Метод Ньютона

Мальковский Н. В.

Санкт-Петербургский Академический Университет

Метод Ньютона и градиентный спуск

Градиентный спуск:

$$x_{k+1} = x_k - \alpha_k \nabla f(x_k).$$

Метод Ньютона и градиентный спуск

Градиентный спуск:

$$x_{k+1} = x_k - \alpha_k \nabla f(x_k).$$

Основная формальная модификация метода Ньютона:

$$\alpha_k \to \alpha(x) \in \mathbb{R}^{n \times n}$$

Метод Ньютона и градиентный спуск

Градиентный спуск:

$$x_{k+1} = x_k - \alpha_k \nabla f(x_k).$$

Основная формальная модификация метода Ньютона:

$$\alpha_k \to \alpha(x) \in \mathbb{R}^{n \times n}$$

Общая идея: на каждом шаге минимизируем квадратичное приближение f:

$$x_{k+1} = \text{argmin}_x (f(x_k) + \nabla f(x_k)^T (x - x_k) + \frac{1}{2}(x - x_k)\nabla^2 f(x_k)(x - x_k))$$

Метод Ньютона и градиентный спуск

Градиентный спуск:

$$x_{k+1} = x_k - \alpha_k \nabla f(x_k).$$

Основная формальная модификация метода Ньютона:

$$\alpha_k \to \alpha(x) \in \mathbb{R}^{n \times n}$$

Общая идея: на каждом шаге минимизируем квадратичное приближение f:

$$x_{k+1} = \operatorname{argmin}_x (f(x_k) + \nabla f(x_k)^T (x - x_k) + \frac{1}{2}(x - x_k)\nabla^2 f(x_k)(x - x_k))$$

Условия оптимальности первого рода дают уравнение на x_{k+1}:

$$\nabla f(x_k) + \nabla^2 f(x_k)(x - x_k) = 0$$

Таким образом

$$x_{k+1} = x_k - [\nabla^2 f(x_k)]^{-1} \nabla f(x_k) \tag{1}$$

За и против

Плюсы:

За и против

Плюсы:

- Сходится гораздо быстрее.

За и против

Плюсы:

- Сходится гораздо быстрее.

Минусы:

- Нужна возможность измерить гессиан $\nabla^2 f(x_k)$

За и против

Плюсы:

- Сходится гораздо быстрее.

Минусы:

- Нужна возможность измерить гессиан $\nabla^2 f(x_k)$
- Больше вычислений на итерацию: необходимо либо обращать гессиан, либо решать систему

$$\nabla^2 f(x_k)(x - x_k) = -\nabla f(x_k)$$

Метод Ньютона для уравнений

Рассмотрим систему уравнений

$$f(x) = 0_n,$$

где $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$, f дифференцируема.

Метод Ньютона для уравнений

Рассмотрим систему уравнений

$$f(x) = 0_n,$$

где $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$, f дифференцируема.

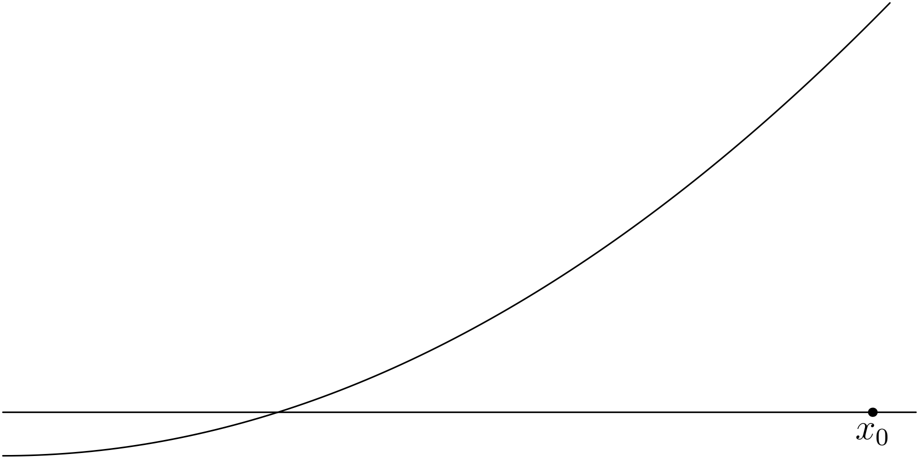
Аналогично задаче минимизации, метод Ньютона для решение системы уравнений заключается в замене исходной системы на её линейное приближение и последовательное итерирование. Решение линейной системы:

