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

Дисциплина «Методы оптимизации»

ЛЕКЦИЯ 15

Метод покоординатного спуска и метод Ньютона

Образовательная программа 6B06103 Математическое и компьютерное моделирование

Объём: 2 академических часа. **Место в рабочей программе:** лекция 15 «Методы многомерной оптимизации. Метод покоординатного спуска. Метод Ньютона» [2].

Цель: освоить последовательную минимизацию по координатам и минимизацию квадратичной модели функции; научиться выполнять итерации, проверять условия применимости и оценивать вычислительные затраты.

План занятия: покоординатные обновления и полный цикл; квадратичная задача и метод Гаусса — Зейделя; влияние выбора осей; направление Ньютона; локальная сходимость; дробление шага и модификация Гессиана; ручные примеры, программа и задания.

Результаты обучения: студент различает последовательное и одновременное обновление координат, выводит формулы обоих методов, решает систему для направления Ньютона, обнаруживает седловую точку и расходимость полного шага, сопоставляет результаты по точности и затратам.

Лекции 13–14 рассматривали движение вдоль антиградиента. В этой лекции изучим два других подхода. Покоординатный метод последовательно решает одномерные задачи вдоль осей. Метод Ньютона использует Гессиан и находит стационарную точку локальной квадратичной модели. Ни название метода, ни малое изменение соседних точек не заменяют проверку условий минимума [1, 3].

1 Последовательная минимизация по координатам

Рассмотрим безусловную задачу $\min_{\mathbf{x}\in\mathbb{R}^n} f(\mathbf{x})$. В циклическом покоординатном спуске координаты перебираются в фиксированном порядке $1,2,\dots,n$. Начало цикла обозначим $\mathbf{x}^{k,0}=\mathbf{x}^k$. На подшаге i решается одномерная задача

$$t_i \in \arg\min_{t\in\mathbb{R}} f(\mathbf{x}^{k,i-1}+t\mathbf{e}_i),$$

$$\mathbf{x}^{k,i}=\mathbf{x}^{k,i-1}+t_i\mathbf{e}_i,$$

где $\mathbf{e}_i$ — i-й единичный вектор. После обработки всех координат полагают $\mathbf{x}^{k+1}=\mathbf{x}^{k,n}$.

Здесь t может иметь любой знак: поиск ведётся по всей координатной прямой. Один **координатный подшаг** изменяет только одну компоненту. Один **цикл** содержит n подшагов. Эти единицы работы нужно различать в таблицах и при сравнении с другими алгоритмами.

В двумерной задаче с порядком $1\to 2$ имеем

$$x_1^{k+1}\in\arg\min_{z\in\mathbb{R}} f(z,x_2^k),$$

$$x_2^{k+1}\in\arg\min_{z\in\mathbb{R}} f(x_1^{k+1},z).$$

Во второй строке используется **уже обновлённая первая координата**. Если обе одномерные задачи решать по старому вектору, получится другая, параллельная схема. Для неё нельзя автоматически использовать выводы о последовательном спуске.

При точной одномерной минимизации значения функции не возрастают:

$$f(\mathbf{x}^{k,0}) \geq f(\mathbf{x}^{k,1}) \geq \cdots \geq f(\mathbf{x}^{k,n}).$$

Если текущая точка уже минимизирует функцию по выбранной координате, подшаг может быть нулевым. Это не означает, что минимум достигнут по всем переменным.

Нужны ли производные. Общая покоординатная схема может использовать безградиентный одномерный поиск, поэтому в [1] она рассмотрена среди прямых методов. Для квадратичных функций мы найдём координатный минимум аналитически через производную. Использование производных внутри одномерной задачи не меняет принцип последовательного выбора координат.

2 Формулы для квадратичной функции

Пусть

$$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}\mathbf{x}^{\mathrm{T}} A\mathbf{x} - \mathbf{b}^{\mathrm{T}}\mathbf{x} + c, \qquad A = A^{\mathrm{T}} > 0.$$

Градиент равен $\mathbf{g} = A\mathbf{x} - \mathbf{b}$. Вдоль координатной прямой получаем точное разложение

$$f(\mathbf{x} + t\mathbf{e}_i) = f(\mathbf{x}) + t g_i + \frac{1}{2} a_{ii} t^2.$$

Поскольку $a_{ii} > 0$, минимум достигается при

$$t_i = -\frac{g_i}{a_{ii}}, \qquad x_i^{+} = x_i - \frac{g_i}{a_{ii}}.$$

Остальные координаты на этом подшаге не меняются. Значение g_i вычисляется **в текущем промежуточном векторе**. После обновления новая частная производная по координате i равна нулю, однако последующие обновления других координат могут сделать её ненулевой.

Уменьшение функции вычисляется явно:

$$f(\mathbf{x}) - f(\mathbf{x} + t_i\mathbf{e}_i) = \frac{g_i^2}{2a_{ii}}.$$

Так можно проверить каждый ручной подшаг независимо от пересчёта всей функции. Если $g_i = 0$, уменьшение равно нулю.

Для семейства учебных вариантов положим $u = x_1 - s$, $v = x_2 - t$ и запишем

$$f = au^2 + 2buv + cv^2 + d, \qquad a > 0, \quad ac - b^2 > 0.$$

Порядок $u \to v$ даёт

$$u^{k+1} = -\frac{b}{a} v^k, \qquad v^{k+1} = -\frac{b}{c} u^{k+1}.$$

Во второй формуле подставляется новое u^{k+1}. При обратном порядке сначала вычисляют $v^{k+1} = -(b/c)u^k$, а затем $u^{k+1} = -(b/a)v^{k+1}$. Траектории и начальные уменьшения могут различаться.

Матрица Гессе. Для этой записи функции

$$A = \begin{pmatrix} 2a & 2b \\ 2b & 2c \end{pmatrix}.$$

Множитель 2 должен присутствовать и в градиенте, и в матрице. В координатном отношении он сокращается, но при сравнении с формулой Ньютона или с нормой градиента забывать его нельзя.

3 Ручной пример покоординатного спуска

Продолжим основную задачу лекций 13–14:

$$f(x_1, x_2) = 2(x_1 - 1)^2 + 2(x_1 - 1)(x_2 + 1) + 2(x_2 + 1)^2 + 3.$$

Её минимум находится в $(1; -1)$, $f^* = 3$. В переменных $u = x_1 - 1$, $v = x_2 + 1$ имеем $a = c = 2$, $b = 1$. Начальная точка $(3; 0)$ соответствует $(u^0; v^0) = (2; 1)$, $f_0 = 17$.

3.1 Первый цикл

Подшаг по первой координате. При фиксированном $v = 1$ решаем

$$\frac{\partial f}{\partial u} = 4u + 2 = 0, \qquad u = -\frac{1}{2}.$$

Промежуточная точка равна $(x_1; x_2) = (1/2; 0)$. Значение функции равно $9/2 = 4{,}5$, градиент — $(0; 3)$. Проверка уменьшения: $17 - 4{,}5 = 10^2/(2 \cdot 4) = 12{,}5$.

