah, h \rangle, \quad \lambda_n = \max_{\|h\|=1} \langle Ah, h \rangle.$$

В силу (5)

$$0 < m \leq \lambda_1, \quad \lambda_n \leq M. \quad (8)$$

По определению собственных чисел и собственных векторов имеем

$$Ah_k = \lambda_k h_k, \quad k \in 1 : n. \quad (9)$$

Обозначим через P матрицу со столбцами h_1, \dots, h_n и через Λ — диагональную матрицу с диагональными элементами $\lambda_1, \dots, \lambda_n$. Тогда формулу (9) можно переписать в виде

$$AP = P\Lambda. \quad (10)$$

В силу ортонормированности, $P^T P = E$, где E — единичная матрица. Отсюда следует, что

$$P = (P^T)^{-1}. \quad (11)$$

Умножив обе части равенства (10) справа на матрицу P^T , придём к спектральному разложению матрицы A :

$$A = P\Lambda P^T. \quad (12)$$

В правой части равенства (12) стоит обратимая матрица, причём в силу (11)

$$(P\Lambda P^T)^{-1} = P\Lambda^{-1}P^T,$$

где Λ^{-1} — диагональная матрица с диагональными элементами $\frac{1}{\lambda_1}, \dots, \frac{1}{\lambda_n}$. Значит, матрица A также обратима и для обратной матрицы A^{-1} справедливо спектральное разложение

$$A^{-1} = P\Lambda^{-1}P^T.$$

Собственными числами матрицы A^{-1} являются числа $\frac{1}{\lambda_1} \geq \dots \geq \frac{1}{\lambda_n}$. При этом

$$\frac{1}{\lambda_n} = \min_{\|h\|=1} \langle A^{-1}h, h \rangle, \quad \frac{1}{\lambda_1} = \max_{\|h\|=1} \langle A^{-1}h, h \rangle.$$

Отсюда и из (8), с учётом определения матрицы A , следуют неравенства (6).

Переходим к доказательству неравенств (7). Имеем

$$\|Ah\|^2 = \langle Ah, Ah \rangle = \langle A^2h, h \rangle. \quad (13)$$

Так как в силу (12) и (11)

$$A^2 = (P\Lambda P^T)(P\Lambda P^T) = P\Lambda^2 P^T,$$

то собственными числами матрицы A^2 являются числа $\lambda_1^2 \leq \dots \leq \lambda_n^2$. В частности,

$$\max_{\|h\|=1} \langle A^2 h, h \rangle = \lambda_n^2 \leq M^2. \quad (14)$$

На основании (13) и (14) приходим к неравенству

$$\|Ah\|^2 \leq M^2 \|h\|^2.$$

Вспоминая определение нормы матрицы, получаем

$$\|A\| := \max_{\|h\|=1} \|Ah\| \leq M.$$

Аналогично, со ссылкой на (6), выводится оценка

$$\|A^{-1}\| \leq \frac{1}{m}.$$

Лемма доказана. □

По поводу использованных выше фактов из линейной алгебры см., например, [1].

ЛЕММА 2. Пусть функция $f(x)$ принадлежит классу $C^2(\mathbb{R}^n)$ и выполнено условие

$$\langle f''(x)h, h \rangle \geq m \|h\|^2 \quad \text{при всех } x \text{ и } h \text{ из } \mathbb{R}^n, \quad (15)$$

где $m > 0$. Утверждается, что у функции $f(x)$ существует единственная точка глобального минимума x_* . В ней, и только в ней, градиент функции $f(x)$ равен нулю.