$$x_{k+1} : f(x_k) + \nabla f(x_k)(x_{k+1} - x_k) = 0 \quad \Rightarrow$$

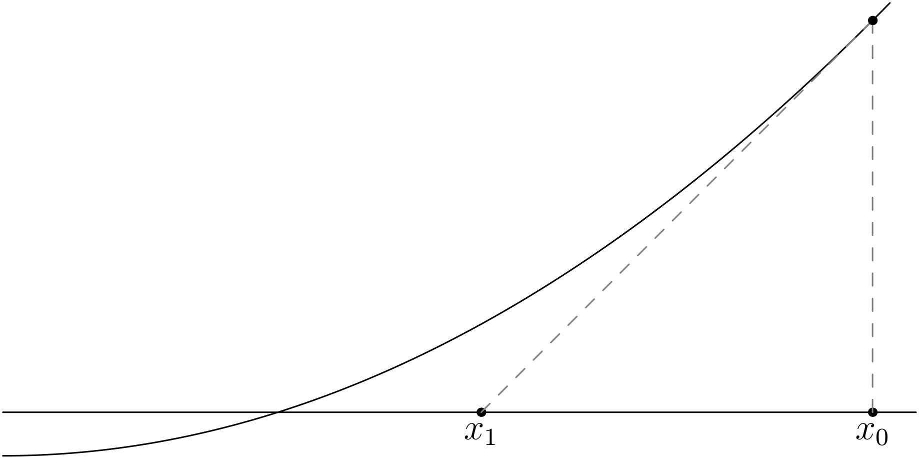
что дает

$$x_{k+1} = x_k - \nabla f(x_k)^{-1} f(x_k) \tag{2}$$

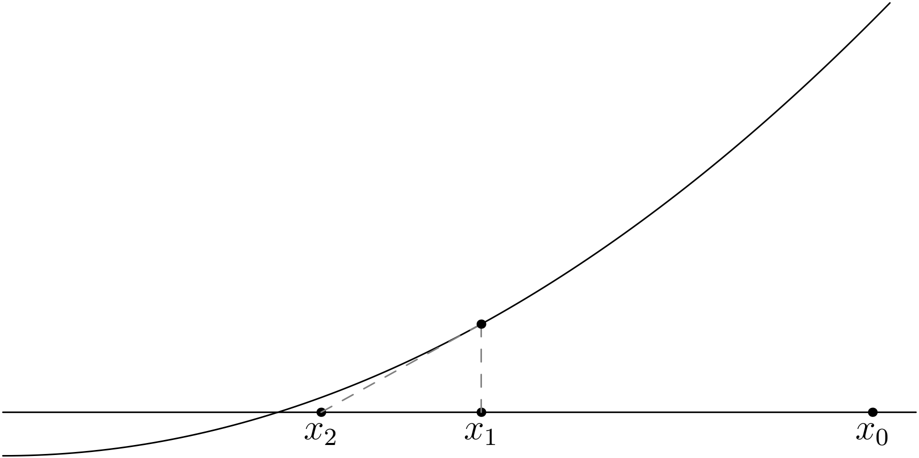
Метод Ньютона в одномерном случае



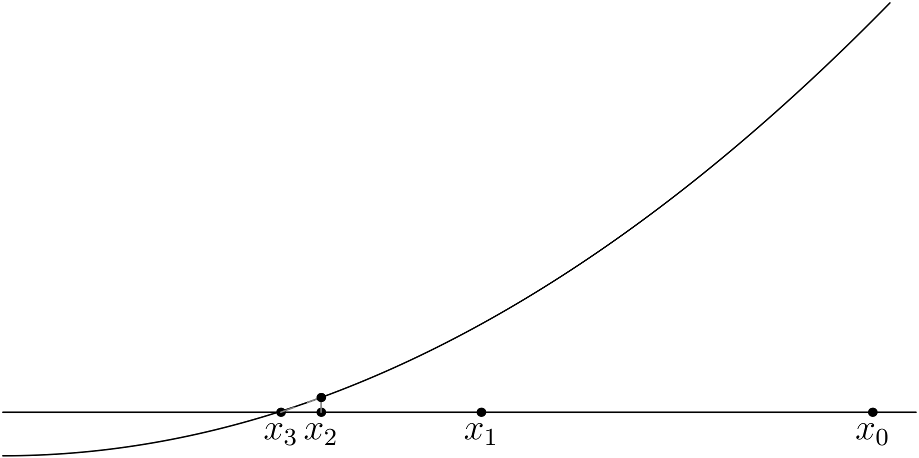
Метод Ньютона в одномерном случае



Метод Ньютона в одномерном случае



Метод Ньютона в одномерном случае



Пример: вычисление обратной функции

Предположим, что мы умеем вычислять $f(x)$ и $\nabla f(x)$, хотим научиться вычислять $f^{-1}(x)$.

