НАО «Восточно-Казахстанский технический университет имени Д. Серикбаева»

Дисциплина «Методы оптимизации»

ЛЕКЦИЯ 9

Метод касательных в одномерной оптимизации

Образовательная программа 6B06103 Математическое и компьютерное моделирование

Объём: 2 академических часа. **Место в рабочей программе:** лекция 9.

Цель: научиться находить минимум функции одной переменной методом Ньютона, обосновывать условия его применения, оценивать точность и использовать дробление шага при неудачном полном шаге.

План занятия: переход к уравнению для производной; касательная и квадратичная модель; локальная сходимость; критерии остановки; подробный пример; причины отказа; дробление шага; программная реализация и самостоятельные задания.

Результаты обучения: студент выводит формулу метода, различает поиск корня функции и поиск минимума, проверяет вторую производную, выполняет первые итерации вручную, объясняет квадратичную скорость сходимости и сопоставляет вычислительные затраты с результатами лекций 7–8.

1 Смысл метода касательных

В рабочей программе метод касательных рассматривается как метод Ньютона [2]. В задаче оптимизации касательная строится к графику **первой производной** функции. Её пересечение с осью абсцисс даёт следующее приближение к стационарной точке.

Рассмотрим задачу

$$f(x) \to \min, \qquad x \in [a; b].$$

Если минимум x^* находится внутри отрезка и функция дифференцируема, необходимое условие имеет вид $f'(x^*) = 0$. Введём вспомогательную функцию

$$g(x) = f'(x).$$

Тогда задача нахождения внутреннего минимума включает решение уравнения $g(x) = 0$. После нахождения корня нужно установить характер стационарной точки. Условие $f''(x^*) > 0$ достаточно для строгого локального минимума, но без дополнительных предположений не доказывает, что найден глобальный минимум на всём отрезке.

В этой лекции основная вычислительная схема рассматривается для дважды непрерывно дифференцируемых сильно выпуклых функций:

$$f''(x) \geq \mu > 0 \quad \text{для всех } x \in [a; b].$$

При таком условии производная строго возрастает и на отрезке существует не более одной внутренней стационарной точки. Если она существует, это единственный глобальный минимум. Константа μ также позволяет переводить невязку производной в оценку ошибки координаты.

Различие терминов. В литературе встречается и другой алгоритм, основанный на пересечении двух опорных касательных к самой выпуклой функции f. Он использует другую формулу и обычно относится к методам первого порядка. Здесь изучается именно метод Ньютона для уравнения $f'(x) = 0$, соответствующий пояснению рабочей программы.

2 Проверка границ до начала итераций

Для выпуклой дифференцируемой функции знак производной на границах позволяет сразу определить некоторые случаи.

Условие	Положение минимума	Действие
$f'(a) \geq 0$	Левая граница a	Вернуть a
$f'(b) \leq 0$	Правая граница b	Вернуть b
$f'(a) < 0 < f'(b)$	Внутри отрезка	Решать $f'(x) = 0$

При сильной выпуклости эти случаи не противоречат друг другу. Например, из $f'(a) \geq 0$ следует $f'(x) > 0$ при $x > a$, поэтому функция возрастает вправо от a.

Рассмотрим $f(x) = (x-2)^2$ на $[3; 4]$. Производная равна $2(x-2)$ и положительна на всём отрезке. Безусловный минимум $x = 2$ недопустим, а минимум задачи на отрезке достигается в $x = 3$. Требование $f'(x) = 0$ здесь применять к решению ограниченной задачи нельзя.

Если функция не является выпуклой, таблица перестаёт быть общим правилом поиска глобального минимума. Тогда нужно исследовать все подходящие стационарные точки, границы и особенности области определения. Одной успешной итерационной последовательности для этого недостаточно.

3 Геометрический вывод формулы Ньютона

Пусть дано приближение x_k и $g'(x_k) = f''(x_k) \neq 0$. Уравнение касательной к графику g в этой точке имеет вид

$$\ell_k(x) = g(x_k) + g'(x_k)(x - x_k).$$

Следующее приближение выбирают в точке пересечения касательной с осью абсцисс. Полагая $\ell_k(x_{k+1}) = 0$, получаем

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

После возвращения к исходной функции

$$\boxed{x_{k+1} = x_k - \frac{f'(x_k)}{f''(x_k)}}.$$

Почему нельзя подставлять f/f'. Формула $x_{k+1} = x_k - f(x_k)/f'(x_k)$ решает уравнение $f(x) = 0$. Значение функции в минимуме вовсе не обязано быть нулевым. Поэтому эта формула в общем случае не решает поставленную задачу минимизации.

