中国农业大学学报　1999,4(2):31～35
Journal of China Agricultural University

Gauss-Newton 法恰 2 阶收敛性及其有效实现[①]

周志坚[②]　王兆智
(中国农业大学工程基础科学部)

摘　要　研究求解零残差非线性最小二乘问题的算法。给出了保证 Gauss-Newton 法恰 2 阶收敛的条件，在此基础上构造了利用条件预优共轭梯度法求解 Gauss-Newton 方程的新的有效算法。新算法与传统的使用 Choleski 技术的 Gauss-Newton 法具有相同的收敛速率，但在求解 Gauss-Newton 方程组时减少了代数运算的计算量。如维数 $n=200$ 时，其计算量大体可减少 35%，且当 n 趋于无穷时，两者的计算量之比以 $\ln 2/\ln n$ 的速度趋于零。

关键词　非线性最小二乘；Gauss-Newton 法；条件预优共轭梯度法
分类号　O 221.2

Exactly Quadratic Convergence and Efficient Implementation of Gauss-Newton Method

Zhuo Zhijian　Wang Zhaozhi
(College of Applied Engineering Sciences, CAU)

Abstract　The methods to solve the nonlinear least squares problem with zero vesidual are discussed. A sufficient condition ensuring the Gauss-Newton method quadratically convergent exactly is given. Based on it, a new efficient implementation of preconditioned conjugate gradient is put forward to solve the Gauss-Newton equation and save the cost on computation with the same exactly quadratic convergence to the traditional choleski factorization. The ratio of computation will decrease 35% when $n=200$ and reduce to zero at the rate of $\ln 2/\ln n$ when n is infinite.

Key words　nonlinear least squares; Guass-Newton method; preconditioned conjugate gradient

考虑求解非线性最小二乘问题

$$\min_{x\in\mathbf{R}^n} f(x)=\frac{1}{2}\mathbf{R}(x)^{\mathrm{T}}\mathbf{R}(x)=\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}[r_i(x)]^2 \quad (m\geqslant n) \tag{1}$$

其中 $\mathbf{R}(x)=[r_1(x),r_2(x),\cdots,r_m(x)]^{\mathrm{T}}$，这里 $r_i(x)(i=1,2,\cdots,m)$ 为一般非线性函数。

假设在问题(1)的局部解 x^* 的某领域内满足下列条件：

A1　$f(x^*)=0$；

A2　$r_i(x)$ 的 Hesse 矩阵 $\nabla^2 r_i(x)$ Lipschitz 连续，$i=1,2,\cdots,m$；

A3　$\boldsymbol{J}(x^*)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{J}(x^*)$ 正定，其中 $\boldsymbol{J}(x)$ 是 $m\times n$ 阶矩阵，$\boldsymbol{J}(x)=[\partial r_i(x)/\partial x_j]$；

收稿日期：1998-08-07
①国家自然科学基金资助项目
②周志坚，北京清华东路 17 号 中国农业大学(东校区)71 信箱，100083

A4 对于任何一个非零向量 $\boldsymbol{h}=(h_1,h_2,\cdots,h_n)^{\mathrm{T}}\in\mathbf{R}^n$，有 $\boldsymbol{J}(x^*)^{\mathrm{T}}\ \nabla^2\mathbf{R}(x^*)\boldsymbol{hh}\neq 0$，其中 $\nabla^2\mathbf{R}(x^*)\boldsymbol{hh}$ 是 m 维向量，$\nabla^2\mathbf{R}(x^*)\boldsymbol{hh}=(a_1,a_2,\cdots,a_m)^{\mathrm{T}}$，

$$a_l=\sum_{i=1}^{n}\left[\sum_{j=1}^{n}\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\frac{\partial r_l(x^*)}{\partial x_i}\right)h_i h_j\right],l=1,2,\cdots,m$$

为了更清楚地理解条件 A4 的含义，现考虑 $m=n=1$ 的特殊情形，此时的条件 A4 等价于 $r_1'(x^*)r_1''(x^*)\neq 0$。由此可见这不是一个限制性很强的条件。

