

УДК 519.853.62

АДАПТИВНЫЙ МЕТОД ГАУССА–НЬЮТОНА В ЗАДАЧАХ РЕШЕНИЯ СИСТЕМ НЕЛИНЕЙНЫХ УРАВНЕНИЙ

© 2021 г. Н. Е. Юдин^{1,2,*}

Представлено академиком РАН Ю.Г. Евтушенко 19.05.2021 г.

Поступило 27.05.2021 г.

После доработки 03.07.2021 г.

Принято к публикации 05.07.2021 г.

Предлагается новая версия метода Гаусса–Ньютона для решения системы нелинейных уравнений, основанная на идеях использования верхней оценки нормы невязки системы уравнений и квадратичной регуляризации. В рамках данного метода получена глобальная сходимость. При естественных предположениях установлена глобальная линейная сходимость. Предложенный метод использует адаптивную стратегию выбора гиперпараметров локальной модели, формируя гибкий и удобный в использовании метод, реализуемый на практике с помощью стандартных методов выпуклой оптимизации.

Ключевые слова: системы нелинейных уравнений, унимодальная оптимизация, метод Гаусса–Ньютона, условие Поляка–Лоясиевича, неточное проксимальное отображение, неточный оракул, недоопределенная модель, оценка сложности

DOI: 10.31857/S2686954321050167

ВВЕДЕНИЕ

Системы нелинейных уравнений часто фигурируют в различных приложениях, а сама проблема решения системы уравнений является фундаментальной в численных методах [1–3]. В работе рассматривается следующая гладкая система нелинейных уравнений:

$$F(x) = \mathbf{0}_m, \quad \mathbf{0}_m^T = (0, \dots, 0). \quad (1)$$

Решение данной задачи рассматривается в ключе релаксации через задачу безусловной минимизации евклидовой нормы невязки:

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \{f_1(x) \stackrel{\text{def}}{=} \|F(x)\|\}. \quad (2)$$

Решение (2) ищется в рамках метода Гаусса–Ньютона. Данное решение полезно тем, что, используя только информацию о первых производных, при естественных предположениях возможна суперлинейная сходимость к решению задачи [4]. Такая быстрая скорость решения характерна

для задач машинного обучения при решении недоопределенных систем уравнений. Также метод Гаусса–Ньютона возникает в анализе метода нагурального градиента в задачах оптимизации регуляризованных вероятностных моделей. Условия, позволяющие доказать быструю сходимость метода Гаусса–Ньютона для недоопределенных моделей, часто называются условиями интерполяции, в добавок ко всему, они позволяют утверждать о наличии решения исходной системы нелинейных уравнений (1) [5]. Представленная в данной работе общая схема регуляризованного метода, в частности, имеет и явное правило вычисления приближения решения (3), фактически являющееся примером использования важного на практике механизма преобусловливания [1].

1. ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Рассмотрим итеративную процедуру решения задачи (2), основанную на минимизации линеаризованной модели функционала:

$$\begin{aligned} \phi(x, y) &\stackrel{\text{def}}{=} \|F(x) + F'(x)(y - x)\|, \\ (x, y) &\in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n. \end{aligned}$$

Дополнительно вводятся изначальные предположения. Рассмотрим замкнутое выпуклое множество $\mathcal{F} \subseteq \mathbb{R}^n$, обладающее непустой внутренностью.

¹ Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), Долгопрудный, Московская обл., Россия

² Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление» Российской академии наук, Москва, Россия

*E-mail: iudin.ne@phystech.edu

Предположение 1. Пусть $F(x)$ – многозначное отображение, удовлетворяющее условию Липшица на \mathcal{F} :

$$\exists L_F > 0: \|F'(y) - F'(x)\| \leq L_F \|y - x\|, \\ \forall (x, y) \in \mathcal{F}^2.$$

Введем понятие множества Лебега уровня $f_1(x_k)$ функции f_1 относительно приближенного решения x_k :

$$\mathcal{L}(f_1(x_k)) \stackrel{\text{def}}{=} \{x: f_1(x) \leq f_1(x_k)\}.$$

Предположим $\mathcal{L}(f_1(x_0)) \subseteq \mathcal{F}$.

