

Численные методы оптимизации

Метод касательных Ньютона и его приложения

От Ньютона до Канторовича

Задачи отыскания корня уравнения $f(x) = 0$ и поиска минимума функции $g(x)$ относятся к разным «жанрам» школьной математики, однако численно они решаются почти одним и тем же приёмом — итерационной схемой, придуманной Исааком Ньютоном.

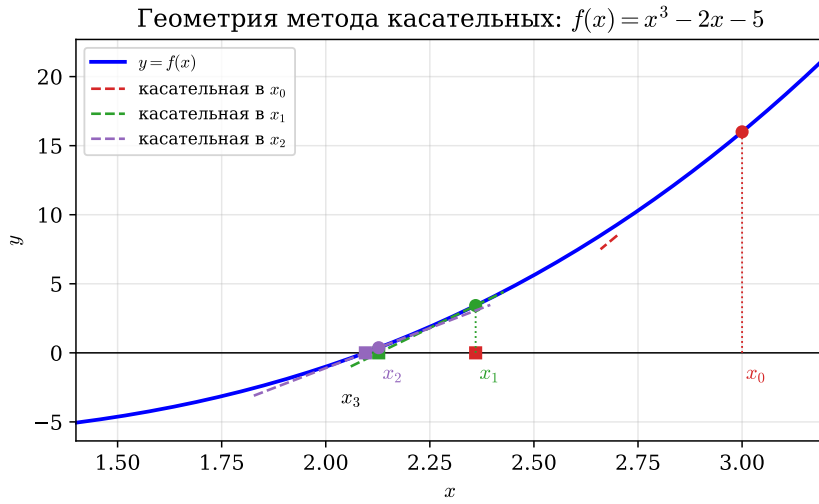
💡 Историческая справка

В работе *De analysi per aequationes numero terminorum infinitas* (1669) и затем в *Method of Fluxions* (рукопись 1671 г., издание 1736 г.) Ньютон предложил способ приближённого решения уравнений, который позже Джозеф Рафсон в 1690 г. переписал в современной рекуррентной форме. Поэтому в англоязычной литературе метод часто называют *Newton–Raphson*.

Существенный вклад в строгое исследование метода внёс советский математик **Леонид Витальевич Канторович** (1912–1986), лауреат Нобелевской премии по экономике 1975 г. (за теорию оптимального распределения ресурсов). В 1948 г. он опубликовал теорему, носящую теперь его имя: она впервые дала универсальные *достаточные условия сходимости* метода Ньютона, причём не только для уравнений с одной переменной, но и для уравнений в бесконечномерных банаховых пространствах.

Геометрическая идея. Пусть требуется найти корень уравнения $f(x) = 0$, и нам известна точка x_k , близкая к корню. Заменим график $y = f(x)$ его касательной в точке $(x_k, f(x_k))$. Касательная — это прямая, и её пересечение с осью x найти просто. Точку этого пересечения и объявим следующим

приближением x_{k+1} . Затем повторим. Так получается метод касательных (рис. 2.1).



Три итерации метода Ньютона для уравнения $x^3 - 2x - 5 = 0$. Каждая касательная (пунктир) пересекает ось абсцисс в точке, которая берётся в качестве следующего приближения (квадрат). После трёх шагов корень найден с точностью лучше 10^{-6} . Уравнение касательной к графику $y = f(x)$ в точке x_k имеет вид $y = f(x_k) + f'(x_k)(x - x_k)$. Полагая $y = 0$ и выражая x , получаем

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)} \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (1)$$

Это и есть *итерационная формула Ньютона*. Точка x_0 выбирается исследователем; от её выбора может зависеть, сойдётся ли метод вообще.