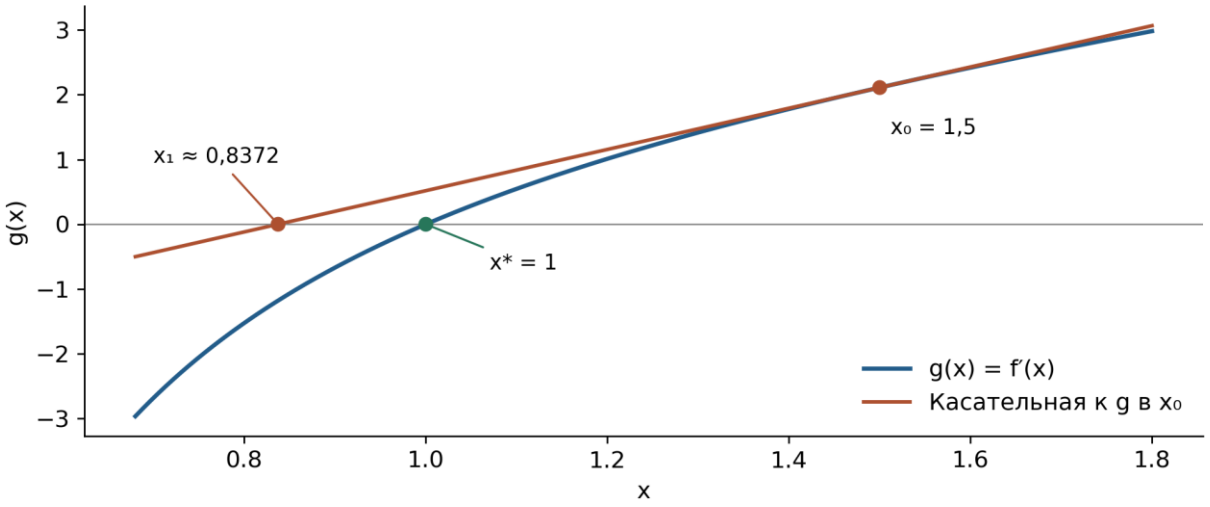


Рисунок 1 — Следующее приближение находится по касательной к производной

На рисунке использована функция $f(x) = x^2 + 2/x$. При $x_0 = 1{,}5$ касательная к $g = f'$ пересекает ось в $x_1 \approx 0{,}8372$. Первая итерация проходит левее точного минимума $x^* = 1$. Пересечение точки минимума одним шагом допустимо: метод Ньютона не обязан строить монотонную последовательность координат.

В отличие от золотого сечения, обычный метод Ньютона не сохраняет вложенную последовательность отрезков неопределённости. Сам факт того, что все приближения оказались допустимыми, ещё не даёт оценки расстояния до минимума.

4 Вывод через квадратичную модель

Тот же шаг можно получить непосредственно из локального приближения функции [1]. Для малого приращения d запишем квадратичную модель

$$q_k(d) = f(x_k) + f'(x_k)d + \frac{1}{2}f''(x_k)d^2.$$

Если $f''(x_k) > 0$, модель является строго выпуклой квадратичной функцией по d. Её минимум определяется условием

$$q_k'(d) = f'(x_k) + f''(x_k)d = 0.$$

Отсюда направление шага

$$d_k = -\frac{f'(x_k)}{f''(x_k)}, \qquad x_{k+1} = x_k + d_k.$$

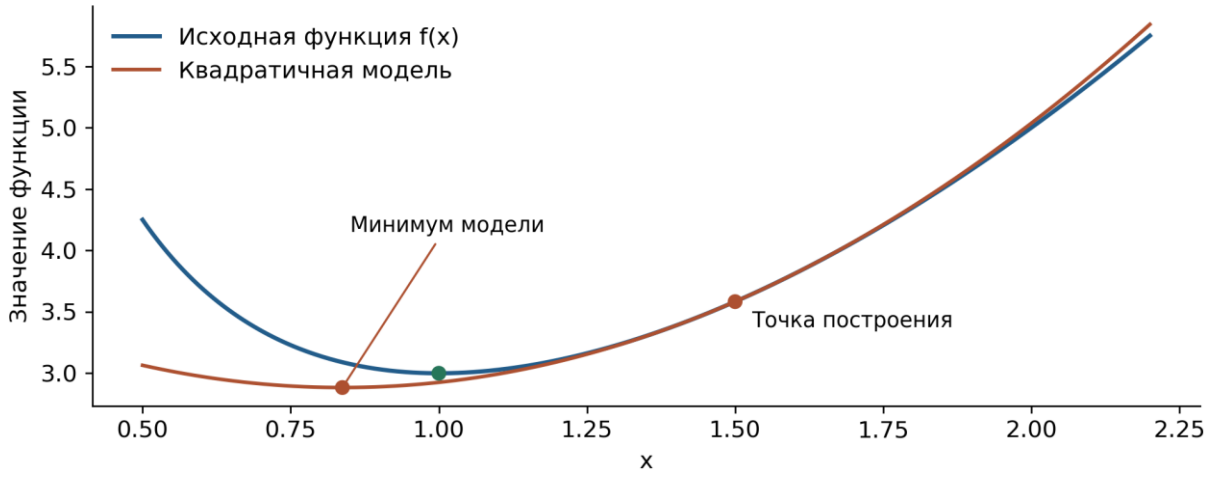


Рисунок 2 — Минимум локальной модели задаёт шаг Ньютона

Локальная модель совпадает с исходной функцией по значению, первой и второй производным в точке построения. Вдали от этой точки совпадение не гарантируется. Поэтому минимум модели может лежать вне допустимой области или не обеспечивать уменьшения исходной функции.

