МЕТОД НЬЮТОНА–РАФСОНА ДЛЯ БЕЗУСЛОВНОЙ МИНИМИЗАЦИИ

В. Н. Малозёмов

25 сентября 2018 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

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

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

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

найдём очередное приближение x_{k+1}. Формально

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

Обозначим

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

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

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k, \tag{3}$$

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

$$f(x_k + \alpha_k p_k) \leqslant f(x_k) + \varepsilon \alpha_k \big\langle f'(x_k), p_k \big\rangle. \tag{4}$$

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 $1, \frac{1}{2}, \frac{1}{4}, \ldots$, при котором выполняется неравенство (4).

Данный метод называется *методом Ньютона–Рафсона с регулировкой 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

$$m\|h\|^2 \leqslant \big\langle f''(x)h, h \big\rangle \leqslant M\|h\|^2, \tag{5}$$

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 $\big(f''(x)\big)^{-1}$ и при всех x и h из $\mathbb{R}^n$ справедливы неравенства*

$$\frac{1}{M}\|h\|^2 \leqslant \Big\langle \big(f''(x)\big)^{-1}h, h \Big\rangle \leqslant \frac{1}{m}\|h\|^2. \tag{6}$$

При этом

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

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 $\lambda_1 \leqslant \dots \leqslant \lambda_n$. Напомним, что

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

В силу (5)

$$0 < m \leqslant \lambda_1, \quad \lambda_n \leqslant M. \tag{8}$$

По определению собственных чисел и собственных векторов имеем

$$Ah_k = \lambda_k h_k, \quad k \in 1:n. \tag{9}$$

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

$$AP = P\Lambda. \tag{10}$$

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

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

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

$$A = P\Lambda P^T. \tag{12}$$

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 $\frac{1}{\lambda_1} \geqslant \dots \geqslant \frac{1}{\lambda_n}$. 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

$$\|Ah\|^2 = \langle Ah, Ah \rangle = \langle A^2 h, h \rangle. \tag{13}$$

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 $\lambda_1^2 \leqslant \ldots \leqslant \lambda_n^2$. В частности,

$$\max_{\|h\|=1} \langle A^2 h, h\rangle = \lambda_n^2 \leqslant M^2. \tag{14}$$

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

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

Вспоминая определение нормы матрицы, получаем

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

Аналогично, со ссылкой на (6), выводится оценка

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

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*

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

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

$$L(x_0) = \Big\{ x \in \mathbb{R}^n \mid f(x) \leqslant f(x_0) \Big\}.$$

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

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

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

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

так что

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

Отсюда следует, что

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

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)

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

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 $f(x_*) \leqslant f(\hat{x})$. Согласно (16)

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

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

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:*

$$\Big\langle C\big(f'(y) - f'(x)\big), g\Big\rangle = \Big\langle Cf''\big(x + \theta(y - x)\big)(y - x), g\Big\rangle, \tag{17}$$

где $\theta \in (0, 1)$.

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

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

Согласно цепному правилу дифференцирования получим

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

По формуле Лагранжа

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

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

$$\Big\langle C\big(f'(y) - f'(x)\big), g \Big\rangle.$$

Лемма доказана. $\square$

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*

$$\|x_{k+1} - x_*\| \leqslant q_k \|x_k - x_*\|, \quad k = 0, 1, 2, \ldots, \tag{18}$$

где $q_k \to 0$ при $k \to \infty$.

Доказательство. Будем использовать упрощённые обозначения

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

Согласно (2) и (5) имеем

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

Отсюда следуют оценки

$$\|p_k\|^2 \leqslant -\tfrac{1}{m}\langle f_k', p_k\rangle \tag{19}$$

и

$$\|p_k\| \leqslant \tfrac{1}{m}\|f_k'\|. \tag{20}$$

Далее по теореме о среднем

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

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

$$\big\langle f''(x_k+\theta_k\alpha p_k)p_k, p_k\big\rangle \leqslant M\|p_k\|^2 \leqslant -\tfrac{M}{m}\langle f_k', p_k\rangle,$$

поэтому

$$f(x_k+\alpha p_k) \leqslant f(x_k) + \alpha\langle f_k', p_k\rangle\big(1-\tfrac{\alpha M}{2m}\big).$$

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

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

выполняется неравенство

$$f(x_k+\alpha p_k) \leqslant f(x_k) + \varepsilon\alpha\langle f_k', p_k\rangle. \tag{22}$$

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

$$f(x_k+\alpha_k p_k) \leqslant f(x_k) + \varepsilon\alpha_k\langle f_k', p_k\rangle. \tag{23}$$

Покажем, что

$$\alpha_k \geqslant \frac{m(1-\varepsilon)}{M}. \tag{24}$$

При $\frac{2m(1-\varepsilon)}{M} \geqslant 1$ 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

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

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

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

В силу (2) и (6)

$$-\langle f'_k, p_k\rangle = \bigl\langle (f''_k)^{-1} f'_k, f'_k\bigr\rangle \geqslant \tfrac{1}{M}\|f'_k\|^2.$$

С учётом (24) получаем

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

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

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

$$\|x_* - x_k\| \leqslant \tfrac{2}{m}\|f'_k\|, \quad k = 0, 1, 2, \ldots$$

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

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

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

$$f(x_k + p_k) = f(x_k) + \langle f'_k, p_k\rangle + \tfrac{1}{2}\langle f''_k p_k, p_k\rangle + \tfrac{1}{2}\bigl\langle (f''_{kc} - f''_k)p_k, p_k\bigr\rangle,$$

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

$$\langle f''_k p_k, p_k\rangle = -\langle f'_k, p_k\rangle. \tag{25}$$

Кроме того, в силу (19)

$$\bigl\langle (f''_{kc} - f''_k)p_k, p_k\bigr\rangle \leqslant \|f''_{kc} - f''_k\| \cdot \|p_k\|^2 \leqslant -\tfrac{1}{m}\|f''_{kc} - f''_k\|\langle f'_k, p_k\rangle. \tag{26}$$

На основании (25) и (26) получаем

$$f(x_k + p_k) \leqslant f(x_k) + \langle f'_k, p_k\rangle\Bigl(\frac{1}{2} - \frac{\|f''_{kc} - f''_k\|}{2m}\Bigr). \tag{27}$$

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

$$\|f''_{kc} - f''_k\| \leqslant \|f''_{kc} - f''_*\| + \|f''_k - f''_*\|. \tag{28}$$

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

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

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

Неравенство (27) примет вид

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

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

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

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

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

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

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

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

Отсюда следует, что

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

Положив

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

придём к неравенству (18).

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

Теорема доказана. □

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

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

Тогда при больших k справедлива оценка

$$\|x_{k+1} - x_k\| \leqslant \tfrac{L}{m}\|x_k - x_*\|^2. \tag{30}$$

Действительно, нужно учесть вид q_k и тот факт, что

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

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.