МАТЕМАТИКА

УДК 519.6

ОБ ЭФФЕКТИВНОМ ПОИСКЕ БЕЗУСЛОВНОГО ЭКСТРЕМУМА ГЛАДКИХ ФУНКЦИОНАЛОВ В КОНЕЧНОМЕРНЫХ ЗАДАЧАХ

канд. физ.-мат. наук, доц. О.В. ГОЛУБЕВА, д-р техн. наук С.Г. ЕХИЛЕВСИЙ,
канд. физ.-мат. наук Ю.Ф. ПАСТУХОВ, канд. физ.-мат. наук Д.Ф. ПАСТУХОВ
(Полоцкий государственный университет)

Получены условия быстрой сходимости простой итерации в конечномерной задаче на экстремум для функционала третьего порядка гладкости. Приведены формулы необходимого числа операций для достижения заданной наибольшей точности координат стационарной точки и значения функционала в стационарной точке. Получена разностная итерационная формула для априорно гладких функционалов, возможно не представимых в виде композиции элементарных функций. Показана эквивалентность порядка точности полученных итерационных формул, определена верхняя граница оптимального шага. Эффективность метода поиска точек экстремума и точек перевала показана в примерах и компьютерных программах.

***Ключевые слова**: гладкий функционал, строгое диагональное преобладание элементов матрицы Гессе, центральная разность первого порядка, оптимальный шаг итерационной формулы.*

Введение. В статье рассматриваются эффективные методы поиска безусловного экстремума гладких функционалов конечного числа переменных. С помощью градиентных методов поиска экстремума можно получать решение, принадлежащее широкому классу непрерывно дифференцируемых функций. Однако эти методы не позволяют получить решение с двойной точностью double для чисел с плавающей запятой [1–3]. Например, в матричном методе Ньютона нужно вычислить n^2 элементов матрицы Якоби, что увеличивает погрешность при отыскании матрицы, обратной к матрице Якоби: $\overrightarrow{x^m} = \overrightarrow{x^m} - (F'(\overrightarrow{x^m}))^{-1} * F(\overrightarrow{x^m})$, где $(F'(\overrightarrow{x^m}))^{-1}$ – матрица обратная к матрице Якоби. Метод Зейделя использует только n диагональных элементов матрицы Якоби, поэтому при одинаковом с методом Ньютона числе итераций в методе Зейделя меньше элементарных операций и, следовательно, меньше ошибка округления.

В работе представлен способ получения экстремальных значений с относительной точностью 10^{-16} для трижды непрерывно дифференцируемых функционалов со строгим диагональным преобладанием матрицы Гессе всего за 60 итераций при начальном удалении от стационарной точки на 100 единиц.

Определение 1. Среди двух методов, позволяющих получить решение задачи при одинаковых начальных условиях, более эффективным назовем метод, дающий большую точность. При одинаковой точности решения более эффективным назовем метод, использующий меньшее число элементарных арифметических операций.

Постановка задачи. Пусть в пространстве R^n задана открытая область $A \subset R^n$, и вектор $\overline{x} = (\overline{x_1}, \overline{x_2}, ..., \overline{x_n}) \in A$. Рассмотрим задачу поиска безусловного экстремума функционалов, трижды непрерывно дифференцируемых в открытой области A [1]:

$$\begin{cases} f(x_1, x_2, ..., x_n) \to \text{extr}, \\ f(x) \in C^3(A). \end{cases} \quad (1)$$

Для поиска экстремальных точек задачи (1) можно использовать два подхода. Первый заключается в исследовании основного функционала, например, градиентными методами. В другом применяются необходимые условия экстремума функции нескольких переменных [1]:

$$\begin{cases} f'_{x_1}(x_1, x_2, ..., x_n) \equiv F_1(x_1, x_2, ..., x_n) = 0, \\ f'_{x_2}(x_1, x_2, ..., x_n) \equiv F_2(x_1, x_2, ..., x_n) = 0, \\ \qquad ..., \\ f'_{x_n}(x_1, x_2, ..., x_n) \equiv F_n(x_1, x_2, ..., x_n) = 0, \end{cases} \tag{2}$$

где $\bar{x} = (\bar{x}_1, \bar{x}_2, ..., \bar{x}_n) \in A \subset R^n$ – стационарная точка, то есть решение системы уравнений (2).