Gauss-Newton 法是求解上述非线性最小二乘问题的基本方法，其迭代步骤如下：给定当前点 x^k 后，求解 Gauss-Newton 方程

$$\boldsymbol{J}(x^k)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{J}(x^k)s=-\boldsymbol{J}(x^k)^{\mathrm{T}}\mathbf{R}(x^k) \tag{2}$$

得到增量 $s=s^k$，从而确定下一个迭代点

$$x^{k+1}=x^k+s^k \tag{3}$$

笔者首先进一步研究 Gauss-Newton 法的局部收敛性质，即证明它具有恰 2 阶收敛性，然后在此基础上提出一个新的更有效的实现方案。事实上，在传统的 Gauss-Newton 法中，对于方程(2)通常采用 Choleski 分解技术求解。本文中研究求解方程(2)的更有效的方法。根据文献[1]，这里将 Choleski 分解与条件预优共轭梯度(PCG)法相结合，给出一种近似求解方程(2)的方法。它所得到的点列与用 Choleski 分解方法具有相同的收敛速率，即它们都具有恰 2 阶收敛性，但当自变量个数 $n\geqslant 55$ 时，可以减少计算量。

1 Gauss-Newton 法的恰二阶收敛性

在假设 A1～A4 成立的条件下，Gauss-Newton 法构造的迭代点列至少是 2 阶收敛的。下面证明它的恰 2 阶收敛性。

定理 1 考虑 Gauss-Newton 法产生的迭代点列 $\{x^k\}$。设条件 A1～A4 成立，则存在正数 δ，M_1 及 M_2，使当 $\|x^0-x^*\|<\delta$ 时，点列 $\{x^k\}$ 满足

$$M_1\|x^k-x^*\|^2\leqslant\|x^{k+1}-x^*\|\leqslant M_2\|x^k-x^*\|^2 \tag{4}$$

证明 由于式(4)右端不等式是众所周知的结论(事实上它的成立并不依赖于条件 A4)，故只需证明左端不等式。而对此只需证明存在正数 δ_1 和 M_1，使当 $\|x^k-x^*\|<\delta_1$ 时，有 $\|x^{k+1}-x^*\|<\delta_1$，$M_1\|x^k-x^*\|^2\leqslant\|x^{k+1}-x^*\|$。根据式(4)右端不等式，又只需证明存在正数 δ_2 和 M_1 使当 $\|x^k-x^*\|<\delta_2$ 时有

$$M_1\|x^k-x^*\|^2\leqslant\|x^{k+1}-x^*\| \tag{5}$$

事实上，当记 $\boldsymbol{h}^k=(h_1^k,\cdots,h_n^k)^{\mathrm{T}}=x^k-x^*$，新迭代点 x^{k+1} 满足

$$\begin{aligned}x^{k+1}-x^*&=x^k-[\boldsymbol{J}(x^k)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{J}(x^k)]^{-1}\boldsymbol{J}(x^k)^{\mathrm{T}}\mathbf{R}(x^k)-x^*=\\&[\boldsymbol{J}(x^k)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{J}(x^k)]^{-1}\boldsymbol{J}(x^k)^{\mathrm{T}}[\boldsymbol{J}(x^k)\boldsymbol{h}^k-\mathbf{R}(x^k)]\end{aligned} \tag{6}$$

记

$$\boldsymbol{Q}_1(x)=\mathbf{R}(x)-\boldsymbol{J}(x^*)(x-x^*)-(1/2)\nabla^2\mathbf{R}(x^*)(x-x^*)(x-x^*) \tag{7}$$

则式(6)可写为

$$\begin{aligned}x^{k+1}-x^*=&[\boldsymbol{J}(x^k)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{J}(x^k)]^{-1}\{\boldsymbol{J}(x^k)^{\mathrm{T}}[\boldsymbol{J}(x^k)-\boldsymbol{J}(x^*)]\boldsymbol{h}^k-\\&(1/2)\boldsymbol{J}(x^k)^{\mathrm{T}}\ \nabla^2\mathbf{R}(x^*)\boldsymbol{h}^k\boldsymbol{h}^k-\boldsymbol{J}(x^k)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}_1(x^k)\}\end{aligned}$$