Пример: вычисление обратной функции

Предположим, что мы умеем вычислять $f(x)$ и $\nabla f(x)$, хотим научиться вычислять $f^{-1}(x)$.

Пусть $f^{-1}(y^*) = x^*$, тогда $f(x^*) = y^*$, отсюда вычисление $f^{-1}(y^*)$ равносильно решению системы

$$f(x) - y^* = 0.$$

Пример: вычисление обратной функции

Предположим, что мы умеем вычислять $f(x)$ и $\nabla f(x)$, хотим научиться вычислять $f^{-1}(x)$.

Пусть $f^{-1}(y^*) = x^*$, тогда $f(x^*) = y^*$, отсюда вычисление $f^{-1}(y^*)$ равносильно решению системы

$$f(x) - y^* = 0.$$

Используя метод Ньютона получаем алгоритм

$$x_{k+1} = x_k - [\nabla f(x)]^{-1}(f(x_k) - y^*)$$

Пример: вычисления вещественного корня

Пусть $f(x) = x^2$, $f^{-1}(x) = \sqrt{x}$, тогда рассмотренная схема имеет вид

$$x_{k+1} = x_k - \frac{x_k^2 - y^*}{2x_k} = \frac{1}{2}\left(x_k + \frac{y^*}{x_k}\right)$$

Пример: вычисления вещественного корня

Пусть $f(x) = x^2$, $f^{-1}(x) = \sqrt{x}$, тогда рассмотренная схема имеет вид

$$x_{k+1} = x_k - \frac{x_k^2 - y^*}{2x_k} = \frac{1}{2}\left(x_k + \frac{y^*}{x_k}\right)$$

Функция $g(x) = \frac{1}{2}\left(x - \frac{y^*}{x}\right)$ имеет две неподвижные точки $\pm\sqrt{y^*}$, а значит последовательность $x_{k+1} = g(x_k)$ сходится либо к одной из них

Очевидным образом, если $x > 0$, то $g(x) > 0$ и наоборот. Следовательно, если $x_0 > 0$, то последовательность сходится к $\sqrt{y^*}$, а если $x_0 < 0$, то последовательность сходится к $-\sqrt{y^*}$.

Анализ сходимости

Рассмотрим близкий к (2) метод:

$$x_{k+1} = x_k - [\nabla f(x^*)]^{-1} f(x_k) \tag{3}$$

Анализ сходимости

Рассмотрим близкий к (2) метод:

$$x_{k+1} = x_k - [\nabla f(x^*)]^{-1} f(x_k) \tag{3}$$

Этот метод представляет только теоретическую ценность, так как предполагает возможность вычисления $\nabla f(x^*)$, что практически не осуществимо без знания x^*.

Анализ сходимости

Рассмотрим близкий к (2) метод:

$$x_{k+1} = x_k - [\nabla f(x^*)]^{-1} f(x_k) \tag{3}$$

Этот метод представляет только теоретическую ценность, так как предполагает возможность вычисления $\nabla f(x^*)$, что практически не осуществимо без знания x^*.

Пусть $g(x) = x - [\nabla f(x^*)]^{-1} f(x)$, тогда (3) имеет вид

$$x_{k_1} = g(x_k)$$

и при этом

$$\nabla g(x) = I - [\nabla f(x^*)]^{-1} \nabla f(x).$$

Анализ сходимости

Рассмотрим близкий к (2) метод:

$$x_{k+1} = x_k - [\nabla f(x^*)]^{-1} f(x_k) \tag{3}$$

Этот метод представляет только теоретическую ценность, так как предполагает возможность вычисления $\nabla f(x^*)$, что практически не осуществимо без знания x^*.

Пусть $g(x) = x - [\nabla f(x^*)]^{-1} f(x)$, тогда (3) имеет вид

$$x_{k_1} = g(x_k)$$

и при этом

$$\nabla g(x) = I - [\nabla f(x^*)]^{-1} \nabla f(x).$$

Таким образом, $g(x^*) = 0$ и ∇g удовлетворяет условию Липшица, если ∇f удовлетворяет.