Предположение 2. Пусть для многозначного отображения выполнено условие Поляка–Лоясиевича [6]:

$$\exists \mu > 0, \quad \sigma_{\min}(F'(x)^T) \geq \sqrt{\mu}, \quad \forall x \in \mathcal{F},$$

где $\sigma_{\min}(\cdot)$ – минимальное сингулярное число матрицы.

Определим локальную мажоранту (локальную модель) $\Psi_{x,L,\tau}$ функции f_1 в точке y :

$$f_1(y) \leq \Psi_{x,L,\tau}(y) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\tau}{2} + \frac{(\phi(x,y))^2}{2\tau} + \frac{L}{2} \|y - x\|^2, \\ L \geq L_F, \quad \tau > 0, \quad (x,y) \in \mathcal{F}^2.$$

Приведенная мажоранта позволяет определить правило обновления решения x_k на итерации $k \in \mathbb{Z}_+$ с $\tau_k > 0$, $L_k \in [L_0, 2L_F]$ и $L_0 \in (0, L_F]$:

$$T_{L_k, \tau_k}(x_k) \stackrel{\text{def}}{=} \arg \min_{y \in \mathbb{R}^n} \{\Psi_{x_k, L_k, \tau_k}(y)\} = \\ = x_k - (F'(x_k)^T F'(x_k) + \tau_k L_k)^{-1} F'(x_k)^T F(x_k). \quad (3)$$

В [7] показано удобство выбора $\tau_k = f_1(x_k)$, в процессе оптимизации можно на каждой итерации варьировать τ_k и L_k , используя процедуру поиска оценки локальной постоянной Липшица на отрезке $[L_0, 2L_F]$. Значение $\tau_k = \phi(x_k, y)$ соответствует ближайшей верхней оценке на $f_1(y)$ относительно τ_k с $L_k \geq L_F$, $\tau_k > 0$:

$$f_1(y) \leq \frac{L_k}{2} \|y - x_k\|^2 + \phi(x_k, y) \leq \\ \leq \frac{L_k}{2} \|y - x_k\|^2 + \frac{\tau_k}{2} + \frac{(\phi(x_k, y))^2}{2\tau_k},$$

где $\phi(x_k, y) = \|F(x_k) + F'(x_k)(y - x_k)\|$, $(x_k, y) \in \mathcal{F}^2$. В силу этого неравенства в [7] установлена глобальная линейная сходимость в условии предположения 2 при использовании мажоранты $\Psi_{x_k, L_k, \phi(x_k, y)}(y)$. Введем обозначение:

$$T_{L_k}(x_k) \stackrel{\text{def}}{=} \arg \min_{\tau > 0} \{\Psi_{x_k, L_k, \tau}(T_{L_k, \tau}(x_k))\},$$

которое позволяет упростить вычисление приближения точки минимума по y в случае $\tau = \phi(x_k, y)$, $\mathcal{L}(f_1(x_k)) \subseteq \mathcal{F}$, $L_k \geq L_F$:

$$f_1(T_{L_k, \mathcal{F}_{L_k}(x_k)}(x_k)) \leq \min_{y \in \mathcal{F}} \left\{ \frac{L_k}{2} \|y - x_k\|^2 + \phi(x_k, y) \right\} = \\ = \min_{\tau > 0} \left\{ \frac{\tau}{2} + \min_{y \in \mathcal{F}} \left\{ \frac{L_k}{2} \|y - x_k\|^2 + \frac{(\phi(x_k, y))^2}{2\tau} \right\} \right\} = \\ = \min_{\tau > 0} \{\Psi_{x_k, L_k, \tau}(T_{L_k, \tau}(x_k))\} \Rightarrow \\ \Rightarrow T_{L_k, \mathcal{F}_{L_k}(x_k)}(x_k) \in \underset{y \in \mathcal{F}}{\text{Argmin}} \left\{ \frac{L_k}{2} \|y - x_k\|^2 + \phi(x_k, y) \right\}.$$