Подшаг по второй координате. Теперь фиксируем новое $u = -1/2$:

$$\frac{\partial f}{\partial v} = 2\left(-\frac{1}{2}\right) + 4v = 0, \qquad v = \frac{1}{4}.$$

После полного цикла

$$\mathbf{x}^1 = \left(\frac{1}{2}; -\frac{3}{4}\right), \qquad f_1 = \frac{27}{8} = 3{,}375.$$

Градиент равен $\mathbf{g}_1 = (-3/2; 0)$. Вторая частная производная обнулилась, но первая снова стала ненулевой. Именно поэтому требуются следующие циклы.

3.2 Второй цикл

Из $v^1 = 1/4$ получаем $u^2 = -1/8$. Промежуточная точка $(7/8; -3/4)$ имеет значение $f = 99/32 = 3{,}09375$. Затем $v^2 = 1/16$, поэтому

$$\mathbf{x}^2 = \left(\frac{7}{8}; -\frac{15}{16}\right), \qquad f_2 = \frac{387}{128} = 3{,}0234375,$$

$$\mathbf{g}_2 = \left(-\frac{3}{8}; 0\right).$$

Цикл	Координата	x_1	x_2	f
0	—	3	0	17
1	1	0,5	0	4,5
1	2	0,5	-0,75	3,375
2	1	0,875	-0,75	3,09375
2	2	0,875	-0,9375	3,023438

В таблице каждая строка после начальной соответствует одному координатному подшагу. Внешний критерий остановки в программе проверяется после полного цикла. Это позволяет сопоставлять точки после одинакового объёма последовательного обхода переменных.

Изменение порядка. Если начать со второй координаты, то первый подшаг даст $(3; -2)$, второй — $(3/2; -2)$ со значением 4,5. Это отличается от результата 3,375 при порядке $1 \to 2$. Выбор порядка не меняет единственный минимум данной положительно определённой задачи, но меняет ход вычислений.

4 Сходимость и связь с методом Гаусса — Зейделя

Для двумерного семейства из раздела 2 исключим промежуточную первую координату:

$$v^{k+1} = \frac{b^2}{ac} v^k = r v^k, \qquad r = \frac{b^2}{ac}.$$

Из $ac - b^2 > 0$ следует $0 \le r < 1$. При $b \neq 0$ получаем

$$v^k = r^k v^0, \qquad u^k = -\frac{b}{a} r^{k-1} v^0, \quad k \ge 1.$$

Следовательно, обе координаты ошибки стремятся к нулю. После первого полного цикла весь вектор ошибки на каждом следующем цикле умножается на r. Ошибка значения квадратичной функции умножается на r^2:

$$f_{k+1} - f^* = r^2 (f_k - f^*), \qquad k \ge 1.$$

При $b = 0$ переменные разделены и минимум достигается за один полный цикл. При r близком к единице продвижение становится медленным.

В основном примере $r = 1/4$. После $k \geq 1$ циклов

$$u^k = -\frac{1}{2}\left(\frac{1}{4}\right)^{k-1}, \qquad v^k = \left(\frac{1}{4}\right)^k,$$

$$f_k - 3 = \frac{3}{8}\left(\frac{1}{16}\right)^{k-1}, \qquad \| \mathbf{g}_k \|_2 = \frac{3}{2}\left(\frac{1}{4}\right)^{k-1}.$$

Для $\| \mathbf{g}_k \|_2 \leq 10^{-6}$ достаточно 12 циклов, то есть 24 координатных подшага. Не следует сравнивать эти 12 циклов с 12 отдельными координатными изменениями.

4.1 Матричная запись

Условие минимума квадратичной функции имеет вид $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$. Разложим $A = D + L + U$, где D — диагональная часть, L — строго нижняя, U — строго верхняя треугольная часть. Последовательное координатное обновление записывается как

$$a_{ii} x_i^{k+1} = b_i - \sum_{j<i} a_{ij}\, x_j^{k+1} - \sum_{j>i} a_{ij}\, x_j^k.$$

В матричной форме

$$(D + L)\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{b} - U\mathbf{x}^k.$$

Это метод Гаусса — Зейделя для системы $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$. При симметричной положительно определённой матрице он сходится. Формула связывает задачу оптимизации с решением линейной системы. Буква L в этом подразделе обозначает нижнюю треугольную часть, а не максимальное собственное значение из предыдущих лекций.

4.2 Ограничения вывода о минимуме

Убывание значений функции само по себе не доказывает сходимость точек к минимуму. Для рассмотренной квадратичной задачи доказательство опирается на положительную определённость. Для общей нелинейной функции нужны отдельные условия.

Гладкий пример, показывающий опасность невыпуклости:

$$F(x, y) = x^2 + y^2 - 4xy + (x^2 + y^2)^2.$$

В точке $(0; 0)$ каждая координатная задача имеет минимум: $F(x, 0) = x^2 + x^4 \geq 0$ и $F(0, y) = y^2 + y^4 \geq 0$. Покоординатный метод с таким стартом не сдвинется. Но вдоль диагонали

$$F(t, t) = -2t^2 + 4t^4 < 0 \quad \text{при} \quad 0 < |t| < 1/\sqrt{2}.$$

Следовательно, $(0; 0)$ не является локальным минимумом. Гессиан в этой точке имеет собственные значения -2 и 6, то есть точка седловая. Координатный минимум и локальный минимум по всем направлениям — разные понятия.

5 Геометрия координат и скорость метода

Для функции $f = x_1^2 + 25x_2^2$ Гессиан равен $\mathrm{diag}(2,50)$, число обусловленности равно 25. Несмотря на вытянутые линии уровня, переменные разделены и покоординатный метод достигает минимума за один цикл из любой точки.

Рассмотрим теперь функцию

$$\tilde{f}(x_1, x_2) = 13x_1^2 - 24x_1x_2 + 13x_2^2.$$

Её Гессиан равен $\begin{pmatrix} 26 & -24 \\ -24 & 26 \end{pmatrix}$ и имеет те же собственные значения 2 и 50. Но оси координат не совпадают с главными направлениями квадратичной формы. Координатный множитель равен

$$r = \frac{(-12)^2}{13 \cdot 13} = \frac{144}{169} \approx 0{,}852071.$$

При одном и том же числовом старте $(2; 1)$ программа достигает нормы градиента 10^{-6} за один цикл для диагональной задачи и за 96 циклов для повёрнутой. Это сравнение показывает влияние смешанного члена и выбранных осей при одинаковом спектре; начальные ошибки в собственном базисе в этих двух опытах различаются.