Анализ сходимости

Используя теорему о квадратичной сходимости для рекуррентных процессов получаем

Теорема

Если f дифференцируема на $S = \{x \mid ||x - x^*|| \leq ||x_0 - x^*||\}$, $\det \nabla f(x^*) \neq 0$, ∇f *удовлетворяет условию Липшица с константой L на S и* $q = \frac{1+||\nabla f(x^*)||L}{2}||x_0 - x^*|| < 1$, *то для последовательности* (3) *выполняется*

$$||x_k - x^*|| \leq \frac{2}{||\nabla f(x^*)||L} q^{2^k}$$

Анализ сходимости

Используя теорему о квадратичной сходимости для рекуррентных процессов получаем

Теорема

Если f дифференцируема на $S = \{x \mid ||x - x^*|| \leq ||x_0 - x^*||\}$, $\det \nabla f(x^*) \neq 0$, ∇f удовлетворяет условию Липшица с константой L на S и $q = \frac{1+||\nabla f(x^*)||L}{2}||x_0 - x^*|| < 1$, то для последовательности (3) выполняется

$$||x_k - x^*|| \leq \frac{2}{||\nabla f(x^*)||L} q^{2^k}$$

Док-во Применяем теорему о квадратичной сходимости для $g(x) = x - [\nabla f(x^*)]^{-1} f(x)$ и учитываем, что

$$||\nabla g(x) - \nabla g(y)|| = ||[\nabla f(x^*)]^{-1} \nabla f(x)|| \leq (|\nabla f(x^*)||L)||x - y|| \quad \blacksquare$$

Анализ сходимости

Возвращаемся к (2) и (1).

Теорема (О скорости сходимости метода Ньютона для уравнений)

Пусть $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ *дифференцируема на* $S = \left\{ ||x - x^*|| \leq \frac{m}{\gamma M} \right\}$ *при некотором* $\gamma \geq 3/2$, *для точки* x^* *выполняется* $f(x^*) = 0$ *и* $mI \preceq \nabla f(x^*)$ *при* $m > 0$, *для* ∇f *на* S *выполняется условие Липшица с константой* M, $x_0 \in S$, *тогда для последовательности* (2) *выполняется*

$$||x_{k+1} - x^*|| \leq \frac{M||x_k - x^*||^2}{2(m - M||x_k - x^*||)}$$

Анализ сходимости

Возвращаемся к (2) и (1).

Теорема (О скорости сходимости метода Ньютона для уравнений)

Пусть $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ дифференцируема на $S = \left\{||x - x^*|| \le \frac{m}{\gamma M}\right\}$ при некотором $\gamma \ge 3/2$, для точки x^* выполняется $f(x^*) = 0$ и $mI \preceq \nabla f(x^*)$ при $m > 0$, для ∇f на S выполняется условие Липшица с константой M, $x_0 \in S$, тогда для последовательности (2) выполняется

$$||x_{k+1} - x^*|| \le \frac{M||x_k - x^*||^2}{2(m - M||x_k - x^*||)}$$

Док-во. Обозначим $G_k = \int_0^1 [\nabla f(x_k) - \nabla f(x^* + t(x_k - x^*))]dt$, тогда

$$\begin{aligned}
x_{k+1} - x^* &= x_k - x^* - [\nabla f(x_k)]^{-1} f(x_k) \\
&= x_k - x^* - [\nabla f(x_k))]^{-1} \int_0^1 \nabla f(x^* + t(x_k - x^*))(x_k - x^*)dt \\
&= [\nabla f(x_k)]^{-1} G_k (x - x^*).
\end{aligned}$$

Анализ сходимости

Далее

$$
\begin{aligned}
||G_k|| &= \left\| \int_0^1 [\nabla f(x_k) - \nabla f(x^* + t(x_k - x^*))] dt \right\| \\
&\le \int_0^1 ||[\nabla f(x_k) - \nabla f(x^* + t(x_k - x^*))]|| dt \\
&\le \int_0^1 M(1-t)||x_k - x^*|| dt \\
&= \frac{M||x_k - x^*||}{2}
\end{aligned}
$$

Анализ сходимости

Далее

$$
\begin{aligned}
||G_k|| &= \left\| \int_0^1 [\nabla f(x_k) - \nabla f(x^* + t(x_k - x^*))] dt \right\| \\
&\leq \int_0^1 ||[\nabla f(x_k) - \nabla f(x^* + t(x_k - x^*))]|| dt \\
&\leq \int_0^1 M(1-t)||x_k - x^*|| dt \\
&= \frac{M||x_k - x^*||}{2}
\end{aligned}
$$

Вновь используя условие Липшица для ∇f получаем

$$||\nabla f(x^*)|| - ||\nabla f(x_k)|| \leq ||\nabla f(x_k) - \nabla f(x^*)|| \leq M||x_k - x^*||$$

$$||\nabla f(x_k)|| \geq ||\nabla f(x^*)|| - M||x_k - x^*|| \geq mI - M||x_k - x^*||$$