Обозначим процедуру получения x_{k+1} на итерации k через отображение $\mathcal{X}: \mathcal{F} \times \mathbb{R}_{++}^2 \rightarrow \mathcal{F}$. Дополнительно введем обозначение $\tau_k^{\varepsilon_k}$ – приближение значения $\mathcal{F}_{L_k}(x_k)$, удовлетворяющее неравенству:

$$\Psi_{x_k, L_k, \tau_k^{\varepsilon_k}}(\mathcal{X}(x_k, L_k, \tau_k^{\varepsilon_k})) - \\ - \Psi_{x_k, L_k, T_{L_k}(x_k)}(T_{L_k, \mathcal{F}_{L_k}(x_k)}(x_k)) \leq \varepsilon_k.$$

Таким образом, схема оптимизации с подбором τ_k на шаге k заключается в следующем:

1. Получить $\tau_k^{\varepsilon_k}$ как приближение оптимального значения $\mathcal{F}_{L_k}(x_k)$;
2. Получить значение $x_{k+1} = \mathcal{X}(x_k, L_k, \tau_k^{\varepsilon_k})$ как приближение $T_{L_k, \tau_k^{\varepsilon_k}}(x_k)$.

В этой схеме вместе с поиском x_{k+1} происходит оптимизация отображения \mathcal{X} , и в таком виде метод ведет себя в режиме, близком к режиму при использовании мажоранты $\Psi_{x_k, L_k, \phi(x_k, y)}(y)$, что формально отражено в теоремах 1 и 2.

Теорема 1. Пусть выполнено предположение 1, $\varepsilon_k = \varepsilon \geq 0$, $k \in \mathbb{N}$, $r > 0$. Определим функции

$$\chi(t) \stackrel{\text{def}}{=} \begin{cases} \frac{t^2}{2}, & \text{если } t \in [0, 1]; \\ t - \frac{1}{2}, & \text{если } t > 1; \\ 0 & \text{если } t < 1. \end{cases}$$

$$\tilde{\Delta}_r(x) \stackrel{\text{def}}{=} f_1(x) - \min_{y \in \mathbb{R}^n} \{\phi(x, y) : \|y - x\| \leq r\}.$$

Тогда для метода с правилом обновления \mathcal{X} верны следующие оценки:

$$\frac{8L_F^2}{L_0} \left(\varepsilon + \frac{(f_1(x_0) - f_1(x_k))}{k} \right) \geq \\ \geq \min_{i \in \{0, k-1\}} \{ \|2L_F(T_{2L_F, \mathcal{F}_{2L_F}(x_i)}(x_i) - x_i)\|^2 \};$$

$$L_F \left(\varepsilon + \frac{(f_1(x_0) - f_1(x_k))}{k} \right) \geq \geq \min_{i \in \{0, k-1\}} \left\{ 2(rL_F)^2 \kappa \left(\frac{\tilde{\Delta}_r(x_i)}{2r^2 L_F} \right) \right\}.$$

Теорема 2. Пусть выполнены предположения 1 и 2. Определим функцию $f_2(x) \stackrel{\text{def}}{=} (f_1(x))^2$. Тогда для метода с правилом обновления \mathcal{X} выполняются следующие соотношения:

$$f_1(x_{k+1}) \leq \varepsilon_k + \begin{cases} \frac{L_F}{\mu} f_2(x_k) \leq \frac{1}{2} f_1(x_k), & \text{если } f_1(x_k) \leq \frac{\mu}{2L_F}; \\ f_1(x_k) - \frac{\mu}{4L_F}, & \text{иначе.} \end{cases}$$