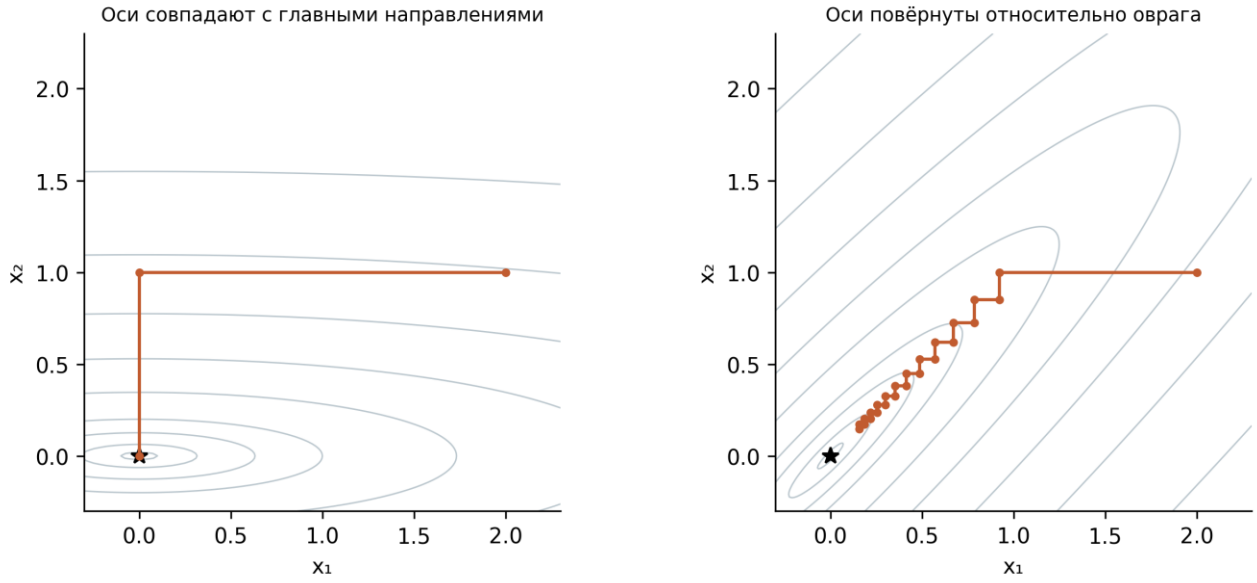


Рисунок 1 — Покоординатные траектории при одинаковых собственных значениях Гессиана

Слева показан полный путь за один цикл. Справа показаны первые 12 циклов, то есть 24 подшага. Масштабы координат одинаковы. Движение вдоль осей может многократно пересекать узкую долину прежде, чем приблизится к минимуму.

Изменение координат и выбор порядка обновления являются частью организации вычислений. При большом числе переменных простота одного координатного подшага может быть важнее числа полных циклов. Поэтому сравнение должно учитывать стоимость одномерных задач и проверок градиента.

6 Квадратичная модель и направление Ньютона

Пусть f дважды непрерывно дифференцируема. В текущей точке обозначим $\mathbf{g}_k = \nabla f(\mathbf{x}^k)$, $H_k = \nabla^2 f(\mathbf{x}^k)$. Квадратичная модель приращения имеет вид

$$m_k(\mathbf{p}) = f_k + \mathbf{g}_k^{\mathsf{T}}\mathbf{p} + \frac{1}{2}\mathbf{p}^{\mathsf{T}} H_k \mathbf{p}.$$

Дифференцируя модель по $\mathbf{p}$, получаем

$$\nabla_{\mathbf{p}} m_k = \mathbf{g}_k + H_k \mathbf{p}.$$

Условие стационарности модели приводит к системе

$$H_k \mathbf{p}_k = -\mathbf{g}_k.$$

Если $H_k > 0$, решение системы является единственным минимумом модели. Полный шаг Ньютона:

$$\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k + \mathbf{p}_k.$$

Формально $\mathbf{p}_k = -H_k^{-1}\mathbf{g}_k$, но в программе **решают линейную систему**, а не строят обратную матрицу. Это позволяет использовать устойчивые численные процедуры и структуру матрицы.

Почему направление является направлением спуска. При положительно определённом Гессиане и ненулевом градиенте

$$\mathbf{g}_k^\top \mathbf{p}_k = -\mathbf{g}_k^\top H_k^{-1} \mathbf{g}_k < 0.$$

Следовательно, достаточно малый положительный шаг вдоль $\mathbf{p}_k$ уменьшает функцию. Но полный шаг длины 1 может оказаться слишком большим: квадратичная модель точно описывает квадратичную функцию, а для общей функции является локальным приближением.

Если Гессиан обратим, но не положительно определён, система всё ещё может иметь единственное решение. В таком случае это стационарная точка модели, которая не обязана быть её минимумом, а полученное направление не обязано быть направлением спуска.

7 Один шаг Ньютона для квадратичной задачи

Для $f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}\mathbf{x}^\top A\mathbf{x} - \mathbf{b}^\top \mathbf{x} + c$ с $A > 0$ имеем $H_k = A$, $\mathbf{g}_k = A\mathbf{x}^k - \mathbf{b}$. Поэтому

$$A\mathbf{p}_k = \mathbf{b} - A\mathbf{x}^k,$$

$$A(\mathbf{x}^k + \mathbf{p}_k) = \mathbf{b}.$$

Значит, в точной арифметике новая точка совпадает с минимумом из любого старта. Если начальная точка уже является минимумом, переход вообще не нужен.

В основной задаче $\mathbf{x}^0 = (3;0)$, $\mathbf{g}_0 = (10;8)$, $H = \begin{pmatrix} 4 & 2 \\ 2 & 4 \end{pmatrix}$. Решаем систему

$$\begin{cases} 4p_1 + 2p_2 = -10, \\ 2p_1 + 4p_2 = -8. \end{cases}$$

Вычитая удвоенное второе уравнение из первого, получаем $-6p_2 = 6$, откуда $p_2 = -1$ и $p_1 = -2$. Следовательно,

$$\mathbf{x}^1 = (3;0) + (-2;-1) = (1;-1), \qquad f_1 = 3, \qquad \mathbf{g}_1 = \mathbf{0}.$$

Проверка направления: $\mathbf{g}_0^\top \mathbf{p}_0 = -28 < 0$. Предсказанное моделью уменьшение

$$m_0(\mathbf{0}) - m_0(\mathbf{p}_0) = -\frac{1}{2}\mathbf{g}_0^\top \mathbf{p}_0 = 14$$

совпадает с фактическим $17 - 3 = 14$.