Метод Ньютона для задач оптимизации

Пусть теперь нужно найти минимум функции g . В любой точке минимума x^* выполнено $g'(x^*) = 0$. Значит, минимизация дифференцируемой функции — это решение уравнения

$$g'(x) = 0. \quad (2)$$

Применим к нему формулу (2.1) с $f = g'$ (и тогда $f' = g''$):

$$x_{k+1} = x_k - \frac{g'(x_k)}{g''(x_k)} \quad (3)$$

Эту же формулу можно получить иначе — и это ценная для всей теории оптимизации точка зрения. Разложим g в окрестности x_k в **ряд Тейлора**:

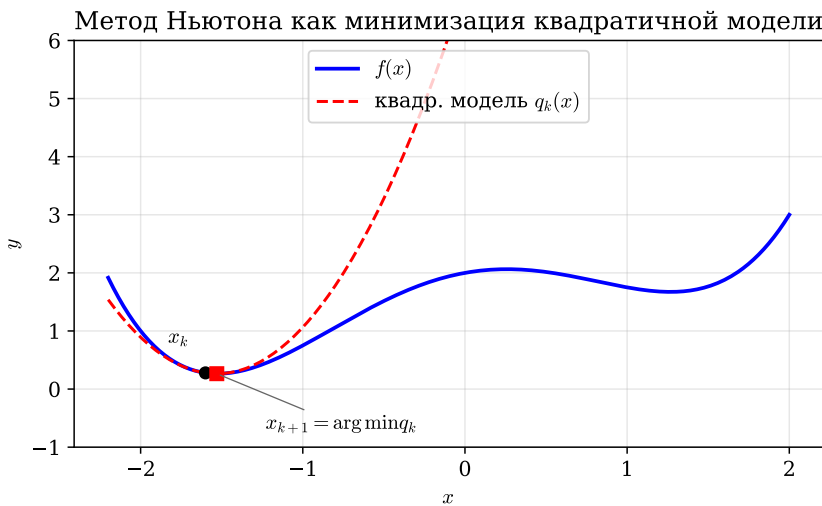
$$g(x) = g(x_k) + g'(x_k)(x - x_k) + \frac{1}{2}g''(x_k)(x - x_k)^2 + o((x - x_k)^2) \quad (4)$$

Откуда берётся такое разложение? Идея проста: рядом с точкой x_k функция g ведёт себя «почти как многочлен». Линейное приближение $g(x_k) + g'(x_k)(x - x_k)$ — это уже знакомая нам касательная к графику. Если мы хотим добиться большей точности, надо учесть и *кривизну* графика — а она как раз кодируется второй производной g'' . Так возникает квадратичный многочлен в (2.3).

Отбросим бесконечно малое слагаемое и обозначим оставшийся квадратичный многочлен через

$$q_k(x) = g(x_k) + g'(x_k)(x - x_k) + \frac{1}{2}g''(x_k)(x - x_k)^2. \quad (5)$$

Минимизировать q_k умеет любой школьник: это квадратное уравнение, решаемое в одну строку. Условие $q'_k(x) = 0$ даёт $g'(x_k) + g''(x_k)(x - x_k) = 0$, откуда $x = x_k - g'(x_k)/g''(x_k)$, что в точности совпадает с формулой (2.2).



Метод Ньютона как минимизация локальной квадратичной модели q_k (пунктир): следующая точка x_{k+1} — это вершина параболы, касающейся графика g в точке x_k .

i «Разделяй и властвуй»

Метод Ньютона для оптимизации — классический пример принципа *разделяй и властвуй*: вместо того чтобы решать сложную задачу минимизации произвольной функции g целиком, мы заменяем её на каждом шаге простой подзадачей — минимизацией параболы q_k . Парабола подбирается так, чтобы локально (в окрестности x_k) имитировать поведение g , и её минимум вычисляется явно.

Пример 1. Извлечение квадратного корня

Пусть $a > 0$. Вычислим $\sqrt{a}$, применяя метод Ньютона к уравнению

$$f(x) = x^2 - a = 0. \quad (6)$$

Тогда $f'(x) = 2x$, и формула (2.1) принимает вид

$$x_{k+1} = \left(\frac{1}{2}x_k + \frac{a}{x_k} \right) \quad (7)$$

Это — знаменитый **метод Герона**, или вавилонский метод квадратного корня.