Если в правиле обновления \mathcal{X} зафиксирована $L_k = L_F$, то данные соотношения выражаются по-другому:

$$f_1(x_{k+1}) \leq \varepsilon_k + \begin{cases} \frac{L_F}{2\mu} f_2(x_k) \leq \frac{1}{2} f_1(x_k), & \text{если } f_1(x_k) \leq \frac{\mu}{L_F}; \\ f_1(x_k) - \frac{\mu}{2L_F}, & \text{иначе.} \end{cases}$$

Согласно теореме 2, предложенная схема демонстрирует более быструю линейную сходимость относительно итераций по сравнению с выбором $\tau_k = f_1(x_k)$ [7], однако на практике часто это означает усложнение вычисления каждой итерации, что приходится соизмерять для определения наиболее оптимальной стратегии решения задачи.

Минимизация величины $\Psi_{x_k, L_k, \tau}(\mathcal{X}(x_k, L_k, \tau))$ по $\tau > 0$ может быть достаточно трудоемкой процедурой. Более того, отображение $\mathcal{X}(\cdot)$ может быть негладким по τ , а в случае дифференцируемости по τ практическая реализация может представлять собой разновидность алгоритма распространения ошибки через итерации метода оптимизации, аппроксимирующего отображение $T_{L_k, \tau}(x_k)$. При использовании правила вычисления x_{k+1} (3) в качестве отображения $\mathcal{X}(\cdot)$ величина $\Psi_{x_k, L_k, \tau}(\mathcal{X}(x_k, L_k, \tau))$ принимает следующий вид:

$$\Psi_{x_k, L_k, \tau}(\mathcal{X}(x_k, L_k, \tau)) = \frac{\tau}{2} + \frac{f_2(x_k)}{2\tau} - \frac{1}{2\tau} \langle (F'(x_k)^T F'(x_k) + \tau L_k)^{-1} F'(x_k)^T F(x_k), F'(x_k)^T F(x_k) \rangle.$$

Данная функция является строго выпуклой по τ , так как локальная мажоранта $\Psi_{x, L, \tau}(y)$ строго выпукла по τ и сильно выпукла по y , $\Psi_{x_k, L_k, \tau}(\mathcal{X}(x_k, L_k, \tau))$ представляет собой проекцию по y локальной ма-

жоранты $\Psi_{x, L, \tau}(y)$ [2, Theorem 3.1.7], поэтому в рассматриваемом случае приближение оптимального τ можно эффективно найти с помощью стандартных средств выпуклой оптимизации, в частности, процедур одномерного поиска.

2. ЭКСПЕРИМЕНТЫ

На основе предложенного метода проведена серия экспериментов на модельных задачах. Метод протестирован на задаче решения гладкой нелинейной системы уравнений в трех вариантах, различающихся выбором τ_k . Вариант с $\tau_k = f_1(x_k)$ называется “методом трех квадратов” [7]. Вариант, в котором на итерации k значение τ_k оптимизируется через минимизацию $\Psi_{x_k, L_k, \tau}(\mathcal{X}(x_k, L_k, \tau))$ с помощью быстрого градиентного метода, называется адаптивным методом. Вариант, в котором $\tau_k = \phi(x_k, y)$, называется методом Гаусса–Ньютона. Приняв за $x^T \stackrel{\text{def}}{=} (x^1, \dots, x^n)$, $x \in \mathbb{R}^n$, $n = 100$, рассмотрим два вида F :

1. Система уравнений на основе функции Розенброка–Скокова:

$$F_R(x) = \mathbf{0}_m, \text{ где } m = 2n - 2 \text{ и } F_{R_{2i-1}}(x) \stackrel{\text{def}}{=} i(x^i - (x^{i+1})^2), \\ F_{R_{2i}}(x) \stackrel{\text{def}}{=} 1 - x^{i+1}, i \in \{1, \dots, n-1\}.$$

2. Нат-система: $F_H(x) \stackrel{\text{def}}{=} \nabla(\|x\|^2 - 1)^2 = \mathbf{0}_m$.