Анализ сходимости

Далее

$$\begin{aligned}
||G_k|| &= \left\| \int_0^1 [\nabla f(x_k) - \nabla f(x^* + t(x_k - x^*))]dt \right\| \\
&\leq \int_0^1 ||[\nabla f(x_k) - \nabla f(x^* + t(x_k - x^*))]||dt \\
&\leq \int_0^1 M(1-t)||x_k - x^*||dt \\
&= \frac{M||x_k - x^*||}{2}
\end{aligned}$$

Вновь используя условие Липшица для ∇f получаем

$$||\nabla f(x^*)|| - ||\nabla f(x_k)|| \leq ||\nabla f(x_k) - \nabla f(x^*)|| \leq M||x_k - x^*||$$

$$||\nabla f(x_k)|| \geq ||\nabla f(x^*)|| - M||x_k - x^*|| \geq mI - M||x_k - x^*||$$

Если $x_k \in S$, то $M||x_k - x^*|| - m > 0$, а $\nabla f(x_k)$ обратима и при этом

$$||[\nabla f(x_k)]^{-1}|| \leq (m - M||x_k - x^*||)^{-1}$$

Анализ сходимости

Итог:

$$||x_{k+1} - x^*|| \leq \frac{M||x_k - x^*||^2}{2(m - M||x_k - x^*||)}$$

что дает оценку скорости сходимости.

Анализ сходимости

Итог:

$$||x_{k+1} - x^*|| \leq \frac{M||x_k - x^*||^2}{2(m - M||x_k - x^*||)}$$

что дает оценку скорости сходимости.

Осталось показать, что $||x_{k+1} - x^*|| \leq ||x_k - x^*||$, чтобы гарантировать $x_k \in S$:

$$\frac{M||x_k - x^*||^2}{2(m - M||x_k - x^*||)} \leq ||x_k - x^*|| \quad \Leftrightarrow$$

$$M||x_k - x^*||^2 \leq 2(m - M||x_k - x^*||)||x_k - x^*|| \quad \Leftrightarrow$$

$$3M||x_k - x^*||^2 \leq 2m||x_k - x^*||.$$

Анализ сходимости

Итог:

$$||x_{k+1} - x^*|| \leq \frac{M||x_k - x^*||^2}{2(m - M||x_k - x^*||)}$$

что дает оценку скорости сходимости.

Осталось показать, что $||x_{k+1} - x^*|| \leq ||x_k - x^*||$, чтобы гарантировать $x_k \in S$:

$$\frac{M||x_k - x^*||^2}{2(m - M||x_k - x^*||)} \leq ||x_k - x^*|| \quad \Leftrightarrow$$

$$M||x_k - x^*||^2 \leq 2(m - M||x_k - x^*||)||x_k - x^*|| \quad \Leftrightarrow$$

$$3M||x_k - x^*||^2 \leq 2m||x_k - x^*||.$$

Таким образом, если $\gamma \geq 3/2$, то $||x_{k+1} - x^*|| \leq ||x_k - x^*||$, $x_0 \in S$ и $x_k \in S$. ∎

Теорема (О скорости сходимости метода Ньютона для задач оптимизации)

Пусть $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ *дважды дифференцируема на* $S = \left\{||x - x^*|| \leq \frac{m}{\gamma M}\right\}$ *при некотором* $\gamma \geq 3/2$, x^* *– точка минимума* f *на* S *и* $mI \preceq \nabla^2 f(x^*)$ *при* $m > 0$, *для* $\nabla^2 f$ *на* S *выполняется условие Липшица с константой* M, $x_0 \in S$, *тогда для последовательности* (1) *выполняется*

$$||x_{k+1} - x^*|| \leq \frac{M||x_k - x^*||^2}{2(m - M||x_k - x^*||)}$$

Анализ сходимости

Теорема (О скорости сходимости метода Ньютона для задач оптимизации)

Пусть $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ *дважды дифференцируема на* $S = \left\{ ||x - x^*|| \le \frac{m}{\gamma M} \right\}$ *при некотором* $\gamma \ge 3/2$, x^* *– точка минимума* f *на* S *и* $mI \preceq \nabla^2 f(x^*)$ *при* $m > 0$, *для* $\nabla^2 f$ *на* S *выполняется условие Липшица с константой* M, $x_0 \in S$, *тогда для последовательности* (1) *выполняется*

$$||x_{k+1} - x^*|| \le \frac{M||x_k - x^*||^2}{2(m - M||x_k - x^*||)}$$

Док-во. Учитывая $mI \preceq \nabla^2 f$ x^* является единственной точкой минимума f на S применяем теорему о сходимости метода Ньютона для $g = \nabla f$. ■