再记

$$Q_2(x)=J(x)-J(x^*)-\nabla^2\mathbf{R}(x^*)(x-x^*) \tag{8}$$

$$Q_3(x)=J(x)^{\mathrm{T}}-J(x^*)^{\mathrm{T}} \tag{9}$$

便有

$$x^{k+1}-x^*=[J(x^k)^{\mathrm{T}}J(x^k)]^{-1}\{(1/2)J(x^*)^{\mathrm{T}}\nabla^2\mathbf{R}(x^*)h^kh^k+ (1/2)Q_3(x^k)\nabla^2\mathbf{R}(x^*)h^kh^k+J(x^k)^{\mathrm{T}}Q_2(x^k)h^k-J(x^k)^{\mathrm{T}}-Q_1(x^k)\} \tag{10}$$

下面逐项分析式(10)右端花括弧内各项的量级。考虑非零 n 维向量 h 的函数$\|(1/2)\cdot J(x^*)^{\mathrm{T}}\nabla^2\mathbf{R}(x^*)(h/\|h\|)(h/\|h\|)\|$,由于 $h/\|h\|$是单位向量,而单位球面是有界闭集,所以上述函数在单位球面上必有最小值 c_1;再由假设 A4 可推知 $c_1>0$:故对任意非零向量 h 有$\|(1/2)\cdot J(x^*)^{\mathrm{T}}\nabla^2\mathbf{R}(x^*)(h/\|h\|)(h/\|h\|)\|\geqslant c_1$,即

$$\|(1/2)J(x^*)^{\mathrm{T}}\nabla^2\mathbf{R}(x^*)hh\|\geqslant c_1\|h\|^2 \tag{11}$$

另外,由假设条件 A1 和 A2 可知,对分别由式(7),(8)和(9)定义的 $Q_1(x)$,$Q_2(x)$和 $Q_3(x)$当 $x\to x^*$时有$\|Q_1(x)\|=o(\|x-x^*\|^2)$,$\|Q_2(x)\|=o(\|x-x^*\|)$,$\|Q_3(x)\|=o(1)$,所以在假设条件 A1～A3 情况下,存在充分小的 $\delta_2>0$,使当$\|x-x^*\|\leqslant\delta_2$ 时,有

$$\|J(x)^{\mathrm{T}}\|\leqslant 2\|J(x^*)\|$$

$$\|[J(x)^{\mathrm{T}}J(x)]^{-1}h\|\geqslant(2\lambda_{\max})^{-1}\|h\|,\forall\ h\neq 0 \tag{12}$$

$$\|J(x)^{\mathrm{T}}Q_1(x)\|\leqslant\|J(x)^{\mathrm{T}}\|\|Q_1(x)\|\leqslant 2\|J(x^*)^{\mathrm{T}}\|\|Q_1(x)\|\leqslant(1/4)c_1\|x-x^*\|^2 \tag{13}$$

$$\|J(x)^{\mathrm{T}}Q_2(x)(x-x^*)\|\leqslant\|J(x)^{\mathrm{T}}\|\|Q_2(x)\|\|x-x^*\|\leqslant(1/4)c_1\|x-x^*\|^2 \tag{14}$$

$$\|(1/2)Q_3(x)\nabla^2\mathbf{R}(x^*)(x-x^*)(x-x^*)\|\leqslant(1/4)c_1\|x-x^*\|^2 \tag{15}$$