При положительной второй производной направление Ньютона является направлением спуска, поскольку

$$f'(x_k)d_k = -\frac{[f'(x_k)]^2}{f''(x_k)} < 0$$

для нестационарной точки. Это гарантирует уменьшение функции при **достаточно малом положительном** множителе шага. Из этого не следует, что полный шаг с множителем 1 всегда допустим или уменьшает функцию.

Квадратичная функция. Для $f(x) = A(x-r)^2 + C$, где $A > 0$, имеем $f'(x) = 2A(x-r)$ и $f''(x) = 2A$. Тогда

$$x_{k+1} = x_k - \frac{2A(x_k - r)}{2A} = r.$$

В точной арифметике минимум находится за один шаг из любой начальной точки. Если задача задана на отрезке, точка r должна принадлежать этому отрезку; иначе применяется проверка границ.

5 Алгоритм полного шага

Перед расчётом нужно задать отрезок, начальное приближение $x_0 \in [a; b]$, допуск, ограничение числа итераций и формулы производных. Для оценки ошибки в представленной реализации также задаётся обоснованная нижняя граница кривизны μ.

1. Проверьте область определения функции на всём отрезке, непрерывность производных и условие $f'' \geq \mu > 0$.
2. Вычислите $f'(a)$ и $f'(b)$. Если минимум находится на границе, завершите расчёт.
3. В текущей точке вычислите $f'(x_k)$ и $f''(x_k)$. Проверьте допустимость кривизны и критерий остановки.

4. Найдите $d_k = -f'(x_k)/f''(x_k)$ и пробную точку $x_k + d_k$.
5. Если точка недопустима, полный шаг выполнить нельзя. Зафиксируйте отказ или используйте вариант с дроблением шага.
6. Если точка допустима, примите её и переходите к следующей итерации. При исчерпании лимита верните текущий результат с сообщением о незавершённом поиске.

Положительность f'' только в посещённых точках не доказывает выпуклость между ними. Теоретическое условие проверяется аналитически до запуска. Программа может выявить отдельное противоречие, но не заменить доказательство.

Начальную точку полезно выбирать по предварительному графическому исследованию или после сокращения области поиска одним из методов предыдущих лекций. Близость к минимуму важна для быстрого локального режима Ньютона, однако сама по себе не заменяет проверку производных и области определения.

6 Квадратичная сходимость

Пусть x^* — внутренний минимум, $f'(x^*) = 0$, и в некоторой его окрестности выполнены условия

$$f \in C^3, \qquad f''(x) \geq \mu > 0, \qquad |f'''(x)| \leq M.$$

Пусть также начальное приближение достаточно близко к x^*, чтобы последующие точки оставались в этой окрестности. Обозначим ошибку $e_k = x_k - x^*$. Применим формулу Тейлора к первой производной:

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

где ξ_k лежит между x_k и x^*. Разделим равенство на $f''(x_k)$ и воспользуемся формулой Ньютона:

$$e_{k+1} = \frac{f'''(\xi_k)}{2f''(x_k)}e_k^2.$$

Следовательно,

$$|e_{k+1}| \leq \frac{M}{2\mu}|e_k|^2.$$

Это оценка квадратичной сходимости. При малой ошибке её следующая величина пропорциональна квадрату предыдущей. Поэтому в установившемся локальном режиме число верных цифр часто приблизительно удваивается, пока не начинает влиять машинное округление.

Слова «достаточно близко» имеют математический смысл. Если в окрестности радиуса r верны указанные оценки и $(M/(2\mu))r < 1$, то старт внутри этой окрестности обеспечивает уменьшение ошибки по приведённому неравенству. Отдельно требуется, чтобы вся окрестность лежала в области определения.

Почему скорость не всегда квадратичная. Возьмём $f(x) = x^4$. При $x_k \neq 0$ формула даёт

$$x_{k+1} = x_k - \frac{4x_k^3}{12x_k^2} = \frac{2}{3}x_k.$$

Ошибки уменьшаются только с постоянным множителем $2/3$, то есть линейно. В минимуме $f''(0) = 0$, и условие невырожденности не выполнено. В самой точке $x = 0$ нельзя вычислять отношение $0/0$; стационарность нужно обработать отдельно. Этот пример находится вне предположений приложенной программы с $\mu > 0$.

7 Как обосновать точность результата

Для внутреннего минимума и любого текущего $x \in [a; b]$ теорема Лагранжа даёт

$$f'(x) - f'(x^*) = f''(\xi)(x - x^*).$$

Если на всём отрезке $f'' \geq \mu > 0$, то

$$|x - x^*| \leq \frac{|f'(x)|}{\mu}.$$

Поэтому для заданного допуска по координате ε_x можно использовать критерий

$$\frac{|f'(x_k)|}{\mu} \leq \varepsilon_x.$$

Здесь μ — доказанная нижняя оценка второй производной на всём рассматриваемом отрезке. Подстановка вместо неё произвольного значения $f''(x_k)$ не даёт такой же гарантии. В частности, модуль поправки Ньютона $|f'(x_k)/f''(x_k)|$ не является универсальной верхней оценкой ошибки координаты.