 Историческая справка

Формулу (2.4) в явном виде описал *Герон Александрийский* (I век н. э.) в трактате «Метрика». Однако эту итерацию умели применять задолго до него: на вавилонской глиняной табличке YBC 7289 (примерно XVIII–XVI вв. до н. э.) сохранилось вычисление $\sqrt{2}$ с точностью до шестого десятичного знака — именно с помощью среднего арифметического и среднего гармонического, что эквивалентно (2.4). Получается, что одна из итерационных схем «пережила» три с половиной тысячи лет и по сей день используется в библиотеках вычисления корня.

Сходимость через сжимающее отображение

Запишем (2.4) как $x_{k+1} = T(x_k)$, где $T(x) = \frac{1}{2}(x + a/x)$. Точка $\sqrt{a}$ — неподвижная для T : $T(\sqrt{a}) = \sqrt{a}$.

 Теорема 2.1. Сходимость метода Герона

Для любого $x_0 > 0$ последовательность (2.4) монотонно убывает (начиная с $k = 1$) и сходится к $\sqrt{a}$. Более того, для ошибки $e_k = x_k - \sqrt{a}$ выполнено

$$e_{k+1} = \frac{e_k^2}{2x_k}, \quad \text{и при } k \geq 1: \quad 0 \leq e_{k+1} \leq \frac{e_k^2}{2\sqrt{a}}. \quad (8)$$

Доказательство. Шаг 1 (нижняя оценка). По неравенству о средних (АМ–ГМ) для $x_0 > 0$: $x_1 = \frac{1}{2}(x_0 + a/x_0) \geq \sqrt{x_0 \cdot a/x_0} = \sqrt{a}$. Значит, начиная с x_1 , все члены лежат в $[\sqrt{a}, \infty)$.

Шаг 2 (рекуррентность для ошибки).

$$e_{k+1} = x_{k+1} - \sqrt{a} = \frac{x_k + a/x_k}{2} - \sqrt{a} = \frac{x_k^2 - 2\sqrt{a}x_k + a}{2x_k} = \frac{(x_k - \sqrt{a})^2}{2x_k} = \frac{e_k^2}{2x_k}.$$

При $x_k \geq \sqrt{a}$ имеем $\frac{1}{2x_k} \leq \frac{1}{2\sqrt{a}}$, откуда вторая часть (2.5).

Шаг 3 (сжатие). Производная $T'(x) = \frac{1}{2}(1 - a/x^2)$. На луче $x \geq \sqrt{a}$ выполнено $T'(x) \in [0, \frac{1}{2})$. Значит, T — сжимающее отображение (с константой $\frac{1}{2}$) на $[\sqrt{a}, \infty)$. По теореме Банаха о неподвижной точке последовательность $x_k = T^k(x_1)$ сходится к единственной неподвижной точке $\sqrt{a}$.

Из (2.5) видно, что после первой итерации ошибка квадратируется: каждые два десятичных знака удваиваются за один шаг. Поэтому при разумном x_0 хватает 4–5 итераций, чтобы получить машинную точность.

Пример 2.2. Расстояние до горизонта

Стоящий человек ростом $h = 1,70$ м смотрит на море. До какой точки далеко он видит? Из теоремы Пифагора (рис. 2.3) для прямой, касательной к поверхности Земли:

$$d^2 + R^2 = (R + h)^2, \quad d = \sqrt{2Rh + h^2} \approx \sqrt{2Rh}. \quad (10)$$

При $R = 6371$ км, $h = 1,7 \cdot 10^{-3}$ км:

$$2Rh \approx 2 \cdot 6371 \cdot 0,0017 = 21,66 (\text{км}^2). \quad (11)$$

Применим к этому числу метод Герона со стартом $x_0 = 5$:

$$\begin{aligned} & x_k \\ & 05,000\,000 \\ & \frac{1}{2}(5 + 21,66/5) = 4,666\,000 \\ & 24,654\,046 \\ & 34,654\,031 \end{aligned} \quad (12)$$

Получаем $d \approx 4,65$ км — расстояние, которое запоминается любому, кто хоть раз стоял у моря.