其中 $\lambda_{\max}$是 $J(x^*)^{\mathrm{T}}J(x^*)$的最大特征值。

利用式(11)和式(12)～(15),便知当$\|x^k-x^*\|\leqslant\delta_2$ 时,式(10)右端花括弧内各项之和满足$\|\{(1/2)J(x^*)^{\mathrm{T}}\nabla^2\mathbf{R}(x^*)h^kh^k+(1/2)Q_3(x^k)\nabla^2\mathbf{R}(x^*)h^kh^k+J(x^k)^{\mathrm{T}}Q_2(x^k)h^k-J(x^k)^{\mathrm{T}}Q_1\cdot(x^k)\}\|\geqslant\|(1/2)J(x^*)^{\mathrm{T}}\nabla^2\mathbf{R}(x^*)h^kh^k\|-\|(1/2)Q_3(x^k)\nabla^2\mathbf{R}(x^*)h^kh^k\|-\|J(x^k)^{\mathrm{T}}Q_2(x^k)h^k\|-\|J(x^k)^{\mathrm{T}}Q_1(x^k)\}\|\geqslant M_1\|h^k\|^2=M_1\|x^k-x^*\|^2$,其中 $M_1=c_1/4$ 即式(5)成立。

2 算　　法

现研究对传统 Gauss-Newton 法的改进。在执行迭代格式(3)时,称由 Choleski 分解 $J(x^k)^{\mathrm{T}}J(x^k)=L_kD_kL_k^{\mathrm{T}}$ 得到增量 s^k,从而确定迭代点 x^{k+1}为执行一步 Newton-Choleski 步,而由 PCG 法求解得到增量 s^k,从而确定 x^{k+1}为执行一步 Newton-PCG 步。本文中所给新算法采用的计算方案是:每执行一步 Newton-Choleski 步后,连续执行 p 步 Newton-PCG 步,反复进行直到满足终止规则为止。这里的参数 $p=y^*(n)$是下列一维优化问题的整数解:

$$\min_{\text{s.t.}\quad y\geqslant 0} u(y,n)=(1+y)^{-1}+y(1+y)^{-1}(2^{y+1}+1)Q(n) \tag{16}$$

其中 $Q(n)=(2n^2+6n+2)(n^3/6+3n^2/2-2n/3)^{-1}$。下面给出了对应于若干不同 n 值的问题(16)参数 p 的解值:

n	1～54	55～246	247～966	967～1 000
$p=y^*(n)$	0	1	2	3

我们的新算法可以详述如下。

Gauss-Newton-PCG 算法：第 1 步，取定参数 $\epsilon \in (0, 1/2^{p+1})$ 及初始点 x^0，取参数 p 为问题(4)的解；置 $k=0$；第 2 步，如果 $\mathbf{R}(x^k)=0$，则终止迭代，否则；第 3 步，如果 k 不能被 $p+1$ 整除，转入第 5 步，否则；第 4 步，置 $\boldsymbol{B}^k=\boldsymbol{J}(x^k)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{J}(x^k)$，并进行 Choleski 分解 $\boldsymbol{B}^k=\boldsymbol{L}_k\boldsymbol{D}_k\boldsymbol{L}_k^{\mathrm{T}}$ 求解方程(2)，得出 s^k，转第 6 步；第 5 步，置 $\boldsymbol{B}^k=\boldsymbol{B}^{k-1}$，并置条件预优矩阵 $\boldsymbol{M}=(\boldsymbol{B}^k)^{-1}$。用下列子迭代求出式(2)的一个相应近似解 s^k。第 5.1 步，置 $s_1=0, i=1$；第 5.2 步，计算 $r_i=\boldsymbol{J}(x^k)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{J}(x^k)s_i+\boldsymbol{J}(x^k)^{\mathrm{T}}\mathbf{R}(x^k)$；第 5.3 步，如果 $\|r_i\|\leqslant\|\boldsymbol{J}(x^k)^{\mathrm{T}}\mathbf{R}(x^k)\|^{2+\epsilon}$，转入第 5.6 步，否则；第 5.4 步，以 $\boldsymbol{M}$ 为条件预优矩阵，用求解方程(2)的 PCG 法(如文献[2]中的算法 2.5.1)迭代一步得出 s_{i+1}；第 5.5 步，令 $i=i+1$，返回 5.3 步；第 5.6 步，令 $s^k=s_i$；第 6 步，令 $x^{k+1}=x^k+s^k$，置 $k=k+1$，反回第 2 步。