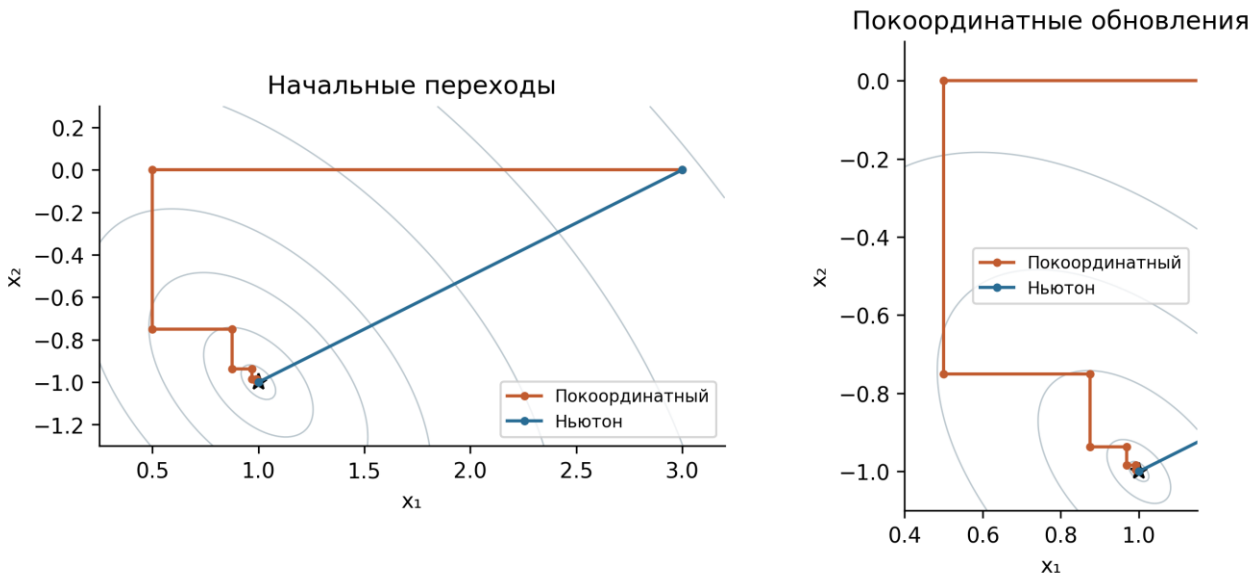


Рисунок 2 — Покоординатный путь и полный шаг Ньютона на основной задаче

На рисунке покоординатный путь состоит из горизонтальных и вертикальных отрезков. Ньютон одновременно изменяет обе координаты, решая связанную систему. Одновременное обновление в методе Ньютона не следует путать с параллельным решением отдельных координатных задач по старым значениям.

Стоимость одного перехода. Результат «за один шаг» не означает отсутствие вычислительных затрат. Для плотной матрицы порядка n прямое решение системы обычно требует порядка n^3 арифметических операций и порядка n^2 памяти. Разреженность, специальная структура и повторное использование разложения постоянного Гессиана могут уменьшить затраты. При изменяющемся Гессиане работу приходится повторять.

8 Локальная сходимость метода Ньютона

Пусть $\mathbf{x}^*$ — точка с $\nabla f(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}$. Предположим, что в некоторой выпуклой окрестности этой точки выполнены условия:

- $H(\mathbf{x}) \succcurlyeq mI$ с постоянной $m > 0$;
- Гессиан липшицев: $\| H(\mathbf{x}) - H(\mathbf{y}) \|_2 \leq M \| \mathbf{x} - \mathbf{y} \|_2$;
- начальная точка достаточно близка, чтобы итерации оставались в этой окрестности.

Тогда для полного шага Ньютона справедлива оценка

$$\| \mathbf{e}_{k+1} \|_2 \leq \frac{M}{2m} \| \mathbf{e}_k \|_2^2, \qquad \mathbf{e}_k = \mathbf{x}^k - \mathbf{x}^*.$$

Вывод. По интегральной формуле для градиента

$$\mathbf{g}_k = \int_0^1 H\left(\mathbf{x}^* + t\mathbf{e}_k\right)\mathbf{e}_k \, dt.$$

Подставив её в $\mathbf{e}_{k+1} = \mathbf{e}_k - H_k^{-1}\mathbf{g}_k$, получаем

$$\mathbf{e}_{k+1} = H_k^{-1} \int_0^1 \left[H_k - H(\mathbf{x}^* + t\mathbf{e}_k)\right] \mathbf{e}_k \, dt.$$

Используем $\| H_k^{-1} \|_2 \le 1/m$ и липшицевость Гессиана:

$$\| H_k - H(\mathbf{x}^* + t\mathbf{e}_k) \|_2 \le M(1-t) \| \mathbf{e}_k \|_2.$$

Интеграл $\int_0^1 (1-t)\, dt = 1/2$ даёт указанную оценку. Квадратичная сходимость означает, что новая ошибка ограничивается постоянной, умноженной на квадрат предыдущей ошибки.

Близость к решению существенна: при большой ошибке правая часть может превышать старую ошибку. Если Гессиан вырожден или решение находится вне рассматриваемой окрестности, эта теорема не применима. Она также не утверждает, что каждая конкретная задача имеет строго второй порядок сходимости: в специальных случаях скорость может быть выше, а квадратичная задача решается за один переход.

Невязка линейной системы. На практике систему решают приближённо. Если $H_k \tilde{\mathbf{p}}_k = -\mathbf{g}_k + \mathbf{r}_k$, то к оценке ошибки добавляется вклад не более $\| H_k^{-1} \|_2 \| \mathbf{r}_k \|_2$. Поэтому точность решения системы должна согласовываться с требуемой точностью внешнего процесса. Плохая обусловленность и округление могут ограничивать наблюдаемую скорость.

9 Нелинейный пример с полным шагом

Возьмём функцию из лекции 14:

$$f(x_1, x_2) = \frac{1}{4}x_1^4 + \frac{1}{2}x_1^2 + 2x_2^2.$$

Её градиент и Гессиан равны

$$\nabla f = \begin{pmatrix} x_1^3 + x_1 \\ 4x_2 \end{pmatrix}, \qquad H = \begin{pmatrix} 3x_1^2 + 1 & 0 \\ 0 & 4 \end{pmatrix}.$$

Гессиан положительно определён во всех точках. Система Ньютона разделяется на две скалярные задачи, и полный переход имеет вид

$$x_1^{k+1} = x_1^k - \frac{(x_1^k)^3 + x_1^k}{3(x_1^k)^2 + 1} = \frac{2(x_1^k)^3}{3(x_1^k)^2 + 1}, \qquad x_2^{k+1} = 0.$$

Из начальной точки $(1; 1)$ первый переход даёт $(1/2; 0)$, второй — $(1/7; 0)$, третий — $(1/182; 0)$. После четвёртого $x_1 \approx 3{,}317237 \cdot 10^{-7}$ и норма градиента меньше 10^{-6}.