Сильная выпуклость также даёт оценку ошибки значения функции:

$$0 \leq f(x) - f(x^*) \leq \frac{[f'(x)]^2}{2\mu}.$$

Для её вывода используем неравенство

$$f(x^*) \geq f(x) + f'(x)(x^* - x) + \frac{\mu}{2}(x^* - x)^2.$$

Минимум правой части по величине $x^* - x$ равен $f(x) - [f'(x)]^2/(2\mu)$. Перенос членов даёт требуемый результат.

Ограничения простых признаков. Малые $|x_{k+1} - x_k|$ и $|f(x_{k+1}) - f(x_k)|$ полезны для диагностики, но по отдельности не гарантируют достижения допуска. Шаг может стать малым из-за сильного дробления, а изменение функции — из-за округления или малой кривизны. Если μ неизвестна, малую невязку производной следует сообщать именно как малую невязку, не приписывая ей неподтверждённый допуск по координате.

Численные оценки в программе опираются на вычисленные производные. Это не интервальный сертификат с учётом всех ошибок округления; в учебных задачах точность дополнительно проверяется по известному аналитическому решению.

8 Подробный пример полного шага

Рассмотрим знакомую по предыдущим лекциям функцию

$$f(x) = x^2 + \frac{2}{x}, \qquad x \in [0{,}5; 3], \qquad x_0 = 1{,}5.$$

Её производные равны

$$f'(x) = 2x - \frac{2}{x^2}, \qquad f''(x) = 2 + \frac{4}{x^3}, \qquad f'''(x) = -\frac{12}{x^4}.$$

На положительной полуоси вторая производная положительна. На заданном отрезке она убывает, поэтому можно взять

$$\mu = f''(3) = 2 + \frac{4}{27} = \frac{58}{27}.$$

Имеем $f'(0{,}5) = -7 < 0$, $f'(3) = 52/9 > 0$. Минимум внутренний и единственный: $x^* = 1$, $f(x^*) = 3$. Зададим $\varepsilon_x = 10^{-6}$.

Упрощение итерации. Подстановка производных позволяет записать

$$x_{k+1} = x_k - \frac{2x_k - 2/x_k^2}{2 + 4/x_k^3} = \frac{3x_k}{x_k^3 + 2}.$$

Для выполнения алгоритма можно использовать исходные производные; упрощённая формула удобна для ручной проверки. Следует помнить, что исходная функция не определена при $x = 0$, даже если преобразованное выражение можно там формально вычислить.

Первая итерация. При $x_0 = 1{,}5$ получаем

$$f'(x_0) = \frac{19}{9}, \qquad f''(x_0) = \frac{86}{27}, \qquad d_0 = -\frac{57}{86}.$$

Тогда

$$x_1 = \frac{3}{2} - \frac{57}{86} = \frac{36}{43} \approx 0{,}837209302.$$

Значение функции уменьшилось с 3,583333333 до 3,089808305, хотя приближение переместилось на другую сторону минимума.

Вторая итерация. В точке x_1 имеем $f'(x_1) \approx -1{,}178976457$ и $f''(x_1) \approx 8{,}816443759$. Поправка положительна:

$$d_1 \approx 0{,}133724718, \qquad x_2 \approx 0{,}970934021.$$

Дальнейшие приближения приведены в таблице. Последняя строка соответствует проверке остановки; из неё новый шаг уже не выполняется. Округление используется только для представления чисел.

k	x_k	$f'(x_k)$	$f''(x_k)$	$\lvert f'(x_k)\rvert/\mu$
0	1,5	2,111111111	3,185185185	0,982758621
1	0,837209302	-1,178976457	8,816443759	0,548833868
2	0,970934021	-0,179668706	6,370094573	0,08363888
3	0,99913905	-0,005170152	6,010349214	0,002406795
4	0,999999258	$-4{,}450 \cdot 10^{-6}$	6,0000089	$2{,}072 \cdot 10^{-6}$
5	0,99999999999945	$-3{,}300 \cdot 10^{-12}$	6	$1{,}536 \cdot 10^{-12}$

После пяти принятых шагов получено $x_5 \approx 0{,}99999999999945$. Расчётная оценка ошибки

$$\frac{|f'(x_5)|}{\mu} \approx 1{,}54 \cdot 10^{-12} < 10^{-6}.$$

Фактическая ошибка относительно $x^* = 1$ равна приблизительно $5{,}50 \cdot 10^{-13}$. На предыдущем приближении x_4 оценка была около $2{,}07 \cdot 10^{-6}$, поэтому по выбранному критерию требовался ещё один шаг. При этом фактическая ошибка x_4 уже была меньше 10^{-6}: гарантированная оценка может быть консервативной.