Рисунок

Рисунок `fig:horizon` не сгенерирован:
C:\Users\712\AppData\Local\MiKTeX\miktex\log\miktex-maketfm.log

Рис. 2.3. Расстояние до горизонта $d = \sqrt{(R + h)^2 - R^2} \approx \sqrt{2Rh}$.

Пример 2. Вычисление обратного числа

Что, если на нашем процессоре нет аппаратного деления, и нужно вычислить $1/a$ при $a > 0$ (только сложениями и умножениями)? Применим метод Ньютона к уравнению

$$f(x) = \frac{1}{x} - a = 0. \quad (13)$$

Тогда $f'(x) = -1/x^2$, и подстановка в (2.1) даёт

$$x_{k+1} = x_k - \frac{1/x_k - a}{-1/x_k^2} = x_k + x_k^2 (1/x_k - a) = x_k (2 - ax_k). \quad (14)$$

То есть

$$x_{k+1} = x_k (2 - ax_k) \quad (15)$$

Эта схема замечательна тем, что в ней нет ни одного деления — только сложение и умножение. Поэтому именно она исторически использовалась в первых ЭВМ для реализации операции деления на аппаратном уровне.

Анализ сходимости

Введём «относительную невязку» $u_k = 1 - ax_k$. Тогда

$$u_{k+1} = 1 - ax_{k+1} = 1 - ax_k(2 - ax_k) = 1 - 2ax_k + (ax_k)^2 = (1 - ax_k)^2 = u_k^2.$$

Таким образом

$$u_k = u_0^{2^k} \Rightarrow u_k \rightarrow 0 \Leftrightarrow |u_0| < 1. \quad (17)$$

Условие $|1 - ax_0| < 1$ эквивалентно $0 < x_0 < 2/a$. Радиусом сходимости метода является интервал $(0, 2/a)$, и он **конечен**: вне этого интервала ($x_0 > 2/a$ или $x_0 < 0$) итерации расходятся. Это принципиальное отличие от метода Герона, который сходится для любого $x_0 > 0$.

Метод Ньютона–Шульца и оптимизатор Muon

Если в (2.6) заменить число x_k на квадратную матрицу X_k , а число a — на матрицу A , получим знаменитую матричную итерацию **Ньютона–Шульца**: $X_{k+1} = X_k(2I - AX_k)$. Она вычисляет A^{-1} без обращения матриц на каждом шаге — лишь умножениями.

Аналогичные полиномиальные итерации применяются для приближённой *ортогонализации* матриц. Именно так устроен оптимизатор **Muon**, появившийся в 2024–2025 гг. и используемый при обучении современных больших языковых моделей: в нём матрица градиента на

каждом шаге быстро ортогонализуется несколькими итерациями Ньютона–Шульца — это намного дешевле, чем точное сингулярное разложение.

Реализация на Python и численный эксперимент

Запишем универсальную функцию, реализующую метод Ньютона по формуле (2.1), и применим её к двум разобранным примерам. Комментарии в коде даны по-английски (как принято в большинстве библиотек): f , df — сама функция и её производная; x_0 — начальное приближение; n_iter — максимальное число итераций; tol — точность останова; функция возвращает массив xs с историей итераций.

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

def newton(f, df, x0, n_iter=20, tol=1e-15):
    """Newton's tangent method.

    Parameters
    -----
    f, df : callables f(x) and f'(x).
    x0 : initial guess.
    n_iter : maximum number of iterations.
    tol : stopping tolerance on |f(x)|.