3　Gauss-Newton-PCG 法效率分析

为比较 Gauss-Newton-PCG 算法与传统的 Gauss-Newton 法的计算量，现先讨论前者的局部收敛速率，即证明它的恰 2 阶收敛性。

定理 2　考虑 Gauss-Newton-PCG 法产生的迭代点列 $\{x^k\}$。设条件 A1～A4 成立，则存在正数 δ'，M_1' 及 M_2'，使当 $\|x^0-x^*\|<\delta'$ 时，点列 $\{x^k\}$ 满足

$$M_1'\|x^k-x^*\|^2\leqslant\|x^{k+1}-x^*\|\leqslant M_2'\|x^k-x^*\|^2$$

证明　与定理 1 的证明类似，只需证明存在正数 δ'，M_1' 及 M_2'，使当 $\|x^0-x^*\|<\delta'$ 时有

$$M_1'\|x^k-x^*\|^2\leqslant\|x^{k+1}-x^*\|\leqslant M_2'\|x^k-x^*\|^2 \tag{17}$$

显然 $\|x^{k+1}-x^*\|=\|x^k+s^k-x^*\|=\|x^k+[\boldsymbol{J}(x^k)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{J}(x^k)]^{-1}[r_k-\nabla f(x^k)]-x^*\|=\|x_{\mathrm{GN}}^{k+1}-x^*+[\boldsymbol{J}(x^k)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{J}(x^k)]^{-1}r_k\|$，其中 $x_{\mathrm{GN}}^{k+1}=x^k-[\boldsymbol{J}(x^k)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{J}(x^k)]^{-1}\nabla f(x^k)$ 是 Gauss-Newton 法从 x^k 得到的新迭代点。而

$$\|x_{\mathrm{GN}}^{k+1}-x^*\|-\|[\boldsymbol{J}(x^k)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{J}(x^k)]^{-1}r_k\|\leqslant\|x^{k+1}-x^*\|\leqslant \|x_{\mathrm{GN}}^{k+1}-x^*\|+\|[\boldsymbol{J}(x^k)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{J}(x^k)]^{-1}r_k\| \tag{18}$$

由定理 1 知，当 $\|x^k-x^*\|\leqslant\delta$ 时有

$$M_1\|x^k-x^*\|^2\leqslant\|x_{\mathrm{GN}}^{k+1}-x^*\|\leqslant M_2\|x^k-x^*\|^2 \tag{19}$$

其中 δ 和 M_1, M_2 由定理 1 给出，由式(18)和(19)可以看出，为证明式(17)只需证明存在 $\delta'\leqslant\delta$，使当 $\|x^k-x^*\|\leqslant\delta'$ 有

$$\|[\boldsymbol{J}(x^k)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{J}(x^k)]^{-1}r_k\|\leqslant(1/2)M_1\|x^k-x^*\|^2 \tag{20}$$

其理由是我们所选取的 $M_1'=M_1/2$ 和 $M_2'=M_2-M_1/2$ 即可。

现在证明式(20)成立。由 Gauss-Newton-PCG 算法的第 5.3 步得知，$\|r_k\|\leqslant\|\boldsymbol{J}(x^k)^{\mathrm{T}}\cdot\mathbf{R}(x^k)\|^{2+\epsilon}$，故有 $\|[\boldsymbol{J}(x^k)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{J}(x^k)]^{-1}r_k\|\leqslant\|[\boldsymbol{J}(x^k)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{J}(x^k)]^{-1}\|\|\boldsymbol{J}(x_k)^{\mathrm{T}}\|^{2+\epsilon}\|\mathbf{R}(x^k)\|^{2+\epsilon}$，而由假设 A1～A3 可知，存在 $\delta''>0$，使 $\|x-x^*\|\leqslant\delta''$ 时有 $\|[\boldsymbol{J}(x)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{J}(x)]^{-1}\|\leqslant2\|[\boldsymbol{J}(x^*)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{J}(x^*)]^{-1}\|$，$\|\boldsymbol{J}(x)^{\mathrm{T}}\|\leqslant2\|\boldsymbol{J}(x^*)^{\mathrm{T}}\|$，$\|\mathbf{R}(x)\|\leqslant2\|[\nabla r_1(x^*),\cdots,\nabla r_m(x^*)]^{\mathrm{T}}\|\|x-x^*\|$，所以可选 $\delta'\leqslant\min(\delta,\delta'')$，使得当 $\|x^k-x^*\|\leqslant\delta'$ 时，式(20)成立。