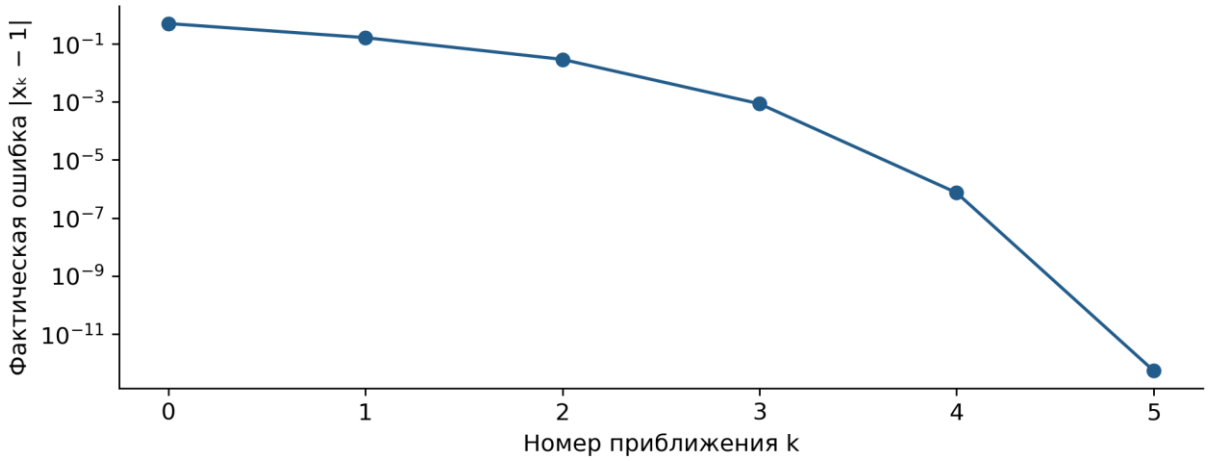


Рисунок 3 — Ускоренное уменьшение ошибки в локальном режиме Ньютона

Для этого примера точное преобразование даёт

$$e_{k+1} = -\frac{x_k + 2}{x_k^3 + 2} e_k^2.$$

При $x_k \to 1$ множитель по модулю стремится к 1. Это объясняет наблюдаемое квадратичное уменьшение ошибки. В реализации выполнено 6 вызовов функции, 8 вызовов первой производной и 6 вызовов второй; два вызова первой производной относятся к предварительной проверке границ.

9 Что может пойти не так

Выход из области определения. Пусть

$$f(x) = x - \ln x, \qquad x > 0.$$

Производные $f'(x) = 1 - 1/x$ и $f''(x) = 1/x^2$ дают итерацию

$$x_{k+1} = 2x_k - x_k^2.$$

Если начать с $x_0 = 3$, то $x_1 = -3$, а логарифм в этой точке не определён. Функция строго выпукла, однако полный шаг Ньютона оказался недопустимым. Следовательно, выпуклость сама по себе не оправдывает безусловное принятие полного шага из любой начальной точки.

Поиск максимума вместо минимума. Для $f(x) = -x^2$ формула Ньютона из любой ненулевой точки приводит к нулю. Но $f''(0) = -2 < 0$, и ноль является максимумом. Успешное решение уравнения $f' = 0$ ещё не означает решение задачи минимизации.

Нулевая или малая кривизна. При $f''(x_k) = 0$ формула деления не определена. При очень малой ненулевой второй производной поправка может стать чрезмерной. Если одновременно производная мала, ситуация требует анализа масштаба, а не автоматического объявления минимума.

Неточные производные. Разностное приближение второй производной

$$f''(x) \approx \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2}$$

содержит ошибки усечения и округления. Слишком малый h усиливает влияние вычитания близких чисел. В заданиях этой лекции используются аналитические производные, чтобы отделить свойства метода от ошибок их численного вычисления.

10 Метод Ньютона с дроблением шага

Сохраним направление $d_k = -f'(x_k)/f''(x_k)$, но введём множитель $\alpha_k \in (0; 1]$:

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k.$$

Начинаем с $\alpha_k = 1$. Если пробная точка выходит из допустимого отрезка или не обеспечивает достаточного уменьшения функции, делим α_k пополам и повторяем проверку.

Для контроля убывания используем условие Армихо:

$$f(x_k + \alpha_k d_k) \le f(x_k) + c_1 \alpha_k f'(x_k) d_k,$$

где в программе $c_1 = 10^{-4}$. Поскольку $f'(x_k)d_k < 0$, правая часть немного меньше текущего значения функции. Условие требует не просто допустимости, а определённого уменьшения вдоль выбранного направления.

Для дифференцируемой функции и направления спуска условие выполняется при достаточно малом положительном α, если такие точки остаются в допустимой области. В задаче с внутренним минимумом и положительной кривизной направление на границах рассматриваемого отрезка направлено внутрь.

Схема выбора шага: сформировать направление; положить $\alpha = 1$; проверить допустимость точки; при допустимости вычислить её значение и проверить Армихо; при неудаче заменить α на $\alpha/2$. Только принятая точка становится новым приближением.

В достаточно малой окрестности невырожденного минимума при обычных условиях гладкости полный шаг принимается условием Армихо с $c_1 < 1/2$. Тогда алгоритм переходит к локальному квадратичному режиму. Вдали от минимума число делений и скорость продвижения зависят от функции и начальной точки.