    Returns
    -----
    Array of iterates, including x0.
    """
    xs = [x0]
    x = x0
    for _ in range(n_iter):
        fx = f(x)
        if abs(fx) < tol:
            break
        x = x - fx / df(x)
        xs.append(x)
    return np.array(xs)

# --- Example 1. Square root of a -----
a = 2.0
xs_sqrt = newton(lambda x: x**2 - a,
                  lambda x: 2 * x,
                  x0=50.0) # very poor initial guess
err_sqrt = np.abs(xs_sqrt - np.sqrt(a))

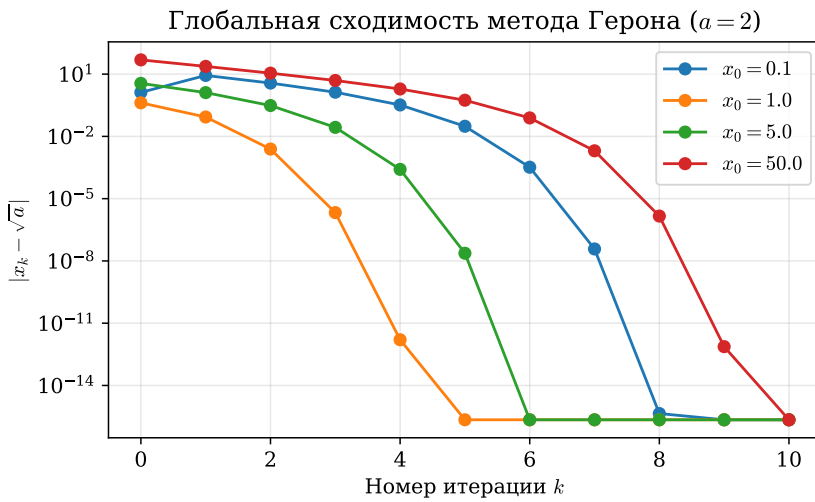
# --- Example 2. Reciprocal 1/a -----
a = 3.0
xs_inv = newton(lambda x: 1.0 / x - a,
                 lambda x: -1.0 / x**2,
                 x0=0.20) # inside the convergence radius (0, 2/a)
err_inv = np.abs(xs_inv - 1.0 / a)