Обозначим координату итерационной точки через x_i^m, где i – номер координаты, $i = \overline{1, n}$; m – номер итерации, $m = 0, 1, 2, \ldots$. Решим систему (2) численно методом простой итерации [2]. Воспользуемся, например, методом Зейделя для системы уравнений, заданных неявно [2]:

$$\begin{cases} F_1(x_1^{m+1}, x_2^m, ..., x_n^m) = 0, \\ F_2(x_1^{m+1}, x_2^{m+1}, ..., x_n^m) = 0, \\ \qquad ... \\ F_n(x_1^{m+1}, x_2^{m+1}, ..., x_{n-1}^{m+1}, x_n^{m+1}) = 0. \end{cases} \tag{3}$$

То есть система (2) сводится к последовательному решению n уравнений системы (3), каждое из которых $F_i(x_1^{m+1}, x_2^{m+1}, ..., x_i^{m+1}, ..., x_n^m) = 0$, $i = \overline{1, n}$, представляет уравнение с одной неизвестной x_i^{m+1}, а все остальные неизвестные при фиксированной итерации остаются постоянными. В этом случае для нахождения i-й неизвестной можно использовать i-е уравнение с явным видом итерации – формулу касательных Ньютона для уравнения с одной неизвестной:

$$\begin{cases} x_1^{m+1} = x_1^m - \dfrac{F_1(x_1^m, x_2^m, ..., x_n^m)}{F'_{1x_1}(x_1^m, x_2^m, ..., x_n^m)}, \\ x_2^{m+1} = x_2^m - \dfrac{F_2(x_1^{m+1}, x_2^m, ..., x_n^m)}{F'_{2x_2}(x_1^{m+1}, x_2^m, ..., x_n^m)}, \\ \qquad ..., \\ x_i^{m+1} = x_i^m - \dfrac{F_i(x_1^{m+1}, x_2^{m+1}, ..., x_{i-1}^{m+1}, x_i^m, ..., x_n^m)}{F'_{ix_i}(x_1^{m+1}, x_2^{m+1}, ..., x_{i-1}^{m+1}, x_i^m, ..., x_n^m)}, \\ \qquad ..., \\ x_n^{m+1} = x_n^m - \dfrac{F_n(x_1^{m+1}, x_2^{m+1}, ..., x_{i-1}^{m+1}, x_i^{m+1}, ..., x_{n-1}^{m+1}, x_n^m)}{F'_{nx_n}(x_1^{m+1}, x_2^{m+1}, ..., x_{i-1}^{m+1}, x_i^{m+1}, ..., x_{n-1}^{m+1}, x_n^m)}. \end{cases} \tag{4}$$

Обозначим вектор (невязку, погрешность) $\delta x^m = (\delta x_1{}^m, \delta x_2{}^m, ..., \delta x_n{}^m)$ как разность между итерационной точкой x^m на шаге итерации с номером m и стационарной точкой $\bar{x}$: $\delta x^m = (x_1^m - \bar{x}_1, x_2^m - \bar{x}_2, ..., x_n^m - \bar{x}_n)$. Аналогично вектор $\delta x^{m+1} = (\delta x_1{}^{m+1}, \delta x_2{}^{m+1}, ..., \delta x_n{}^{m+1})$ обозначим как $\delta x^{m+1} = (x_1^{m+1} - \bar{x}_1, x_2^{m+1} - \bar{x}_2, ..., x_n^{m+1} - \bar{x}_n)$ – невязка итерации на шаге $m+1$.