Для обозначенных отображений F_R и F_H исследуемый метод был применен в трех вариантах для решения нелинейной системы уравнений, результаты экспериментов представлены на рис. 1. На данном рисунке изображены графики, усредненные по пяти запускам, отличающимися начальным приближением, полученным сэмплением из стандартного многомерного нормального распределения, смещенного на вектор, элементы которого равны -7 , в каждом случае расстояние между начальным приближением и ближайшей точкой экстремума функции f_1 не меньше $2\sqrt{n}$ в пространстве \mathbb{R}^n . В результате для каждого $f_1(x_k) \leq 10^{-6}$ расстояние между x_k и ближайшей точкой экстремума f_1 не превосходит 10^{-6} по метрике Чебышева.

Согласно представленным результатам, все три варианта выбора τ_k демонстрируют сопоставимые результаты в случае F_H , на системе F_R “метод трех квадратов” и адаптивный метод существенно лучше справились, чем метод Гаусса–Ньютона. Хотя теоремы 1 и 2 утверждают схожесть поведения адаптивного метода и метода Гаусса–Ньютона в худшем случае, однако при решении системы F_R адаптивный метод справился лучше метода Гаусса–Ньютона. Также стоит заметить, что при решении системы F_R происходит

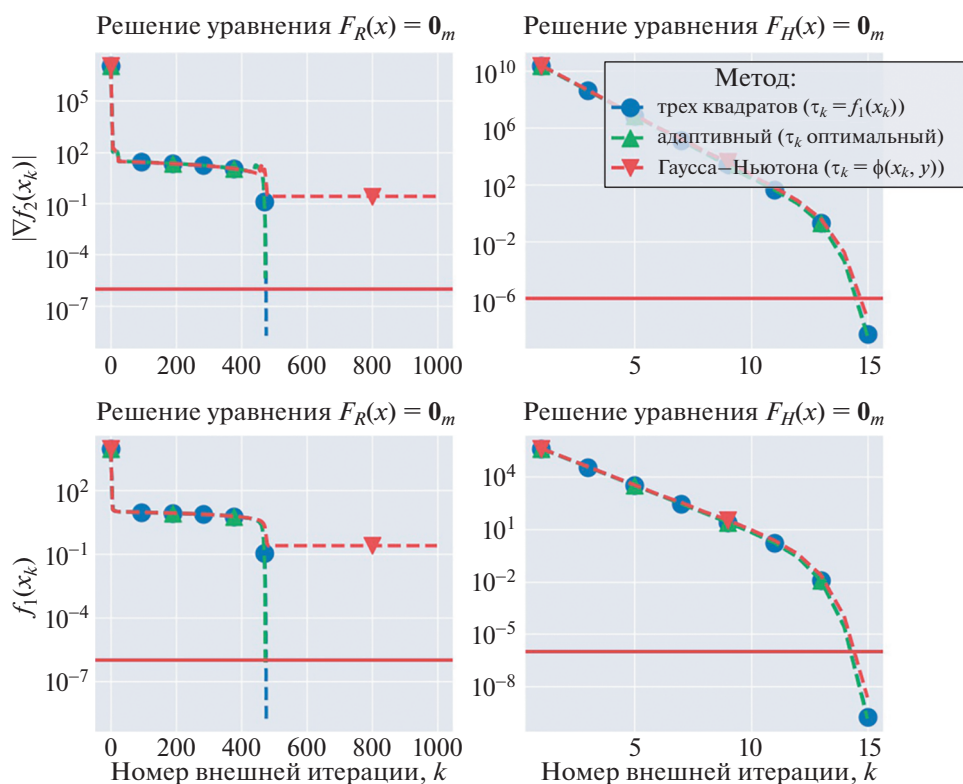


Рис. 1. Сравнение работы методов. Горизонтальная линия — допустимое значение нормы невязки 10^{-6} вблизи искомого решения уравнения.