# --- Convergence plot in log scale -----
plt.semilogy(err_sqrt, 'o-', label=r'sqrt: $|x_k - \sqrt{2}|$')
plt.semilogy(err_inv, 's-', label=r'1/a: $|x_k - 1/3|$')
plt.xlabel('iteration $k$'); plt.ylabel('error')
plt.legend(); plt.grid(True); plt.show()
```

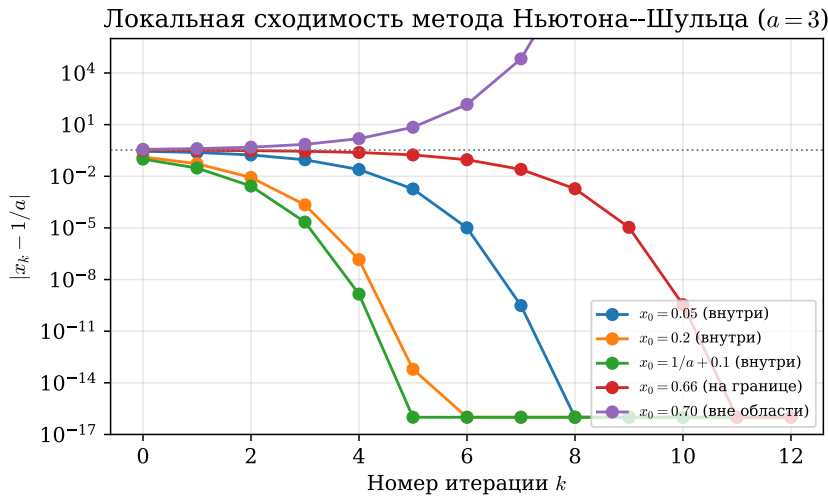
Листинг 2.1. Универсальный метод касательных Ньютона и его применение.

Что показывает эксперимент.

На рис. 2.4 приведены кривые сходимости метода Герона для $\sqrt{2}$ при разных стартах $x_0 \in \{0, 1; 1; 5; 50\}$. Все четыре кривые сходятся к нулю, причём поведение типичное для квадратичной сходимости: после нескольких «согласующих» шагов число верных знаков удваивается за итерацию. Это иллюстрирует **глобальную сходимость** метода Герона: годится любое начальное приближение из $(0, \infty)$.



Глобальная сходимость метода Герона для $\sqrt{2}$ из четырёх очень разных стартовых точек. Шкала ошибки логарифмическая. Совсем другое поведение демонстрирует метод Ньютона–Шульца для $1/a$ при $a = 3$ (рис. 2.5): радиус сходимости равен интервалу $(0, 2/3) \approx (0, 0,667)$. Стартуя *внутри* этого интервала, метод сходится квадратично (нижние три кривые); на самой границе ($x_0 = 0,66$) — сходится, но «впритык»; а уже при $x_0 = 0,70$ ошибка взрывообразно растёт: $|u_k| = |u_0|^{2^k} \rightarrow \infty$ в полном согласии с (2.7). Это **локальная сходимость**.



Локальная сходимость метода Ньютона–Шульца для $1/3$. Радиус сходимости — интервал $(0, 2/3)$; вне его метод расходится.

Достаточные условия сверхлинейной сходимости*

Сравнение двух примеров наводит на вопрос: *когда именно метод Ньютона сходится так быстро, как мы наблюдаем?* Ответ даёт следующая теорема, восходящая к Канторовичу.

i Определение 2.3. Сверхлинейная и квадратичная сходимости

Говорят, что последовательность $\{x_k\}$ сходится к x^* со **сверхлинейной скоростью**, если

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{|x_{k+1} - x^*|}{|x_k - x^*|} = 0. \quad (18)$$

Если же выполнено более сильное условие $|x_{k+1} - x^*| \leq M |x_k - x^*|^2$ для некоторой константы $M > 0$, то сходимость называют **квадратичной**.

i Определение 2.4. Сильно выпуклая функция

Функция $g : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ называется **сильно выпуклой** с константой $\mu > 0$, если $g \in C^2$ и $g''(x) \geq \mu$ для всех x . Сильная выпуклость гарантирует существование и единственность точки минимума и, что важно для нас, отделённость второй производной от нуля.

⚠ Теорема 2.5. Сверхлинейная сходимость метода Ньютона

Пусть выполнено хотя бы одно из условий:

1. (уравнение) $f \in C^2$ в окрестности точки x^* , $f(x^*) = 0$ и $f'(x^*) \neq 0$;
2. (сильно выпуклая оптимизация) $g \in C^3$, g — сильно выпуклая на интервале, содержащем точку минимума x^* , и применяется итерация (2.2).

Тогда существуют $\delta > 0$ и $M > 0$ такие, что для всякого $x_0 \in (x^* - \delta, x^* + \delta)$ итерации Ньютона определены и

$$|x_{k+1} - x^*| \leq M |x_k - x^*|^2. \quad (19)$$

В частности, сходимость квадратичная (а значит, сверхлинейная).

Доказательство. Достаточно доказать случай (а): задача (б) сводится к нему, если положить $f = g'$, тогда условие $f'(x^*) \neq 0$ эквивалентно $g''(x^*) \geq \mu > 0$.

Разложим f по формуле Тейлора с остаточным членом в форме Лагранжа в окрестности x_k и подставим $x = x^*$:

$$0 = f(x^*) = f(x_k) + f'(x_k)(x^* - x_k) + \frac{f''(\xi_k)}{2}(x^* - x_k)^2, \quad (20)$$