Вблизи нуля формула содержит куб: $x_1^{k+1} \approx 2(x_1^k)^3$. В этом симметричном примере сходимость быстрее общей квадратичной оценки; он не должен служить основанием для утверждения о кубической сходимости метода Ньютона во всех задачах.

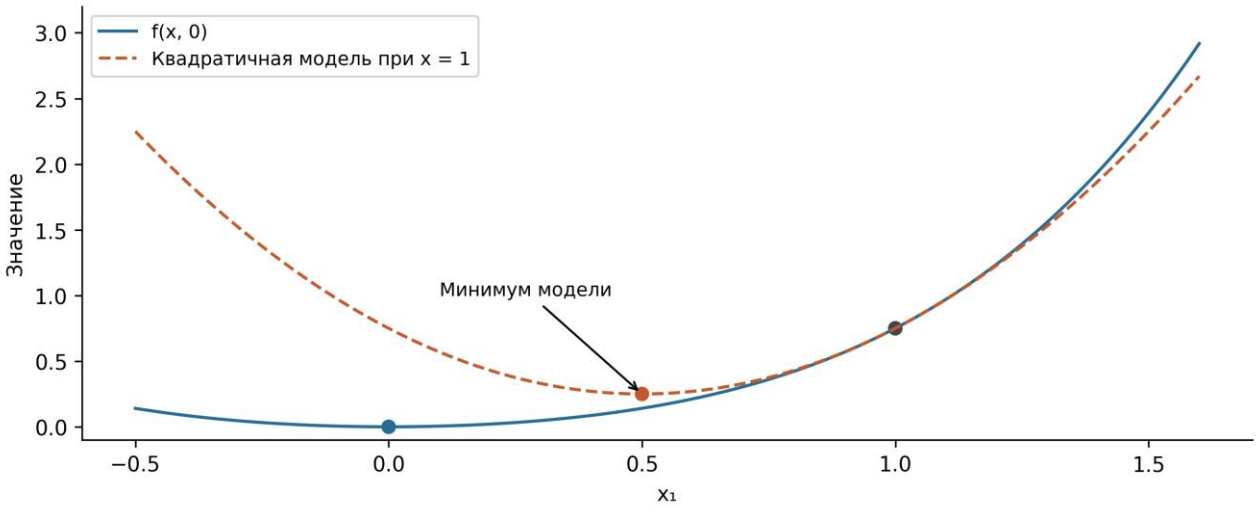


Рисунок 3 — Функция и квадратичная модель на сечении второй координаты равной нулю

Модель построена в точке $(1; 0)$ и имеет минимум по первой координате при $x_1 = 1/2$, тогда как минимум исходной функции находится при $x_1 = 0$. После каждого перехода модель строится заново. На этом рисунке показано отдельное сечение, а не исходная двумерная точка $(1; 1)$.

10 Почему полный шаг может не сработать

Рассмотрим строго выпуклую функцию

$$f(x_1, x_2) = \sqrt{1 + x_1^2} + \frac{1}{2}x_2^2.$$

Её единственный минимум находится в $(0; 0)$, $f^* = 1$. Производные по первой координате равны

$$f_{x_1} = \frac{x_1}{\sqrt{1 + x_1^2}}, \qquad f_{x_1x_1} = \frac{1}{(1 + x_1^2)^{3/2}} > 0.$$

Для полного шага Ньютона

$$p_1 = -x_1(1 + x_1^2), \qquad x_1^+ = -x_1^3.$$

Если $|x_1| > 1$, модуль новой координаты становится больше прежнего. Из $(2; 0)$ получаем по первой координате

$$2 \to -8 \to 512 \to -134217728.$$

Полный шаг расходится, хотя Гессиан положительно определён во всех конечных точках. Причина — слишком дальний переход по локальной модели. Положительная определённость обеспечивает направление спуска, но не гарантирует пригодность полного шага длины 1.

10.1 Дробление шага Ньютона

После решения $H_k\mathbf{p}_k = -\mathbf{g}_k$ принимают

$$\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k + \alpha_k\mathbf{p}_k, \qquad 0 < \alpha_k \le 1.$$

Начинают с $\alpha = 1$ и уменьшают его вдвое, пока не выполнится условие Армихо

$$f(\mathbf{x}^k + \alpha\mathbf{p}_k) \le f_k + \sigma\alpha\mathbf{g}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{p}_k,$$

где в программе $\sigma = 10^{-4}$. При направлении спуска достаточно малый шаг удовлетворяет условию. Положительность Гессиана проверяется **до** дробления: поиск длины шага не исправляет автоматически неверное направление.

В рассматриваемом примере из $(2; 0)$ имеем $p_1 = -10$. Полный шаг даёт $x_1 = -8$, шаг $1/2$ даёт $x_1 = -3$: оба увеличивают функцию. Шаг $1/4$ даёт $x_1 = -1/2$ и принимается. Далее полные шаги дают $1/8$, $-1/512$ и примерно $7{,}450581 \cdot 10^{-9}$.

k	x_1^k	f_k	$\| \mathbf{g}_k \|_2$	**Шаг**
0	2	2,236068	0,8944272	—
1	-0,5	1,118034	0,4472136	0,25
2	0,125	1,007782	0,1240347	1
3	-0,001953125	1,000002	0,001953121	1
4	7,450581e-09	1	7,450581e-09	1

Шаг в строке $k > 0$ относится к переходу из $k - 1$ в k. В таблице значения округлены; близкое к 1 значение функции не заменяет критерий по градиенту.