Пусть система (4) имеет предельную, стационарную точку $\bar{x}$. Тогда из систем (2) и (4) получаем

$$\begin{cases} \lim\limits_{m\to\infty} x_1^{m+1} = \lim\limits_{m\to\infty} x_1^m = \bar{x}_1 \Leftrightarrow f'_{x_1}(\bar{x}_1, \bar{x}_2, ..., \bar{x}_n) = 0, \\ \lim\limits_{m\to\infty} x_2^{m+1} = \lim\limits_{m\to\infty} x_2^m = \bar{x}_2 \Leftrightarrow f'_{x_2}(\bar{x}_1, \bar{x}_2, ..., \bar{x}_n) = 0, \\ \qquad ..., \\ \lim\limits_{m\to\infty} x_n^{m+1} = \lim\limits_{m\to\infty} x_n^m = \bar{x}_n \Leftrightarrow f'_{x_n}(\bar{x}_1, \bar{x}_2, ..., \bar{x}_n) = 0, \\ f''_{x_i x_i}(\bar{x}_1, \bar{x}_2, ..., \bar{x}_n) \neq 0, \ i = \overline{1, n}. \end{cases} \tag{5}$$

Вычтем x_i из правой и левой частей i-го уравнения системы (4) и получим систему уравнений (6), где все величины выражены через невязки и координаты стационарной точки: $x_k^{m+1} = \overline{x_k} + \delta x_k^{m+1}$, $x_k^m = \overline{x_k} + \delta x_k^m$, $k = \overline{1,n}$.

$$\begin{cases} \delta x_1^{m+1} = \delta x_1^m - \dfrac{f'_{x_1}(\overline{x_1} + \delta x_1^m, \overline{x_2} + \delta x_2^m, ..., \overline{x_n} + \delta x_n^m)}{f''_{x_1 x_1}(\overline{x_1} + \delta x_1^m, \overline{x_2} + \delta x_2^m, ..., \overline{x_n} + \delta x_n^m)}, \\ \delta x_2^{m+1} = \delta x_2^m - \dfrac{f'_{x_2}(\overline{x_1} + \delta x_1^{m+1}, \overline{x_2} + \delta x_2^m, ..., \overline{x_n} + \delta x_n^m)}{f''_{x_2 x_2}(\overline{x_1} + \delta x_1^{m+1}, \overline{x_2} + \delta x_2^m, ..., \overline{x_n} + \delta x_n^m)}, \\ \qquad ..., \\ \delta x_i^{m+1} = \delta x_i^m - \dfrac{f'_{x_i}(\overline{x_1} + \delta x_1^{m+1}, \overline{x_2} + \delta x_2^{m+1}, ..., \overline{x_{i-1}} + \delta x_{i-1}^{m+1}, \overline{x_i} + \delta x_i^m, ..., \overline{x_n} + \delta x_n^m)}{f''_{x_i x_i}(\overline{x_1} + \delta x_1^{m+1}, \overline{x_2} + \delta x_2^{m+1}, ..., \overline{x_{i-1}} + \delta x_{i-1}^{m+1}, \overline{x_i} + \delta x_i^m, ..., \overline{x_n} + \delta x_n^m)}, \\ \qquad ..., \\ \delta x_n^{m+1} = \delta x_n^m - \dfrac{f'_{x_n}(\overline{x_1} + \delta x_1^{m+1}, \overline{x_2} + \delta x_2^{m+1}, ..., \overline{x_{n-1}} + \delta x_{n-1}^{m+1}, \overline{x_n} + \delta x_n^m)}{f''_{x_n x_n}(\overline{x_1} + \delta x_1^{m+1}, \overline{x_2} + \delta x_2^{m+1}, ..., \overline{x_{n-1}} + \delta x_{n-1}^{m+1}, \overline{x_n} + \delta x_n^m)}. \end{cases} \qquad (6)$$

Система (4) сходится к стационарной точке $\overline{x}$, если и только если невязки в системе (6) сходятся к нулю: $\lim\limits_{m\to\infty} \delta x_i^{m+1} = \lim\limits_{m\to\infty} \delta x_i^m = 0$, $i = \overline{1,n}$. Значит, системы (4) и (6) эквивалентны.