Доказательство. Возьмём произвольную точку $x_0 \in \mathbb{R}^n$ и введём множество

$$L(x_0) = \left\{ x \in \mathbb{R}^n \mid f(x) \leq f(x_0) \right\}.$$

Для всех точек $x \in L(x_0)$ по теореме о среднем имеем

$$f(x_0) \geq f(x) = f(x_0) + \langle f'(x_0), x - x_0 \rangle + \frac{1}{2} \langle f''(x_0 + \theta(x - x_0))(x - x_0), x - x_0 \rangle,$$

где $\theta \in (0, 1)$. Согласно (15)

$$0 \geq \langle f'(x_0), x - x_0 \rangle + \frac{1}{2} m \|x - x_0\|^2,$$

так что

$$\|x - x_0\|^2 \leq -\frac{2}{m} \langle f'(x_0), x - x_0 \rangle \leq \frac{2}{m} \|f'(x_0)\| \cdot \|x - x_0\|.$$

Отсюда следует, что

$$\|x - x_0\| \leq \frac{2}{m} \|f'(x_0)\| \quad \forall x \in L(x_0). \quad (16)$$

Неравенство (16) показывает, что множество $L(x_0)$ ограниченное. По определению оно замкнутое. Значит, у функции $f(x)$ на множестве $L(x_0)$ существует точка минимума x_* . Так как $f(x) > f(x_0)$ при $x \notin L(x_0)$, то x_* является точкой глобального минимума функции $f(x)$.

По необходимому условию минимума $f'(x_*) = \mathbb{O}$. Отметим, что в силу (16)

$$\|x - x_*\| \leq \frac{2}{m} \|f'(x_*)\| = 0 \quad \forall x \in L(x_*).$$

Это значит, что $f(x) > f(x_*)$ при $x \neq x_*$, то есть, что x_* — единственная точка глобального минимума.

Покажем, что $f'(x) = \mathbb{O}$ только при $x = x_*$. Пусть $f'(\hat{x}) = \mathbb{O}$. Имеем $f(x_*) \leq f(\hat{x})$. Согласно (16)

$$\|x_* - \hat{x}\| \leq \frac{2}{m} \|f'(\hat{x})\| = 0.$$

Значит, $\hat{x} = x_*$. Лемма доказана. \square

ЛЕММА 3. Пусть C — произвольная матрица порядка n и g — произвольный n -мерный вектор. Тогда для функции $f \in C^2(\mathbb{R}^n)$ справедлив следующий вариант теоремы о среднем для градиентов:

$$\langle C(f'(y) - f'(x)), g \rangle = \langle C f''(x + \theta(y - x))(y - x), g \rangle, \quad (17)$$

где $\theta \in (0, 1)$.

Доказательство. Обозначим $\xi(t) = x + t(y - x)$. Ясно, что $\xi'(t) = y - x$. Введём функцию одной переменной

$$\varphi(t) = \langle C f'(\xi(t)), g \rangle = \sum_{i=1}^n g[i] \sum_{j=1}^n C[i, j] f'(\xi(t))[j].$$

Согласно цепному правилу дифференцирования получим

$$\begin{aligned}
\varphi'(t) &= \sum_{i=1}^n g[i] \sum_{j=1}^n C[i, j] \sum_{k=1}^n f''(\xi(t))[j, k] \xi'(t)[k] = \\
&= \sum_{i=1}^n g[i] \sum_{k=1}^n \xi'(t)[k] \sum_{j=1}^n C[i, j] f''(\xi(t))[j, k] = \\
&= \sum_{i=1}^n g[i] \sum_{k=1}^n \xi'(t)[k] \left(C f''(\xi(t)) \right) [i, k] = \\
&= \sum_{i=1}^n g[i] \left(C f''(\xi(t)) \xi'(t) \right) [i] = \left\langle C f''(\xi(t)) \xi'(t), g \right\rangle.
\end{aligned}$$

По формуле Лагранжа

$$\varphi(1) - \varphi(0) = \varphi'(\theta) = \left\langle C f''(\xi(\theta))(y - x), g \right\rangle,$$

где $\theta \in (0, 1)$. Остаётся учесть, что левую часть этого равенства можно представить в виде

$$\left\langle C(f'(y) - f'(x)), g \right\rangle.$$

Лемма доказана. □

3°. Обратимся к доказательству сходимости метода Ньютона–Рафсона. По описанию метод будет конечным, если при некотором k выполнится равенство $f'(x_k) = \mathbb{O}$. Этот случай не требует дополнительного анализа.