Дробление не исправляет произвольную невыпуклую постановку автоматически. Если вторая производная неположительна, направление Ньютона может не быть направлением спуска. В данной учебной реализации такое противоречие с условием $f'' \ge \mu > 0$ приводит к остановке; переход к другим направлениям рассматривается в последующих темах методов спуска.

11 Пример исправления неудачного шага

Вернёмся к $f(x) = x - \ln x$, задав отрезок $[0{,}25; 4]$, точку $x_0 = 3$ и допуск $\varepsilon_x = 10^{-6}$. На отрезке можно взять $\mu = 1/16$. Точный минимум находится в $x^* = 1$, где $f(x^*) = 1$.

В начальной точке $f'(3) = 2/3$, $f''(3) = 1/9$, поэтому $d_0 = -6$. Последовательно проверяем множители.

Множитель α	**Пробная точка $3 - 6\alpha$**	**Результат**
1	-3	Вне отрезка
$1/2$	0	Вне отрезка и области логарифма
$1/4$	1,5	Допустима и удовлетворяет Армихо

В последнем случае

$$f(1{,}5) \approx 1{,}094534892,$$

а правая часть условия Армихо равна

$$f(3) + 10^{-4} \cdot \frac{1}{4} \cdot \frac{2}{3} \cdot (-6) \approx 1{,}901287711.$$

Условие выполнено; принимаем $x_1 = 1{,}5$. Недопустимые значения функции в отрицательной точке и в нуле вообще не вычисляются.

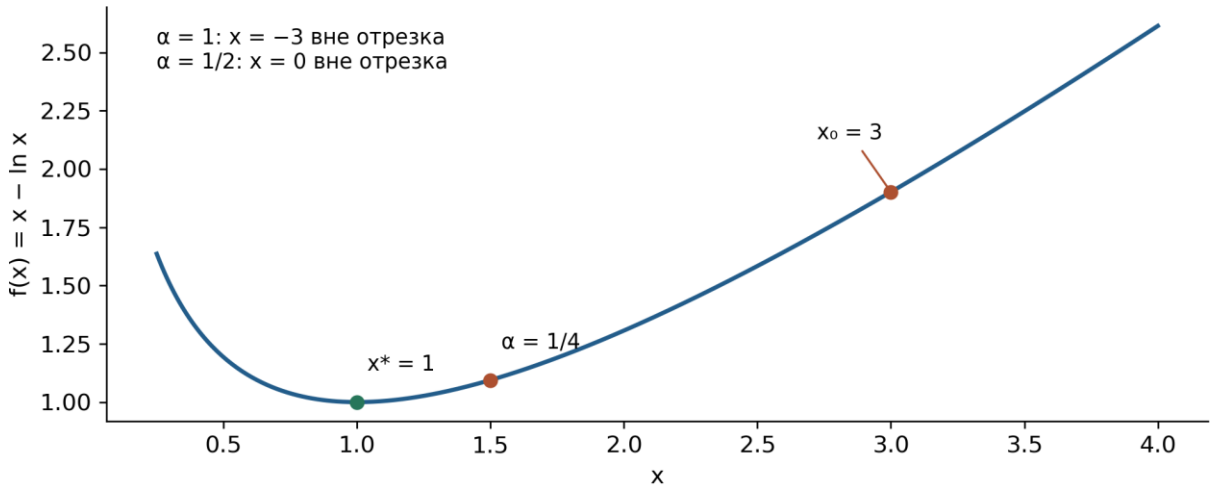


Рисунок 4 — Дробление возвращает пробную точку в допустимую область

После первого принятого шага в этом примере все последующие шаги имеют $\alpha = 1$. Они дают последовательность, показанную в таблице.

k	α_k	x_{k+1}	$f(x_{k+1})$	**Оценка ошибки**
0	0,25	1,500000000000	1,094534892	5,333333333
1	1	0,750000000000	1,037682072	5,333333333
2	1	0,937500000000	1,002038521	1,066666667
3	1	0,996093750000	1,000007649	0,062745098
4	1	0,999984741211	1	0,000244144
5	1	0,999999999767	1	$3{,}725 \cdot 10^{-9}$

Результат после шести принятых шагов: $x \approx 0{,}999999999767169$. Оценка $|f'(x)|/\mu \approx 3{,}73 \cdot 10^{-9}$ меньше заданного допуска. Суммарно выполнено два деления множителя шага; оба относятся к начальной итерации.

Полный метод из той же начальной точки прекращается со статусом выхода из отрезка. Это ожидаемый исход учебного эксперимента, а не ошибка программы. Вариант с дроблением показывает, как дополнительная проверка позволяет продолжить поиск.

12 Программная реализация

В архиве находятся newton_1d.py, run_examples.py, variants.json и инструкция README.txt. Для запуска требуется Python 3.10 или новее; дополнительные пакеты не нужны. Функция newton_minimize выполняет полный шаг при damped=False и дробление по Армихо при damped=True.

