Слабая сходимость геометрического варианта метода сопряжённых градиентов

А. В. Плоткин

9 октября 2018 г.

1°. Пусть $f \in C^1(\mathbb{R}^n)$. Рассмотрим экстремальную задачу

$$f(x) \to \min_{x \in \mathbb{R}^n}.$$

Для нахождения стационарной точки функции $f(x)$ применяется метод сопряжённых градиентов [1, 2]. В данной работе доказывается слабая сходимость геометрического варианта метода сопряжённых градиентов, предложенного в докладе [3].

Обозначим $g(x) = f'(x)$ и перейдём к описанию вычислительной схемы.

Начальный шаг. Возьмём произвольное начальное приближение $x_0 \in \mathbb{R}^n$ и вычислим в нём значение градиента $g_0 = g(x_0)$. Если $g_0 = \mathbb{0}$, то x_0 — стационарная точка. Вычисления заканчиваются. В противном случае, укажем первое направление спуска $d_0 = -g_0$.

Общий шаг. Пусть имеются x_k, d_k. Введём функцию

$$\varphi_k(\alpha) = f(x_k + \alpha d_k), \quad \alpha > 0.$$

Следующее приближение x_{k+1} вычислим по формуле

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k,$$

где α_k является первой стационарной точкой функции $\varphi_k(\alpha)$:

$$\alpha_k = \min\bigl\{\alpha > 0 \mid \varphi'_k(\alpha) = 0\bigr\}.$$

В полученной точке найдём значение градиента $g_{k+1} = g(x_{k+1})$. Если $g_{k+1} = \mathbb{0}$, то x_{k+1} — стационарная точка. Вычисления заканчиваются. В противном случае, найдём следующее направление спуска по формуле

$$d_{k+1} = \frac{\|g_{k+1}\|^2 d_k + \|d_k\|^2 (-g_{k+1})}{\|g_{k+1}\|^2 + \|d_k\|^2}.$$

Для доказательства слабой сходимости представленного метода потребуем выполнения двух условий.

Условие 1. *Множество* $M = \bigl\{x \in \mathbb{R}^n \mid f(x) \leqslant f(x_1)\bigr\}$ *ограничено.*

Условие 2. *В некоторой окрестности* U *множества* M *градиент* $g(x)$ *удовлетворяет условию Липшица, то есть существует константа* $L > 0$, *такая что*

$$\|g(x) - g(y)\| \leqslant L\,\|x - y\| \quad \forall x, y \in U.$$

Сформулируем теорему о слабой сходимости геометрического варианта метода сопряжённых градиентов.

Теорема (о слабой сходимости)**.** *Пусть выполнены условия 1 и 2, тогда*

$$\varliminf_{k\to\infty} \|g_k\| = 0.$$

2°. Доказательство теоремы потребует нескольких вспомогательных результатов. Отметим некоторые свойства описанного метода.

Свойство 1. *Для всех* $k \geqslant 1$ *выполняется равенство* $\langle -g_k, d_{k-1} \rangle = 0$.

Доказательство. Следует из определения α_k. □

Свойство 2. *Для всех* $k \geqslant 0$ *выполняется равенство* $\langle -g_k, d_k \rangle = \|d_k\|^2$.

Доказательство. При $k = 0$ равенство очевидно. Рассмотрим случай $k \geqslant 1$. Воспользовавшись свойством 1, распишем обе части доказываемого равенства:

$$\langle -g_k, d_k \rangle = \frac{\|g_k\|^2 \|d_{k-1}\|^2}{\|g_k\|^2 + \|d_{k-1}\|^2} \quad \forall k \geqslant 1,$$

$$\|d_k\|^2 = \frac{\|g_k\|^4 \|d_{k-1}\|^2 + \|d_{k-1}\|^4 \|g_k\|^2}{\left(\|g_k\|^2 + \|d_{k-1}\|^2\right)^2} = \frac{\|g_k\|^2 \|d_{k-1}\|^2}{\|g_k\|^2 + \|d_{k-1}\|^2} \quad \forall k \geqslant 1.$$

Отсюда следует требуемое равенство для всех $k \geqslant 0$. □

На рис. 1 приведено взаимное положение векторов d_{k-1}, d_k и $-g_k$.

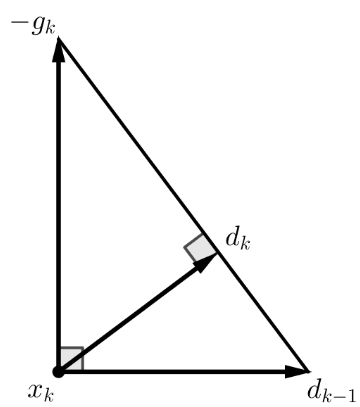

Рис. 1. Геометрия метода

При выполнении условия 1 метод является реализуемым. Действительно, на каждом шаге метода направление d_k сохраняет свойство убывания, так как

$$\varphi_k'(0) = \langle g_k, d_k \rangle = -\|d_k\|^2 < 0,$$

что совместно с условием 1 гарантирует существование стационарной точки функции $\varphi_k(\alpha)$ и положительность α_k.