Предположим, что последовательность $\{x_k\}$, построенная методом Ньютона–Рафсона, бесконечная.

ТЕОРЕМА. Если функция $f(x)$ принадлежит классу $C^2(\mathbb{R}^n)$ и выполняется условие (5), то последовательность $\{x_k\}$ сходится к точке глобального минимума x_* функции $f(x)$ со сверхлинейной скоростью, то есть

$$\|x_{k+1} - x_*\| \leq q_k \|x_k - x_*\|, \quad k = 0, 1, 2, \dots, \quad (18)$$

где $q_k \rightarrow 0$ при $k \rightarrow \infty$.

Доказательство. Будем использовать упрощённые обозначения

$$f'_k = f'(x_k), \quad f''_k = f''(x_k).$$

Согласно (2) и (5) имеем

$$\begin{aligned}
\langle f'_k, p_k \rangle &= \langle f''_k (f''_k)^{-1} f'_k, p_k \rangle = \\
&= -\langle f''_k p_k, p_k \rangle \leq -m \|p_k\|^2.
\end{aligned}$$

Отсюда следуют оценки

$$\|p_k\|^2 \leq -\frac{1}{m} \langle f'_k, p_k \rangle \quad (19)$$

и

$$\|p_k\| \leq \frac{1}{m} \|f'_k\|. \quad (20)$$

Далее по теореме о среднем

$$f(x_k + \alpha p_k) = f(x_k) + \alpha \langle f'_k, p_k \rangle + \frac{1}{2} \alpha^2 \langle f''(x_k + \theta_k \alpha p_k) p_k, p_k \rangle,$$

где $\theta_k \in (0, 1)$. В силу (5) и (19)

$$\langle f''(x_k + \theta_k \alpha p_k) p_k, p_k \rangle \leq M \|p_k\|^2 \leq -\frac{M}{m} \langle f'_k, p_k \rangle,$$

поэтому

$$f(x_k + \alpha p_k) \leq f(x_k) + \alpha \langle f'_k, p_k \rangle \left(1 - \frac{\alpha M}{2m}\right).$$

Отметим, что при $1 - \frac{\alpha M}{2m} \geq \varepsilon$ и $\alpha > 0$, то есть при

$$0 < \alpha \leq \frac{2m(1 - \varepsilon)}{M}, \quad (21)$$

выполняется неравенство

$$f(x_k + \alpha p_k) \leq f(x_k) + \varepsilon \alpha \langle f'_k, p_k \rangle. \quad (22)$$

Напомним, что шаг α_k выбирается как первое число в последовательности $1, \frac{1}{2}, \frac{1}{4}, \dots$, при котором

$$f(x_k + \alpha_k p_k) \leq f(x_k) + \varepsilon \alpha_k \langle f'_k, p_k \rangle. \quad (23)$$

Покажем, что

$$\alpha_k \geq \frac{m(1 - \varepsilon)}{M}. \quad (24)$$

При $\frac{2m(1 - \varepsilon)}{M} \geq 1$ число $\alpha = 1$ удовлетворяет условию (21). Как следствие, при $\alpha = 1$ справедливо неравенство (22). Значит, $\alpha_k = 1$. В то же время правая часть неравенства (24) меньше единицы.

Пусть $\frac{2m(1 - \varepsilon)}{M} < 1$. Тогда найдётся натуральное число s , такое, что

$$\frac{1}{2^s} \leq \frac{2m(1 - \varepsilon)}{M} < \frac{1}{2^{s-1}}.$$

При $\alpha = \frac{1}{2^s}$ неравенство (22) выполняется. По определению α_k имеем $\alpha_k \geq \frac{1}{2^s}$. Так как

$$\frac{1}{2^s} = \frac{1}{2 \cdot 2^{s-1}} > \frac{m(1 - \varepsilon)}{M},$$

то для α_k справедливо неравенство (24).