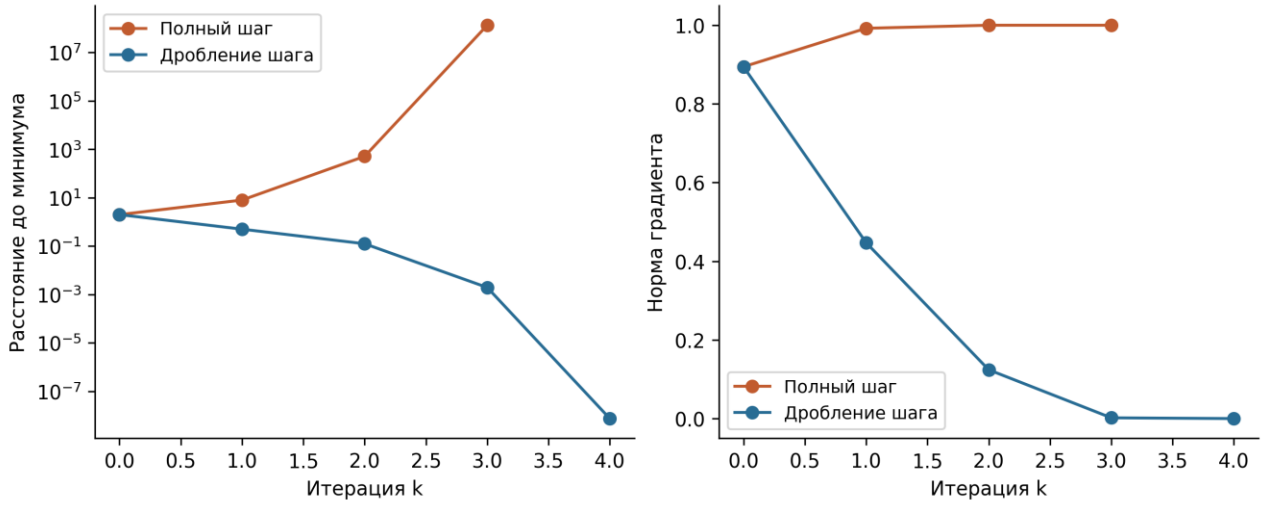


Рисунок 4 — Полный шаг расходится а дробление приводит к минимуму

Слева использована логарифмическая шкала расстояния. Справа видно, что при расходимости норма градиента не растёт неограниченно: для этой функции она стремится к 1 вдоль оси. Следовательно, контролировать нужно не только изменение функции, но и точку, градиент и итоговый статус.

В программе полный метод Ньютона для этого примера намеренно ограничен тремя переходами, чтобы показать расходимость без дальнейшего переполнения. Этот лимит не является условием сходимости.

11 Неопределённый Гессиан и модификация метода

Ещё один риск связан с тем, что метод Ньютона решает уравнение $\nabla f = 0$, а его корнем может быть седловая точка. Рассмотрим

$$f(x_1, x_2) = \frac{1}{4}x_1^4 - \frac{1}{2}x_1^2 + \frac{1}{2}x_2^2.$$

Минимумы находятся в $(1; 0)$ и $(-1; 0)$, их значение равно $-1/4$. Точка $(0; 0)$ седловая:

$$H(0,0) = \operatorname{diag}(-1,1).$$

Из $\mathbf{x}^0 = (1/4; 1)$ имеем $\mathbf{g}_0 = (-15/64; 1)$ и $H_0 = \operatorname{diag}(-13/16,1)$. Обычный Ньютон даёт $p_1 = -15/52$, $p_2 = -1$, поэтому

$$\mathbf{x}^1 = \left(-\frac{1}{26}; 0\right).$$

Далее первая координата приближается к нулю. Критерий по градиенту выполняется около седловой точки, а не около минимума. Проверка спектра Гессиана отличает этот результат от найденного минимума.

11.1 Сдвиг Гессиана

Один из учебных способов обеспечить положительность модели — заменить Гессиан на

$$B_k = H_k + \mu_k I, \qquad \mu_k = \max\{0, \delta - \lambda_{\min}(H_k)\}, \qquad \delta > 0.$$

Тогда все собственные значения B_k не меньше δ. Решают систему

$$B_k \mathbf{p}_k = -\mathbf{g}_k$$

и выбирают шаг дроблением по Армихо. При ненулевом градиенте $\mathbf{g}_k^{\mathsf{T}}\mathbf{p}_k < 0$, поэтому малый шаг уменьшает исходную функцию. Сдвиг меняет только матрицу локальной модели; значения исходной целевой функции при проверке не изменяются.

В программе по умолчанию $\delta = 1$. Для начальной точки предыдущего примера $\mu_0 = 29/16 = 1{,}8125$ и

$$B_0 = \operatorname{diag}\left(1, \frac{45}{16}\right), \qquad \mathbf{p}_0 = \left(\frac{15}{64}; -\frac{16}{45}\right).$$

Полный шаг принимается, получаем $(31/64; 29/45) \approx (0{,}484375; 0{,}644444)$. Модифицированный метод далее приближается к минимуму $(1; 0)$.

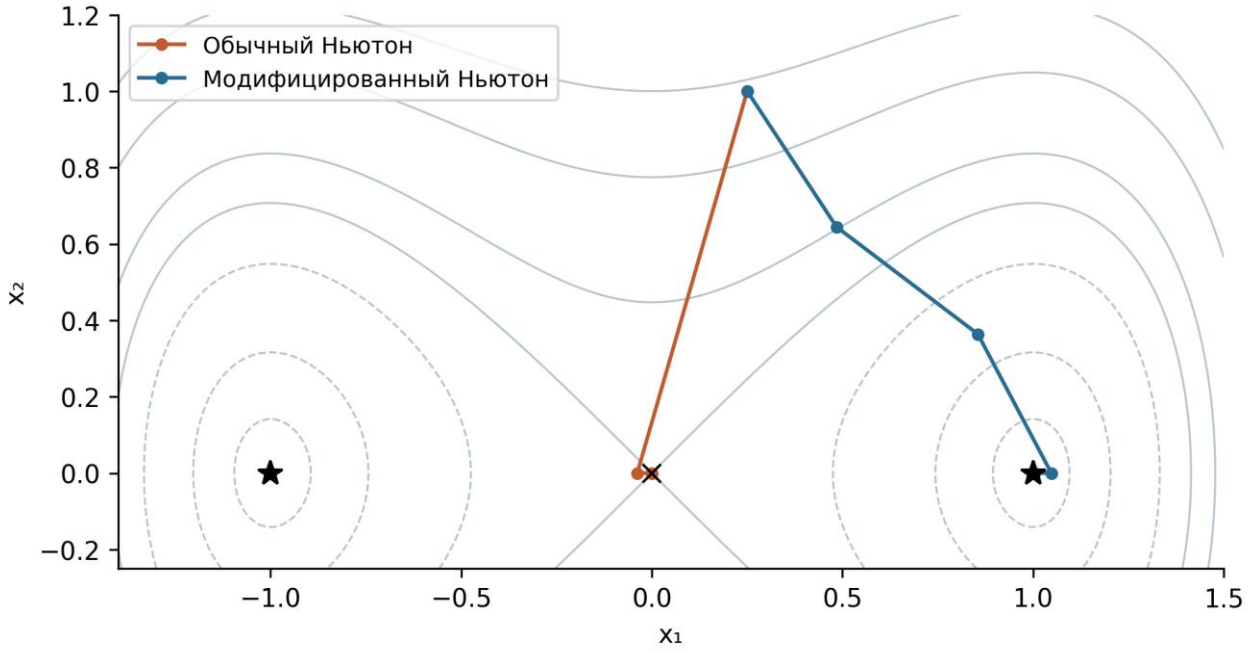


Рисунок 5 — Обычный Ньютон приходит к седлу а модифицированный к минимуму

Звёздочки отмечают два минимума, крестик — седловую точку. Приведённый результат относится к указанному старту. Модификация направления и дробление шага не дают универсальной гарантии нахождения глобального минимума невыпуклой функции.