Определение 2. Числовая итерационная последовательность x^{m+1} называется сходящейся к предельной точке $\overline{x}$ с порядком скорости p, если $\exists\, C > 0,\ p > 0 : \lim\limits_{m\to\infty}\left(\sup\limits_{p>0} \dfrac{\left|\delta x^{m+1}\right|}{\left|\delta x^m\right|^p} \le C\right)$.

Сходимость метода. Теорема 1 (условия сходимости итерации (6)). Пусть открытая область $A \subset R^n$ содержит начальную итерацию $(x_1^0, x_2^0, ..., x_n^0) \in A$ и стационарную точку $\overline{x} = (\overline{x_1}, \overline{x_2}, ..., \overline{x_n}) \in A$ (решение системы (2)). Функция $f(x)$, $x \in A$, конечного числа n переменных:

1) трижды непрерывно дифференцируема $f(x) \in C^3(A)$;

2) матрица Гессе функции $f(x)$ с элементами $H_{i,j} = f''_{x_i x_j}(x)$ обладает строгим диагональным преобладанием: $\left|f''_{x_i x_i}(x)\right| > \sum\limits_{j=1, j\ne i}^{n} \left|f''_{x_i x_j}(x)\right|$, $i = \overline{1,n}$, $x \in A$.

Обозначим $q_i = \sup\limits_{x\in A} \dfrac{\sum\limits_{j=1, j\ne i}^{n} \left|f''_{x_i x_j}(x)\right|}{\left|f''_{x_i x_i}(x)\right|} < 1$, $i = \overline{1,n}$, в силу диагонального преобладания. Обозначим $q = \max\limits_{i=\overline{1,n}} q_i < 1$. Тогда система (6) сходится к единственной стационарной точке (5), по крайней мере, с первым порядком скорости ($C = q$, $p = 1$) и имеет место оценка погрешности после m итераций: $\left|\delta x^m\right| = \left|x^m - \overline{x}\right| \le \dfrac{(1+q)\left|\delta x^0\right| q^m}{1-q} \le \dfrac{(1+q)q^m}{(1-q)^2} l_0$, где $l_0 = \left|x^1 - x^0\right|$ – расстояние между начальными итерациями x^0, x^1, $\delta x^0 = (x_1^0 - \overline{x_1}, x_2^0 - \overline{x_2}, ..., x_n^0 - \overline{x_n})$.

Доказательство. Воспользуемся методом индукции. Разложим последовательно первую частную производную $f'_{x_i}(\overline{x_1} + \delta x_1^{m+1}, \overline{x_2} + \delta x_2^{m+1}, ..., \overline{x_{i-1}} + \delta x_{i-1}^{m+1}, \overline{x_i} + \delta x_i^m, ..., \overline{x_n} + \delta x_n^m)$, $i = \overline{1,n}$, входящую в каждое уравнение системы (6), в ряд Тейлора с центром в стационарной точке. Для первого уравнения в соответствии с (5) при $i = 1$ имеем

$$f'_{x_1}(x_1^m, x_2^m, ..., x_n^m) = f'_{x_1}(\overline{x_1}, \overline{x_2}, ..., \overline{x_n}) + \sum_{j=1}^{n} f''_{x_1 x_j}(\overline{x})\delta x_j^m + O(\left|\delta x^m\right|^2) = \sum_{j=1}^{n} f''_{x_1 x_j}(\overline{x})\delta x_j^m + O(\left|\delta x^m\right|^2), \quad (7)$$

где $\left|\delta x^m\right| = \max\limits_{j=\overline{1,n}}\left|\delta x_j^m\right|$, $\left|\delta x_j^m\right| \le \left|\delta x^m\right|$, $j = \overline{1,n}$, $m = 0, 1, 2, \ldots$.