12.1 Основные фрагменты алгоритма

Вычисление направления и проверка точности имеют следующий смысл:

```
curvature = ddf(x)
if curvature < mu:
    # Предположение о кривизне нарушено.
    stop()
error_bound = abs(df(x)) / mu
if error_bound <= eps_x:
    return x

direction = -df(x) / curvature
```

Это поясняющий псевдокод с синтаксисом Python: stop() обозначает завершение с диагностикой. Полная программа из архива сохраняет уже вычисленные значения производных, использует отдельные статусы и учитывает машинное округление при проверке кривизны.

Идею дробления шага показывает следующий фрагмент. Переменные fx, gradient и direction должны быть вычислены до начала цикла.

```
alpha = 1.0
for attempt in range(max_backtrack + 1):
    candidate = x + alpha * direction
    if a <= candidate <= b:
        value = f(candidate)
        rhs = fx + 1e-4 * alpha * gradient * direction
        if value <= rhs:
            break
    alpha *= 0.5
else:
    raise RuntimeError("Допустимый шаг не найден")
```

Ограничение числа делений предотвращает бесконечный цикл. В полной реализации также проверяются конечность чисел и различимость новой точки от старой; при отказе сохраняется последняя принятая точка.

12.2 Запуск примеров

После распаковки архива откройте терминал в его папке. Основной пример запускается командой

```
python run_examples.py
```

Чтобы сравнить полный и дробный шаг на функции с логарифмом, выполните

```
python run_examples.py --failure
```

Для варианта 7 с двумя допусками используйте

```
python run_examples.py --variant 7 --eps 0.0001
python run_examples.py --variant 7 --eps 0.000001
```

В Windows вместо python можно использовать py. Программа выполняет обе версии метода, выводит результат и сохраняет истории принятых шагов в CSV. Файл JSON содержит итоговые параметры и таблицы. Повторный запуск с теми же аргументами перезаписывает результаты этого запуска.

12.3 Чтение результатов и счётчиков

Поле error_bound содержит оценку $|f'(x)|/\mu$ для внутреннего минимума. Статус converged означает достижение заданного допуска по этой оценке. Для граничного минимума возвращается boundary_minimum и нулевая ошибка координаты относительно решения ограниченной задачи, при выполнении предположений выпуклости.

Статус outside_interval означает, что полный шаг вышел за допустимые границы. curvature_assumption_failed сообщает о противоречии с заданной оценкой кривизны; в таком случае оценка ошибки не возвращается. Остальные статусы обозначают исчерпание числа итераций, неудачу дробления или невозможность представить отличающуюся новую точку с текущей точностью.

Счётчики n_f, n_df, n_ddf учитывают фактические вызовы функции и её производных. Вызовы производной на границах включены в n_df. Отброшенные допустимые пробные точки увеличивают n_f; точки вне отрезка не приводят к вычислению функции. Поле backtracks показывает число делений множителя на 2, а iterations — число принятых шагов.

Сравнение с методами нулевого порядка следует проводить по совокупным затратам. Одна итерация Ньютона может быть дороже одного шага золотого сечения. Если производные дороги или ненадёжны, меньшее количество итераций не обязательно означает меньшее время решения.

13 Самостоятельная работа

Используйте 18 вариантов из следующей таблицы. Семейства функций сохраняют связь с предыдущими лекциями, но теперь требуется аналитически вычислить производные, обосновать нижнюю оценку кривизны и исследовать выбор шага.

Семейство A:

$$f(x) = (x - s)^2 + \frac{2p^3}{x - s} + c, \qquad x \in [s + p/2; s + 3p].$$

Примите $x_0 = s + 2p$ и $\mu = 58/27$.

Семейство B:

$$f(x) = (x - s) - p\ln(x - s) + c, \qquad x \in [s + p/4; s + 4p].$$

Примите $x_0 = s + 3p$ и $\mu = 1/(16p)$.

Семейство C:

$$f(x) = e^{x-s} - p(x - s) + c, \qquad x \in [s - 2; s + 2].$$

Примите $x_0 = s + 1{,}5$ и $\mu = e^{-2}$.

№	Семейство	s	p	c
1	A	-2	0,5	0
2	A	-1	0,8	1
3	A	0	1,2	-1
4	A	1	1,5	2
5	A	2	2	-2
6	A	3	2,5	3
7	B	-2	0,5	0
8	B	-1	0,8	1
9	B	0	1,2	-1
10	B	1	1,5	2
11	B	2	2	-2
12	B	3	2,5	3
13	C	-2	0,5	0
14	C	-1	0,8	1
15	C	0	1,2	-1
16	C	1	1,5	2
17	C	2	2	-2
18	C	3	2,5	3

Порядок выполнения.