оптимизация разновидности функции Розенброка—Скокова:

$$f_2(x) = \sum_{i=1}^{n-1} (i^2(x^i - (x^{i+1})^2)^2 + (1 - x^{i+1})^2).$$

При этом выбор $\tau_k = f_1(x_k)$ позволяет аналитически вычислять x_{k+1} , в свою очередь оптимизация $\psi_{x_k, L_k, \tau}(\mathcal{X}(x_k, L_k, \tau))$ в добавок к аналитическому вычислению x_{k+1} позволяет динамически контролировать близость мажоранты к оптимизируемой функции, выполняя процедуру одномерной минимизации, в то время как выбор $\tau_k = \phi(x_k, y)$ на практике часто требует выполнение итеративной процедуры многомерной минимизации для вычисления x_{k+1} . Эксперименты продемонстрировали, что предлагаемый метод применим не только для минимизации унимодальных функционалов f_1 с гладким отображением F , обладающим свойством Липшица, но также и для оптимизации некоторых f_1 с несколькими точками глобального минимума и с F , не обладающим свойством Липшица, например, F_H .

Более подробный отчет о результатах экспериментов с методом Гаусса—Ньютона в предложенных вариантах изложен в [8].

ИСТОЧНИК ФИНАНСИРОВАНИЯ

Работа была поддержана грантом РНФ 21-71-30005.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Голиков А.И., Евтушенко Ю.Г., Капорин И.Е. Метод ньютоновского типа для решения систем линейных уравнений и неравенств // ЖВМиМФ. 2019. Т. 59. № 12. С. 2086–2101. <https://doi.org/10.1134/S0044466919120093>
2. Nesterov Yu. Lectures on convex optimization. V. 137. Berlin, Germany: Springer, 2018.
3. Гасников А. В. Современные численные методы оптимизации. Метод универсального градиентного спуска. М.: МЦНМО, 2020.
4. Nesterov Yu. Modified Gauss-Newton scheme with worst case guarantees for global performance // Optimisation methods and software. 2007. V. 22. № 3. P. 469–483.
5. Gorbunov E., Hanzely F, Richtárik P. A unified theory of sgd: Variance reduction, sampling, quantization and coordinate descent // International Conference on Artificial Intelligence and Statistics. PMLR. 2020. P. 680–690.
6. Поляк Б.Т. Градиентные методы минимизации функционалов // ЖВМиМФ. 1963. Т. 3. № 4. С. 643–653.
7. Nesterov Yu. Flexible Modification of Gauss-Newton Method // CORE Discussion Papers. 2021.

8. *Yudin N., Gasnikov A.* Flexible Modification of Gauss-Newton Method and Its Stochastic Extension // WIAS

Preprint No. 2813. 2021.

<https://doi.org/10.20347/WIAS.PREPRINT.2813>

ADAPTIVE GAUSS–NEWTON METHOD FOR SOLVING SYSTEMS OF NONLINEAR EQUATIONS

N. E. Yudin^{a,b}

^a *Moscow Institute of Physics and Technology, Dolgoprudny, Moscow Region, Russian Federation*

^b *Federal Research Center “Informatics and Control” of Russian Academy of Sciences, Moscow, Russian Federation*

Presented by Academician of the RAS Yu. G. Evtushenko

In this article, we propose a new version of Gauss–Newton method for solving systems of nonlinear equations based on ideas of the residual upper bound for a system of nonlinear equations and a quadratic regularization term. We prove a global convergence for the presented method. Under natural assumptions we establish a global linear convergence. The proposed method uses an adaptive strategy to choose hyperparameters of a local model forming a flexible and convenient method, implementable using standard convex optimization techniques.

Keywords: systems of nonlinear equations, unimodal optimization, Gauss–Newton method, Polyak–Łojasiewicz condition, inexact proximal mapping, inexact oracle, underdetermined model, complexity estimate