

# 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).

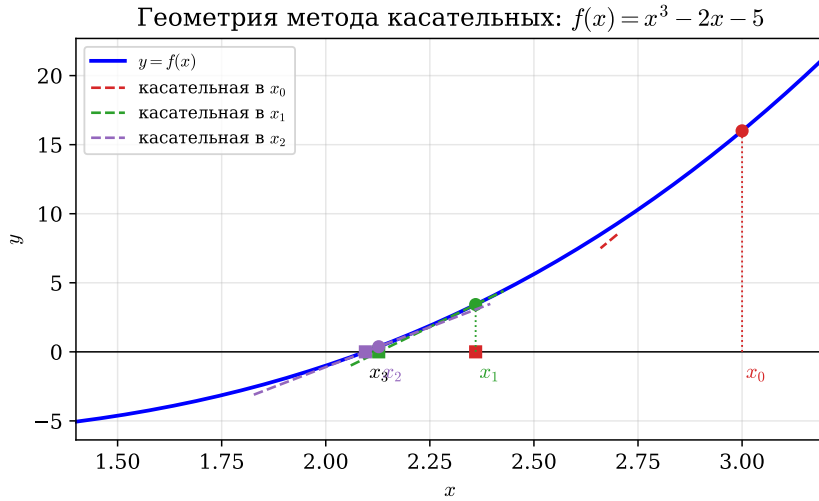


Рис. 2.1. Три итерации метода Ньютона для уравнения  $x^3 - 2x - 5 = 0$ . Каждая касательная (пунктир) пересекает ось абсцисс в точке, которая берётся в качестве следующего приближения (квадрат). После трёх шагов корень найден с точностью лучше  $10^{-6}$ .

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).

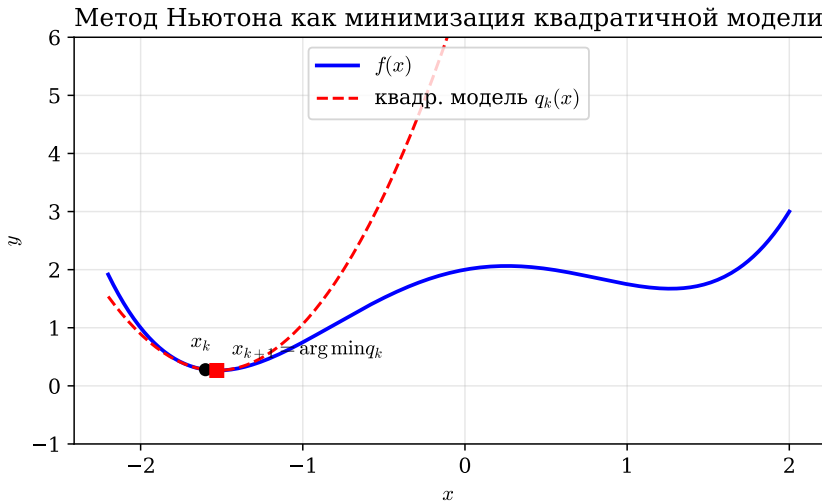


Рис. 2.2. Метод Ньютона как минимизация локальной квадратичной модели  $q_k$  (пунктир): следующая точка  $x_{k+1}$  — это вершина параболы, касающейся графика  $g$  в точке  $x_k$ .

**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.

**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.

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 (AM–GM) 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 *квадрируется*: 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  $x_0 = 5$ :

$kx_k$	
	05,000 000
	$\frac{1}{2}(5 + 21,66/5) = 4,666 000$
	24,654 463
	34,654 460

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

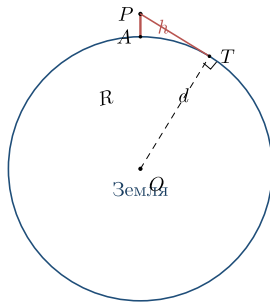


Рис. 2.3. Расстояние до горизонта  $d = \sqrt{(R + h)^2 - R^2} \approx \sqrt{2Rh}$ .

**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

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

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

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

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  $x_0 > 0$ .

**i** 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 останковки; 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  $(0, \infty)$ .

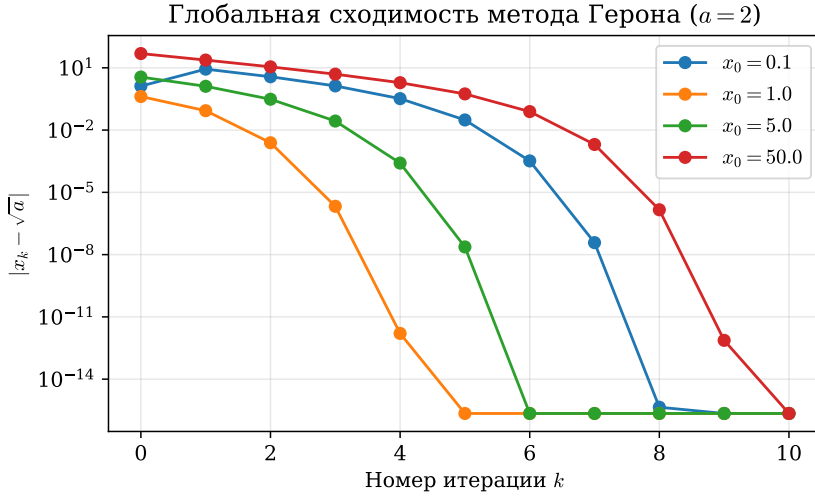


Рис. 2.4. Глобальная сходимость метода Герона для  $\sqrt{2}$  из четырёх очень разных стартовых точек. Шкала ошибки логарифмическая.

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**.

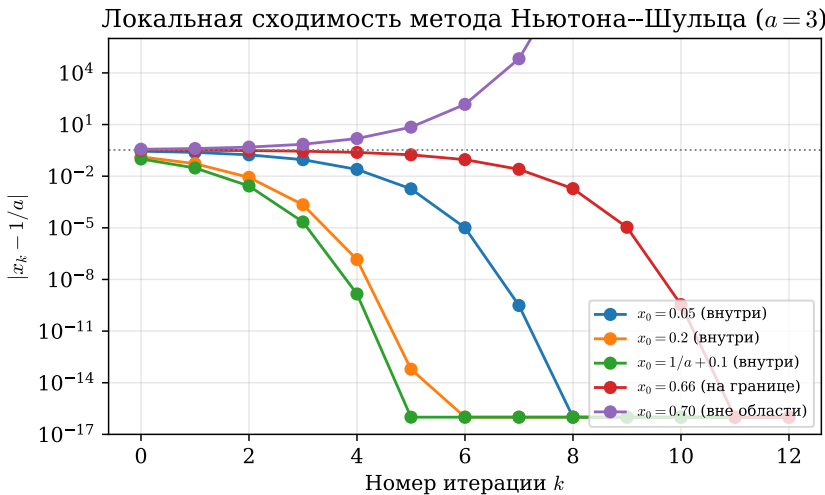


Рис. 2.5. Локальная сходимость метода Ньютона–Шульца для  $1/3$ . Радиус сходимости – интервал  $(0, 2/3)$ ; вне его метод расходится.

*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, отделимость 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  $\xi_k$  — 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  $|x_k - x^*| < \delta$ :

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

Значит, последовательность не покидает  $\delta$ -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 ноль, 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–GM.)
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?