1. Запишите функцию, её область определения, отрезок и начальную точку. Найдите первую и вторую производные.
2. Докажите условие $f'' \geq \mu > 0$ на всём отрезке и проверьте знаки производных на его концах. Определите точное решение для последующей самопроверки.
3. Выведите упрощённую итерационную формулу полного шага, используя замену $t = x - s$.
4. Выполните вручную первые два шага. Если полный шаг выходит из отрезка, покажите пробные точки при $\alpha = 1{,}1/2{,}1/4$ и проверку Армихо для первого принятого шага.
5. Запустите обе версии при $\varepsilon_x = 10^{-4}$ и 10^{-6}. Зафиксируйте статус, точку, фактическую ошибку, оценку ошибки и все три счётчика вычислений.
6. Для принятого дробного шага проверьте допустимость и условие Армихо. Объясните, почему для семейства B отказ полного шага из заданной точки ожидаем.
7. По последним приближениям исследуйте отношение $|e_{k+1}|/|e_k|^2$. Используйте только ненулевые ошибки, ещё не определяемые округлением.

8. Сопоставьте результат с методом золотого сечения из лекции 8 при одинаковом допуске по координате. Отдельно учтите затраты на производные.

Содержание отчёта: постановка; производные; обоснование μ; ручные вычисления; таблица программных результатов; объяснение статусов; вывод о выборе шага и точности. При ожидаемом отказе полного шага не следует скрывать его или подменять начальную точку без описания изменения.

13.1 Формулы для самопроверки

При $t = x - s$ производные и шаги можно записать компактно.

Для семейства A:

$$f'(x) = 2t - \frac{2p^3}{t^2}, \qquad f''(x) = 2 + \frac{4p^3}{t^3},$$

$$t_{k+1} = \frac{3p^3 t_k}{t_k^3 + 2p^3}, \qquad x^* = s + p, \qquad f(x^*) = 3p^2 + c.$$

Минимальная кривизна на заданном отрезке достигается при $t = 3p$ и равна $58/27$.

Для семейства B:

$$f'(x) = 1 - \frac{p}{t}, \qquad f''(x) = \frac{p}{t^2}, \qquad t_{k+1} = 2t_k - \frac{t_k^2}{p}.$$

Имеем $x^* = s + p$ и $f(x^*) = p - p\ln p + c$. При заданном $t_0 = 3p$ полный шаг даёт $t_1 = -3p$, что недопустимо. Дробление до $\alpha = 1/4$ даёт $t_1 = 1{,}5p$. Нижняя граница второй производной равна $p/(4p)^2 = 1/(16p)$.

Для семейства C:

$$f'(x) = e^t - p, \qquad f''(x) = e^t, \qquad t_{k+1} = t_k - 1 + pe^{-t_k}.$$

Точный минимум $x^* = s + \ln p$, его значение $p - p\ln p + c$. На $t \in [-2; 2]$ вторая производная не меньше e^{-2}. Все параметры таблицы удовлетворяют $-2 < \ln p < 2$, поэтому минимум внутренний.

14 Контрольные вопросы и задачи

1. К какой функции строится касательная при минимизации методом Ньютона?
2. Чем отличаются формулы $x - f/f'$ и $x - f'/f''$?
3. Почему необходимо проверять характер найденной стационарной точки?
4. Как определяется минимум выпуклой функции на границе отрезка?
5. Как вывести направление Ньютона из квадратичной модели?
6. Почему положительная кривизна обеспечивает направление спуска, но не всегда успешный полный шаг?
7. Какие предположения использованы в доказательстве квадратичной сходимости?
8. Почему на функции x^4 стандартная итерация имеет линейную скорость?
9. Как связаны невязка производной и ошибка координаты при известной μ?
10. Чем дробление шага отличается от изменения самого направления?
11. Какие вычисления учитываются при сравнении Ньютона и золотого сечения?

12. Почему совпадение значения функции с точным минимумом в печатном выводе не доказывает точность координаты?

Задача 1. Для $f(x) = 3(x-2)^2 + 5$ выполните шаг Ньютона из $x_0 = 5$. Найдите минимум и его значение.

Ответ: $f'(5) = 18$, $f''(5) = 6$, поэтому $x_1 = 5 - 18/6 = 2$, $f(x_1) = 5$. Результат точный в математической модели.

Задача 2. Известно, что на рассматриваемом отрезке $f'' \geq 0{,}5$, а в текущей точке $|f'| = 2 \cdot 10^{-5}$. Достигнут ли допуск $\varepsilon_x = 10^{-5}$ по оценке невязки?

Ответ: оценка равна $4 \cdot 10^{-5}$, поэтому данный критерий ещё не выполнен. Это не доказывает, что фактическая ошибка обязательно больше допуска; имеющейся оценки недостаточно.

Задача 3. Для $f(x) = x - \ln x$ запишите полный шаг из $x_0 = 2$. Можно ли принять полученную точку?

Ответ: формула даёт $x_1 = 0$, где исходная функция не определена. Полный шаг недопустим. При $\alpha = 1/2$ получается $x_1 = 1$ — точный минимум; достаточное уменьшение нужно проверить для выбранных параметров поиска.

15 Литература

[1] Пантелеев А. В., Летова Т. А. Методы оптимизации в примерах и задачах: учебное пособие. 4-е изд., испр. СПб.: Лань, 2015. 512 с. § 7.1 «Метод Ньютона», с. 196–200.

[2] Рабочая программа дисциплины «Методы оптимизации», 2024. Образовательная программа 6B06103 «Математическое и компьютерное моделирование». Тема 9: метод касательных.