Лемма. *Пусть выполнены условия 1 и 2, тогда*

$$\sum_{k \geqslant 0} \|d_k\|^2 < +\infty.$$

Доказательство. В силу условия 2 и свойства 2 имеем

$$\begin{aligned}\varphi_k'(\alpha) &= \varphi_k'(0) + \big(\varphi_k'(\alpha) - \varphi_k'(0)\big) = \\ &= \varphi_k'(0) + \big(\langle g(x_k + \alpha d_k), d_k\rangle - \langle g(x_k), d_k\rangle\big) = \\ &= \varphi_k'(0) + \langle g(x_k + \alpha d_k) - g(x_k), d_k\rangle \leqslant \varphi_k'(0) + L\alpha \left\|d_k\right\|^2 = \\ &= (L\alpha - 1)\left\|d_k\right\|^2 \quad \forall k \geqslant 0.\end{aligned}$$

Подставив в полученное неравенство α_k, получим

$$\alpha_k \geqslant \frac{1}{L} \quad \forall k \geqslant 0.$$

Следовательно,

$$\varphi_k(0) - \varphi_k(\alpha_k) = -\int_0^{\alpha_k} \varphi_k'(\alpha)d\alpha = -\int_0^{\frac{1}{L}} \varphi_k'(\alpha)d\alpha - \int_{\frac{1}{L}}^{\alpha_k} \varphi_k'(\alpha)d\alpha \geqslant$$

$$\geqslant -\int_0^{\frac{1}{L}} \varphi_k'(\alpha)d\alpha \geqslant \int_0^{\frac{1}{L}} (1 - L\alpha)\left\|d_k\right\|^2 d\alpha = \frac{1}{2L}\left\|d_k\right\|^2 \quad \forall k \geqslant 0.$$

Таким образом,

$$f(x_i) = f(x_0) - \sum_{k=0}^{i-1}\big(f(x_k) - f(x_{k+1})\big) \leqslant f(x_0) - \frac{1}{2L}\sum_{k=0}^{i-1}\left\|d_k\right\|^2 \quad \forall i \geqslant 0.$$

В силу условия 1 функция $f(x)$ ограничена снизу. Следовательно,

$$\sum_{k\geqslant 0}\left\|d_k\right\|^2 < +\infty.$$

□

Доказательство теоремы. Пусть вывод теоремы неверен, тогда найдётся константа $\varepsilon > 0$, такая что

$$\left\|g_k\right\|^2 \geqslant \varepsilon \quad \forall k \geqslant 0. \tag{1}$$

Докажем по индукции, что в этом случае

$$\left\|d_k\right\|^2 \geqslant \frac{\varepsilon}{k+1} \quad \forall k \geqslant 0. \tag{2}$$

При $k = 0$ неравенство верно. Сделаем индукционный переход от k к $k+1$:

$$\left\|d_{k+1}\right\|^2 = \frac{\left\|g_{k+1}\right\|^2\left\|d_k\right\|^2}{\left\|g_{k+1}\right\|^2 + \left\|d_k\right\|^2} = \frac{1}{\frac{1}{\left\|d_k\right\|^2} + \frac{1}{\left\|g_{k+1}\right\|^2}}.$$

Воспользовавшись индукционным предположением и неравенством (1), получим

$$\left\|d_{k+1}\right\|^2 \geqslant \frac{1}{\frac{k+1}{\varepsilon} + \frac{1}{\varepsilon}} = \frac{\varepsilon}{k+2}.$$

Таким образом, неравенство (2) установлено. Следовательно,

$$\sum_{k\geqslant 0}\left\|d_k\right\|^2 \geqslant \varepsilon\sum_{k\geqslant 0}\frac{1}{k+1} = +\infty.$$

Получили противоречие с доказанной леммой. Сходимость установлена. □

Список литературы

[1] W. W. Hager and H. Zhang. *A Survey of Nonlinear Conjugate Gradient Methods* // Pacific Journal of Optimization, Vol. 2, 2006, pp. 35–58.

[2] В. Н. Малозёмов. *О методе сопряжённых градиентов* // Семинар «DHA & CAGD». Избранные доклады. 8 апреля 2012 г. (`http://dha.spb.ru/reps12.shtml#0428`)

[3] В. Н. Малозёмов. *Варианты метода сопряжённых градиентов* // Семинар «CNSA & NDO». Избранные доклады. 29 октября 2015 г. (`http://www.apmath.spbu.ru/cnsa/reps15.shtml#1029`)