由定理 1 和定理 2 可知，传统的 Gauss-Newton 法和我们的 Gauss-Newton-PCG 算法均为恰 2 阶收敛。注意到它们的每次迭代同样地要求各计算 1 次 Gauss-Newton 方程(2)的系数矩阵和右端项，所以为比较算法的有效性，只需讨论这 2 种算法求方程(2)时的效率。

定义 1　记本文算法产生的点列 x^k 为 Gauss-Newton-PCG 点列:

$$x^k=\begin{cases}x_{\mathrm{C}}^k, & p+1\mid k\\ x_{\mathrm{PCG}}^k, & p+1\nmid k\end{cases}$$

其中 $k=0,1,2,\cdots$。序列中的下标 C,PCG 分别表示在该点使用 Newton-Choleski 步与 Newton-PCG 步。用 W_j 表示本文算法从点 x_{C}^{jp} 开始直到得到点 $x_{\mathrm{C}}^{(p+1)}$ 在求解 Gauss-Newton 方程中所需的乘除法次数,而 N_j 表示直接用 Choleski 分解求解 $p+1$ 步 Gauss-Newton 方程所需的乘除法次数。定义本文算法与使用 Choleski 分解的 Gauss-Newton 法在求解 Gauss-Newton 方程时的效率比为

$$\eta=\eta(n)=\sup\left\{\lim_{j\to\infty}\sup\frac{W_j}{N_j}\,\middle|\,x^k:\lim_{k\to\infty}x^k=x^*\right\}$$

利用文献[1]的方法可得如下结论。

定理 3　本文算法与使用 Choleski 分解的 Gauss-Newton 法在求解 Gauss-Newton 方程时的效率比 η 满足 $\eta=\eta(n)\leqslant\beta(n)$。其中 $\beta(n)$具有下列性质:1)当 $n\leqslant54$ 时,$\beta(n)=1$,当 $n\geqslant55$ 时 $\beta(n)<1$;2)当 $n\geqslant55$ 时,$\beta(n)$是严格递减函数;3)任给正数 σ 存在正数 N,当 $n>N$ 时,有 $\beta(n)\leqslant(\ln 2+\sigma)(\ln n)^{-1}$成立。

下面给出对应于若干 n 值的 $\beta(n)$值:

n	1～54	100	150	200	415	500	600	800	1 000
$\beta(n)$	1	0.78	0.69	0.65	0.50	0.48	0.45	0.42	0.40

由以上分析可以看出,笔者所给的算法与传统的 Gauss-Newton 法具有相同的收敛速率——恰 2 阶收敛,同时它们每次迭代所需计算的函数信息也完全相同;但是它们每次迭代所需的代数运算量是不同的。这表现在用它们求解 Gauss-Newton 方程所需的计算量不同。确切地说,如果仅考虑它们所需的乘除法运算次数,如当 $n\leqslant54$ 时,本文所给出的算法与传统的 Gauss-Newton 法的计算量相同,而当 $n\geqslant55$ 时,本文所给算法的计算量比它要少,特别地,当 $n=200$ 时,其求解方程组的计算量大体可减少 35%;而当 $n\to\infty$时,两算法求解方程组时的效率 $\eta=\eta(n)$趋于零的速度不低于 $\ln 2/\ln n$ 趋于零的速度:因此本文所给算法是有效的。

本研究得到邓乃扬教授的指导,谨致谢意。

参　考　文　献

1　Deng N Y, Wang Z Z. Can Newton method be surpassed. Chinese Science Bulletin,1998,43:132～134

2　Kelley C T. Iterative Methods for Linear and Nonlinear Equations. SIAM,Philadelphia,1995. 22～23