В силу условий (5)–(7) и условия 1 теоремы 1 преобразуем дробь в правой части первого уравнения системы (6):

$$\delta x_1^{m+1} = \delta x_1^m - \frac{f'_{x_1}(\overline{x_1}+\delta x_1^m, \overline{x_2}+\delta x_2^m, ..., \overline{x_n}+\delta x_n^m)}{f''_{x_1x_1}(\overline{x_1}+\delta x_1^m, \overline{x_2}+\delta x_2^m, ..., \overline{x_n}+\delta x_n^m)} = \delta x_1^m - \frac{f'_{x_1}(\overline{x}) + \sum\limits_{j=1}^{n} f''_{x_1x_j}(\overline{x})\delta x_j^m + O\left(\left|\delta x^m\right|^2\right)}{f''_{x_1x_1}(\overline{x_1}+\delta x_1^m, \overline{x_2}+\delta x_2^m, ..., \overline{x_n}+\delta x_n^m)} =$$

$$= \delta x_1^m - \frac{\sum\limits_{j=1}^{n} f''_{x_1x_j}(\overline{x})\delta x_j^m + O\left(\left|\delta x^m\right|^2\right)}{f''_{x_1x_1}(\overline{x_1}+\delta x_1^m, \overline{x_2}+\delta x_2^m, ..., \overline{x_n}+\delta x_n^m)} = \delta x_1^m - \frac{\delta x_1^m}{\dfrac{f''_{x_1x_1}(\overline{x_1}+\delta x_1^m, \overline{x_2}+\delta x_2^m, ..., \overline{x_n}+\delta x_n^m)}{f''_{x_1x_1}(\overline{x_1}, \overline{x_2}, ..., \overline{x_n})}} -$$

$$- \frac{\sum\limits_{j=2}^{n} f''_{x_1x_j}(\overline{x})\delta x_j^m}{f''_{x_1x_1}(\overline{x_1}+\delta x_1^m, \overline{x_2}+\delta x_2^m, ..., \overline{x_n}+\delta x_n^m)} + O\left(\left|\delta x^m\right|^2\right) = \delta x_1^m - \frac{\delta x_1^m}{1+\dfrac{\sum\limits_{j=1}^{n} f^{(3)}_{x_1x_1x_j}(\overline{x_1}, \overline{x_2}, ..., \overline{x_n})\delta x_j^m}{f''_{x_1x_1}(\overline{x_1}, \overline{x_2}, ..., \overline{x_n})}} + O\left(\left|\delta x^m\right|^2\right) -$$

$$- \frac{\sum\limits_{j=2}^{n} f''_{x_1x_j}(\overline{x})\delta x_j^m}{f''_{x_1x_1}(\overline{x_1}+\delta x_1^m, \overline{x_2}+\delta x_2^m, ..., \overline{x_n}+\delta x_n^m)} = \delta x_1^m - \delta x_1^m - \frac{\sum\limits_{j=2}^{n} f''_{x_1x_j}(\overline{x})\delta x_j^m}{f''_{x_1x_1}(\overline{x_1}+\delta x_1^m, \overline{x_2}+\delta x_2^m, ..., \overline{x_n}+\delta x_n^m)} + O\left(\left|\delta x^m\right|^2\right),$$

$$\delta x_1^{m+1} = - \frac{\sum\limits_{j=2}^{n} f''_{x_1x_j}(\overline{x})\delta x_j^m}{f''_{x_1x_1}(\overline{x_1}+\delta x_1^m, \overline{x_2}+\delta x_2^m, ..., \overline{x_n}+\delta x_n^m)} + O\left(\left|\delta x^m\right|^2\right).$$