где ξ_k — некоторая точка между x_k и x^* . Разделим обе части на $f'(x_k)$ (по непрерывности эта величина не равна нулю в малой окрестности x^*):

$$0 = \frac{f(x_k)}{f'(x_k)} + (x^* - x_k) + \frac{f''(\xi_k)}{2f'(x_k)}(x^* - x_k)^2. \quad (21)$$

Из определения $x_{k+1} = x_k - f(x_k)/f'(x_k)$ получаем $\frac{f(x_k)}{f'(x_k)} = x_k - x_{k+1}$. Подставляя:

$$0 = (x_k - x_{k+1}) + (x^* - x_k) + \frac{f''(\xi_k)}{2f'(x_k)}(x^* - x_k)^2, \quad (22)$$

откуда после очевидных переобозначений

$$x_{k+1} - x^* = \frac{f''(\xi_k)}{2f'(x_k)}(x_k - x^*)^2. \quad (23)$$

Это и есть искомая *рекуррентность для расстояния*.

Теперь подберём константы. По непрерывности f' и f'' существует $\delta_1 > 0$ и числа $L, m > 0$ такие, что $|f''(\xi)| \leq L$ и

$|f'(x)| \geq m$ для всех $\xi, x \in [x^* - \delta_1, x^* + \delta_1]$. Положим $M = L/(2m)$ и $\delta = \min(\delta_1, \frac{1}{2M})$. Тогда из (2.9) при $|x_k - x^*| < \delta$:

$$|x_{k+1} - x^*| \leq M |x_k - x^*|^2 \leq M\delta \cdot |x_k - x^*| \leq \frac{1}{2} |x_k - x^*| \quad (24)$$

Значит, последовательность не покидает δ -окрестность и оценка (2.8) выполнена для всех k .

Где условия выполняются для наших примеров?

Метод Герона. Здесь $f(x) = x^2 - a$, $f'(x) = 2x$, $f''(x) = 2$. В точке $x^* = \sqrt{a} > 0$ выполнено $f'(x^*) = 2\sqrt{a} \neq 0$. Условия теоремы выполняются на всём луче $(0, \infty)$, не содержащем нуля, и константа в (2.8) принимает вид $M = \frac{1}{2\sqrt{a}}$ — в полном согласии с явным выражением (2.5), полученным элементарно.

Метод Ньютона–Шульца. Здесь $f(x) = 1/x - a$, $f'(x) = -1/x^2$, $f''(x) = 2/x^3$. В точке $x^* = 1/a$ имеем $f'(x^*) = -a^2 \neq 0$, и теорема применима в малой окрестности этой точки. Однако, в отличие от метода Герона, оценка снизу $|f'(x)| \geq m > 0$ ломается при $x \rightarrow \infty$: производная стремится к нулю. Именно поэтому радиус сходимости в этом примере конечен и равен $1/a$ слева и справа от x^* , что в сумме даёт интервал $(0, 2/a)$, найденный нами ранее аналитически.

Таким образом, два простейших примера полностью укладываются в доказанную теорему: метод Ньютона сходится сверхлинейно там, где производная регулярна и отделена от нуля. Глобальную же сходимость, как у Герона, приходится доказывать дополнительно — например, ссылаясь на структуру функции (выпуклость) и теорему Банаха о сжимающем отображении, как мы и сделали в разделе 2.1.

! Задачи для самостоятельной работы

1. Применяя метод Ньютона к уравнению $f(x) = x^n - a = 0$, получите итерационную формулу для $\sqrt[n]{a}$. Покажите, что для $n = 3$ она имеет вид $x_{k+1} = \frac{2x_k + a/x_k^2}{3}$.
2. Докажите, что для метода Герона из любого $x_0 > 0$ погрешность e_1 всегда положительна, после чего последовательность монотонно убывает. (Указание: используйте АМ–ГМ.)

3. Для метода Ньютона–Шульца при $a = 2$ найдите наибольшее x_0 , при котором итерации ещё сходятся. Сравните численно скорость сходимости при $x_0 = 0,1$ и $x_0 = 0,9$.
4. * Сформулируйте и докажите аналог теоремы 2.5 для метода Ньютона минимизации многомерной сильно выпуклой функции $g : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$. Какую роль играет матрица Гессе $\nabla^2 g$?
5. * Прочитайте о теореме Канторовича в учебнике «Kantorovich theorem» и сформулируйте её в одну фразу: какие именно три величины должны быть «в нужном соотношении» для гарантии сходимости?