Выбор параметра. Значение $\delta = 1$ выбрано для масштаба учебных примеров. Оно не является универсальным. Большой сдвиг делает направление ближе к градиентному и может замедлить сходимость. Если около решения $\lambda_{\min}(H_k) \geq \delta$, сдвиг становится нулевым. Для восстановления локального поведения обычного Ньютона также требуется принятие полных шагов. Если сдвиг остаётся положительным, прежнюю квадратичную оценку автоматически переносить нельзя.

Для больших задач точное вычисление минимального собственного значения само по себе затратно. Используют и другие способы построения положительно определённой модели. Здесь спектральный сдвиг удобен благодаря размерности 2 и прозрачности вычислений.

12 Порядок вычислений и сравнение затрат

Покоординатный метод. В начале вычисляют функцию и градиент. Если норма градиента не превышает допуска, завершают расчёт. Иначе выполняют полный последовательный цикл, используя новые значения координат сразу после каждого подшага. После цикла снова проверяют полный градиент, конечность чисел и лимит циклов.

Метод Ньютона. В начале каждой итерации проверяют градиент. Затем вычисляют Гессиан, при необходимости модифицируют его, решают систему для направления и выбирают полный или дробный шаг. После перехода вычисляют градиент новой точки. При вырожденной системе, неподходящем направлении или неудаче поиска шага возвращают отдельный статус.

Сравним методы на основной квадратичной задаче из старта $(3; 0)$ при $\varepsilon_g = 10^{-6}$.

Метод	K	Коорд	N_f	N_g	N_H	N_s
Покоординатный	12	24	25	13	0	0
Наискорейший спуск	8	0	9	9	0	0
Ньютон	1	0	2	2	1	1
Ньютон с дроблением	1	0	2	2	1	1

K означает число полных циклов для покоординатного метода и число переходов для остальных. Столбец «Коорд» показывает число координатных подшагов. N_f, N_g, N_H, N_s — числа вычислений функции, полного градиента, Гессиана и решений линейной системы. Начальные значения функции и градиента включены.

Для покоординатного метода функция записывается после каждого подшага, а полный градиент — после цикла. Кроме того, вычисляются 24 отдельные частные производные; они учитываются в поле n_partial. В методе наискорейшего спуска дополнительно выполняются 8 произведений $A\mathbf{g}$ для формулы шага; они учитываются в n_hvp. Эти операции не следует скрывать за одинаковым числом внешних итераций.

Вычисление учебных ошибок, построение графиков и финальная диагностическая проверка Гессиана не входят в счётчики алгоритма. В модифицированном методе вычисление спектра относится к дополнительным затратам обработки уже полученного Гессиана; отдельный счётчик операций спектрального разложения не ведётся.

Для диагональной вытянутой задачи покоординатный метод требует одного цикла. Для повёрнутой задачи с тем же спектром — 96 циклов. Ньютон в обеих положительно определённых квадратичных задачах требует одного решения системы. Эти результаты нельзя переносить на произвольную нелинейную задачу без учёта затрат построения и решения модели.

13 Реализация на Python

Архив содержит coordinate_newton.py, variants.json и README.txt. Требуются Python 3.10 или новее, NumPy и Matplotlib. После распаковки откройте терминал в папке программы:

```
python -m pip install numpy matplotlib
python coordinate_newton.py
python coordinate_newton.py --variant 7 --output results_7
python coordinate_newton.py --example rotated --output results_rotated
python coordinate_newton.py --example quartic --output results_quartic
```

В Windows вместо python можно использовать py. Отдельные опыты с порядком координат и поведением Ньютона:

```
python coordinate_newton.py --method coordinate --order 21
python coordinate_newton.py --example overshoot --output results_overshoot
python coordinate_newton.py --example doublewell --output results_doublewell
```

Для квадратичных задач режим compare запускает покоординатный метод, наискорейший спуск, обычный и демпфированный методы Ньютона. Для нелинейных примеров compare запускает обычный, демпфированный и модифицированный методы Ньютона. Покоординатная реализация в этом архиве использует аналитическую квадратичную формулу и не предназначена для произвольной нелинейной функции.

Последовательное обновление координат:

```
for i in (0, 1):
    gi = float(A[i] @ (x - center))
    x[i] -= gi / A[i, i]
```

Вторая итерация цикла видит уже изменённый массив x. center — известный центр заданной учебной квадратичной функции. При переходе к общей форме $A\mathbf{x} - \mathbf{b}$ соответствующим образом меняется вычисление gi.

Направление Ньютона:

```
g = grad(x)
H = hess(x)
p = np.linalg.solve(H, -g)
candidate = x + p
```

В полном коде до решения проверяется критерий по градиенту, обрабатывается вырожденность системы. Для демпфированного метода проверяется положительная определённость Гессиана; для модифицированного — матрицы после сдвига.

```
lam_min = np.linalg.eigvalsh(H)[0]
mu = max(0.0, delta - lam_min)
B = H + mu * np.eye(2)
p = np.linalg.solve(B, -g)
```

Результаты. Файлы history.csv содержат точки после полных внешних итераций. coordinate_trace.csv дополнительно содержит все промежуточные координатные подшаги. Файлы trials.csv содержат пробы дробления. summary.json хранит статусы, счётчики и собственные значения Гессиана в итоговой точке. График comparison.png сохраняется с разрешением 300 dpi.

Интерпретация статуса. gradient_tolerance означает только выполнение заданного критерия стационарности. Для невыпуклой задачи дополнительно смотрят поле classification. Значение indefinite_hessian указывает на неопределённый Гессиан; около стационарной точки это несовместимо с локальным минимумом. Значение positive_definite_hessian соответствует положительно определённому Гессиану в полученной приближённой точке, но само по себе не доказывает глобальный минимум произвольной функции.

Другие статусы описывают предел числа итераций, вырожденность системы, неположительный Гессиан, отсутствие направления спуска, невозможность подобрать шаг или неконечные значения. Они не должны заменяться сообщением «минимум найден». Подробности приведены в README.txt.

14 Самостоятельная работа

Используется прежнее семейство 18 вариантов:

$$f(x_1, x_2) = a(x_1 - s)^2 + 2b(x_1 - s)(x_2 - t) + c(x_2 - t)^2 + d.$$

Начальная точка $\mathbf{x}^0 = (s + 2; t + 1)$. Точный минимум равен $(s; t)$, минимальное значение — d.

№	a	b	c	s	t	d
1	2	1	2	-1	1	0
2	1	0	9	-1	-1	0
3	3	-1	2	-1	2	0
4	4	2	3	-1	0	0

№	a	b	c	s	t	d
5	1	0	25	-1	-2	0
6	5	-2	2	-1	1	0
7	2	1	2	0	1	3
8	1	0	9	0	-1	3
9	3	-1	2	0	2	3
10	4	2	3	0	0	3
11	1	0	25	0	-2	3
12	5	-2	2	0	1	3
13	2	1	2	1	1	-2
14	1	0	9	1	-1	-2
15	3	-1	2	1	2	-2
16	4	2	3	1	0	-2
17	1	0	25	1	-2	-2
18	5	-2	2	1	1	-2

Порядок выполнения.