Важным следствием неравенства (24) является тот факт, что шаг α_k будет найден за конечное число испытаний (проверок неравенства (4)).

Перепишем формулу (23) в виде

$$f(x_k) - f(x_{k+1}) \geq \varepsilon \alpha_k (-\langle f'_k, p_k \rangle).$$

В силу (2) и (6)

$$-\langle f'_k, p_k \rangle = \langle (f''_k)^{-1} f'_k, f'_k \rangle \geq \frac{1}{M} \|f'_k\|^2.$$

С учётом (24) получаем

$$f(x_k) - f(x_{k+1}) \geq \frac{\varepsilon(1-\varepsilon)m}{M^2} \|f'_k\|^2.$$

Отсюда и из ограниченности снизу монотонно убывающей последовательности $\{f(x_k)\}$ следует, что $\|f'_k\| \rightarrow 0$ при $k \rightarrow \infty$. Согласно (20) и $\|p_k\| \rightarrow 0$ при $k \rightarrow \infty$.

По лемме 2 у функции $f(x)$ существует точка глобального минимума x_* . Ясно, что $f(x_*) \leq f(x_k)$ при всех k . В силу (16)

$$\|x_* - x_k\| \leq \frac{2}{m} \|f'_k\|, \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

Как отмечалось, $\|f'_k\| \rightarrow 0$. Значит, $x_k \rightarrow x_*$ при $k \rightarrow \infty$.

Сходимость метода Ньютона–Рафсона установлена. Займёмся оценкой скорости сходимости.

Покажем, что, начиная с некоторого номера, $\alpha_k = 1$. Имеем

$$f(x_k + p_k) = f(x_k) + \langle f'_k, p_k \rangle + \frac{1}{2} \langle f''_k p_k, p_k \rangle + \frac{1}{2} \langle (f''_{k_c} - f''_k) p_k, p_k \rangle,$$

где аргументом у f''_{k_c} является средняя точка $x_{k_c} = x_k + \theta_k p_k$, $\theta_k \in (0, 1)$. Согласно (2)

$$\langle f''_{k_c} p_k, p_k \rangle = -\langle f'_k, p_k \rangle. \quad (25)$$

Кроме того, в силу (19)

$$\langle (f''_{k_c} - f''_k) p_k, p_k \rangle \leq \|f''_{k_c} - f''_k\| \cdot \|p_k\|^2 \leq -\frac{1}{m} \|f''_{k_c} - f''_k\| \langle f'_k, p_k \rangle. \quad (26)$$

На основании (25) и (26) получаем

$$f(x_k + p_k) \leq f(x_k) + \langle f'_k, p_k \rangle \left(\frac{1}{2} - \frac{\|f''_{k_c} - f''_k\|}{2m} \right). \quad (27)$$

Обозначим $f''_* = f''(x_*)$. Очевидно, что

$$\|f''_{k_c} - f''_k\| \leq \|f''_{k_c} - f''_*\| + \|f''_k - f''_*\|. \quad (28)$$

Так как $x_k \rightarrow x_*$ и $x_{k_c} \rightarrow x_*$, то по непрерывности правая часть неравенства (28) стремится к нулю. Значит, и $\|f''_{k_c} - f''_k\| \rightarrow 0$.

Вспоминая, что параметр метода ε принадлежит интервалу $(0, \frac{1}{2})$, заключаем, что при достаточно больших k будет

$$\frac{1}{2} - \frac{\|f''_{k_c} - f''_k\|}{2m} \geq \varepsilon.$$

Неравенство (27) примет вид

$$f(x_k + p_k) \leq f(x_k) + \varepsilon \langle f'_k, p_k \rangle.$$

В этом случае по определению $\alpha_k = 1$. Будем считать, что $\alpha_k = 1$ при $k \geq N$.