1. Найдите градиент и Гессиан. Проверьте $a > 0$ и $ac - b^2 > 0$. Объясните, почему минимум единственный.
2. Выведите координатные формулы и выполните два полных цикла в порядке $1 \to 2$. Сохраните промежуточные точки и значения функции после каждого подшага.
3. Проверьте обнуление соответствующей частной производной после каждого подшага. Покажите, почему после следующего подшага предыдущая частная производная может стать ненулевой.
4. Выполните один цикл в порядке $2 \to 1$. Сравните результат с первым порядком.
5. Выведите множитель $r = b^2/(ac)$. Проверьте для последовательных полных циклов формулу $v^k = r^k v^0$ и отношение ошибок значений r^2, если ошибки ненулевые.
6. Из исходной точки решите систему Ньютона вручную. Убедитесь, что полный шаг приводит к $(s; t)$. Проверьте равенство фактического и предсказанного моделью уменьшения.
7. Запустите программу для своего варианта при допуске 10^{-6}. Сопоставьте ручные результаты с журналами. Составьте таблицу итераций, координатных подшагов и вычислительных затрат.
8. Исследуйте пример overshoot. Объясните отбрасывание шагов 1 и $1/2$ и принятие $1/4$ на первой итерации. Сравните итоговые статусы полного и демпфированного Ньютона.
9. Исследуйте пример doublewell. Найдите и классифицируйте все стационарные точки. Сравните обычный и модифицированный методы; объясните роль сдвига Гессиана.

Содержание отчёта: постановка варианта, вывод формул, таблица двух ручных циклов, решение системы Ньютона, программные результаты, графики и вывод о применимости методов. При сравнении отдельно укажите, что считается одной внешней итерацией.

14.1 Формулы для самопроверки

При $u^0 = 2$, $v^0 = 1$ первый цикл в порядке $1 \to 2$ даёт

$$u^1 = -\frac{b}{a}, \qquad v^1 = \frac{b^2}{ac}.$$

Второй цикл даёт $u^2 = -(b/a)r$, $v^2 = r^2$. Ошибка значения после первого цикла равна

$$f_1 - d = \frac{b^2}{a}(1 - r).$$

При $b = 0$ она нулевая: задача разделена. При $b \neq 0$ после первого цикла последующие ошибки умножаются на r^2.

В начальной точке градиент и система Ньютона имеют вид

$$\mathbf{g}_0 = \begin{pmatrix} 4a + 2b \\ 4b + 2c \end{pmatrix}, \qquad \begin{pmatrix} 2a & 2b \\ 2b & 2c \end{pmatrix} \mathbf{p}_0 = -\mathbf{g}_0.$$

Подстановка $\mathbf{p}_0 = (-2; -1)$ удовлетворяет системе для каждого варианта. Поэтому $\mathbf{x}^0 + \mathbf{p}_0 = (s; t)$. Эта простая проверка не отменяет необходимости показать решение своей системы и условия её невырожденности.

15 Контрольные вопросы и задачи

1. Чем отличается один координатный подшаг от полного цикла?
2. Какие значения координат используются во второй одномерной задаче?
3. Почему после координатного минимума не обязательно обнуляется весь градиент?
4. Как связаны покоординатная минимизация квадратичной функции и метод Гаусса — Зейделя?
5. Может ли метод остановиться в седловой точке, минимизирующей функцию по каждой координате?
6. Почему одинаковое число обусловленности не означает одинаковую скорость покоординатного метода?
7. Как выводится система для направления Ньютона?
8. Почему предпочтительно решать систему, а не вычислять обратную матрицу?
9. При каких условиях направление Ньютона является направлением спуска?
10. Почему положительно определённого Гессиана недостаточно для принятия полного шага?
11. Какие условия обеспечивают локальную квадратичную сходимость?
12. Что меняет сдвиг Гессиана и когда он может замедлить метод?
13. Почему малый градиент не доказывает минимум в невыпуклой задаче?
14. Какие затраты нужно учитывать помимо числа внешних итераций?

Задача 1. Для $f(x, y) = x^2 + xy + y^2$ из $(1; 1)$ выполните один координатный цикл $x \to y$.

Решение. Сначала $2x + 1 = 0$, откуда $x = -1/2$. Затем $-1/2 + 2y = 0$, откуда $y = 1/4$. Значение функции равно $3/16$, градиент равен $(-3/4; 0)$. Множитель $r = (1/2)^2/(1 \cdot 1) = 1/4$.

Задача 2. Для той же функции из $(1; 1)$ найдите шаг Ньютона.

Решение. $H = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}$, $\mathbf{g} = (3; 3)$. Решение $H\mathbf{p} = -\mathbf{g}$ равно $(-1; -1)$. Новая точка $(0; 0)$ — точный минимум.

Задача 3. Пусть $H = \mathrm{diag}(-2,3)$ и $\delta = 1$. Найдите минимальный неотрицательный сдвиг вида μI, обеспечивающий $H + \mu I \succcurlyeq I$.

Ответ. $\mu = 3$, новая матрица равна $\mathrm{diag}(1,6)$. Сдвиг $\mu = 2$ недостаточен: он оставляет нулевое собственное значение.

Задача 4. Для $f(x) = \sqrt{1 + x^2}$ из $x^0 = 2$ найдите направление Ньютона и первую принятую величину шага при дроблении вдвое с $\sigma = 10^{-4}$.

Ответ. Направление $p = -10$. Шаги 1 и $1/2$ отвергаются, шаг $1/4$ принимается и даёт $x^1 = -1/2$. Положительность второй производной гарантирует направление спуска, но не пригодность полного шага.

16 Литература

[1] Kochenderfer M. J., Wheeler T. A. Algorithms for Optimization. Cambridge, MA: MIT Press, 2019. Chapter 6, § 6.1, pp. 87–91: метод Ньютона, квадратичная модель и возможные неудачи; chapter 7, § 7.1, pp. 99–100: циклический покоординатный поиск. Ручные примеры, дополнительные выводы и программа подготовлены для данного курса.

[2] Рабочая программа дисциплины «Методы оптимизации», 2024. Образовательная программа 6B06103 «Математическое и компьютерное моделирование». Тема 15 «Методы многомерной оптимизации. Метод покоординатного спуска. Метод Ньютона».

[3] Учебные материалы дисциплины «Методы оптимизации». Лекция 11 «Дифференцирование функций многих переменных», лекция 12 «Классический метод минимизации и основы методов спуска», лекции 13–14 о градиентных методах: Гессиан, условия минимума, правило Армихо, обусловленность и сравнение стратегий. В настоящей лекции использованы те же квадратичные варианты для последовательного сопоставления методов.