Теперь легко получить оценку скорости сходимости (18). При $k < N$ положим

$$q_k = \frac{\|x_{k+1} - x_*\|}{\|x_k - x_*\|}.$$

В этом случае неравенство (18) выполняется как равенство.

Пусть $k \geq N$. Тогда $x_{k+1} = x_k + p_k$ и

$$\|x_{k+1} - x_*\|^2 = \langle x_k - x_* - (f''_k)^{-1} f'_k, x_{k+1} - x_* \rangle. \quad (29)$$

Так как $f'_* := f'(x_*) = \mathbb{O}$, то по лемме 3

$$\begin{aligned} \langle (f''_k)^{-1} f'_k, x_{k+1} - x_* \rangle &= \langle (f''_k)^{-1} (f'_k - f'_*), x_{k+1} - x_* \rangle = \\ &= \langle (f''_k)^{-1} f''_{k_*} (x_k - x_*), x_{k+1} - x_* \rangle, \end{aligned}$$

где аргументом у f''_{k_*} является средняя точка $x_{k_*} = x_* + \theta_k(x_k - x_*)$, $\theta_k \in (0, 1)$. Формула (29) принимает вид

$$\|x_{k+1} - x_*\|^2 = \langle (f''_k)^{-1} (f''_k - f''_{k_*})(x_k - x_*), x_{k+1} - x_* \rangle.$$

Отсюда следует, что

$$\|x_{k+1} - x_*\|^2 \leq \|(f''_k)^{-1}\| \cdot \|f''_k - f''_{k_*}\| \cdot \|x_k - x_*\| \cdot \|x_{k+1} - x_*\|.$$

Положив

$$q_k = \|(f''_k)^{-1}\| \cdot \|f''_k - f''_{k_*}\|,$$

придём к неравенству (18).

Так как $x_k \rightarrow x_*$ и $x_{k_*} \rightarrow x_*$, то $\|f''_k - f''_{k_*}\| \rightarrow 0$. При этом, согласно (7), $\|(f''_k)^{-1}\| \leq \frac{1}{m}$. Значит, $q_k \rightarrow 0$ при $k \rightarrow \infty$.

Теорема доказана. \square

З а м е ч а н и е. Пусть в дополнение к условиям теоремы выполняется неравенство

$$\|f''(y) - f''(x)\| \leq L\|x - y\| \quad \text{для всех } x \text{ и } y \text{ из } \mathbb{R}^n.$$

Тогда при больших k справедлива оценка

$$\|x_{k+1} - x_k\| \leq \frac{L}{m}\|x_k - x_*\|^2. \quad (30)$$

Действительно, нужно учесть вид q_k и тот факт, что

$$\|x_k - x_{k*}\| = \|(1 - \theta_k)(x_k - x_*)\| \leq \|x_k - x_*\|.$$

Оценка (30) позволяет говорить о квадратичной скорости сходимости последовательности $\{x_k\}$ к x_* .

4°. Численные методы нелинейного программирования рассматриваются в книгах [2] и [3]. Современному анализу метода Ньютона посвящена обзорная статья [4].

ЛИТЕРАТУРА

1. Малозёмов В. Н. *Линейная алгебра без определителей. Квадратичная функция.* СПб.: Изд-во СПбГУ, 1997, 80 с.
2. Пшеничный Б. Н., Данилин Ю. М. *Численные методы в экстремальных задачах.* М.: Наука, 1975. 320 с.
3. Васильев Ф. П. *Методы оптимизации. Часть 1.* М.: МЦНМО, 2011. 620 с.
4. Поляк Б. Т. *Метод Ньютона и его роль в оптимизации и вычислительной математике* // Труды ИСА РАН, 2006. Т. 28. С. 48–66.