Оценим последнее выражение по модулю с помощью неравенства треугольника для модуля суммы величин и неравенства $\left|\delta x_j^m\right| \le \left|\delta x^m\right|$, $j = \overline{1,n}$, $m = 0, 1, 2, \ldots$:

$$\left|\delta x_1^{m+1}\right| \le \frac{\sum\limits_{j=2}^{n} \left|f''_{x_1x_j}(\overline{x})\right|\left|\delta x_j^m\right|}{\left|f''_{x_1x_1}(\overline{x_1}+\delta x_1^m, \overline{x_2}+\delta x_2^m, ..., \overline{x_n}+\delta x_n^m)\right|} + O\left(\left|\delta x^m\right|^2\right) \le \frac{\left|\delta x^m\right|\sum\limits_{j=2}^{n} \left|f''_{x_1x_j}(\overline{x})\right|}{\left|f''_{x_1x_1}(\overline{x_1}+\delta x_1^m, \overline{x_2}+\delta x_2^m, ..., \overline{x_n}+\delta x_n^m)\right|} + O\left(\left|\delta x^m\right|^2\right).$$

Используя условие 2 теоремы 1 $\forall x \in A$, получим

$$\left|f''_{x_1x_1}(\overline{x_1}+\delta x_1^m, \overline{x_2}+\delta x_2^m, ..., \overline{x_n}+\delta x_n^m)\right| > \sum_{j=1,\, j\ne 1}^{n} \left|f''_{x_1x_j}(x)\right| = \sum_{j=2}^{n} \left|f''_{x_1x_j}(x)\right|,$$

$$\left|\delta x_1^{m+1}\right| \le \left|\delta x^m\right| q_1 + O\left(\left|\delta x^m\right|^2\right) \le \left|\delta x^m\right| q + O\left(\left|\delta x^m\right|^2\right) < \left|\delta x^m\right| + O\left(\left|\delta x^m\right|^2\right). \quad (8)$$

Преобразуем произвольное i-е уравнение из (6), используя разложение в ряд Тейлора в окрестности стационарной точки. По индукции предположим выполнение неравенств $\left|\delta x_k^{m+1}\right| \le \left|\delta x^m\right|$, $k = \overline{1, i-1}$. Тогда

$$f'_{x_i}(x_1^{m+1}, x_2^{m+1}, ..., x_i^m, ..., x_n^m) = f'_{x_i}(\overline{x_1}, \overline{x_2}, ..., \overline{x_n}) + \sum_{j=1}^{i-1} f''_{x_ix_j}(\overline{x})\delta x_j^{m+1} + \sum_{j=i}^{n} f''_{x_ix_j}(\overline{x})\delta x_j^m + O\left(\left|\delta x^m\right|^2\right) =$$

$$= \sum_{j=1}^{i-1} f''_{x_ix_j}(\overline{x})\delta x_j^{m+1} + \sum_{j=i}^{n} f''_{x_ix_j}(\overline{x})\delta x_j^m + O\left(\left|\delta x^m\right|^2\right),$$

$$\delta x_i^{m+1}-\delta x_i^m=-\frac{f'_{x_i}(\overline{x_1}+\delta x_1^{m+1},\ldots,\overline{x_{i-1}}+\delta x_{i-1}^{m+1},\overline{x_i}+\delta x_i^m,\ldots,\overline{x_n}+\delta x_n^m)}{f''_{x_ix_i}(\overline{x_1}+\delta x_1^{m+1},\ldots,\overline{x_{i-1}}+\delta x_{i-1}^{m+1},\overline{x_i}+\delta x_i^m,\ldots,\overline{x_n}+\delta x_n^m)}=$$

$$=-\frac{\sum\limits_{j=1}^{i-1}f''_{x_ix_j}(\overline{x})\delta x_j^{m+1}+\sum\limits_{j=i}^{n}f''_{x_ix_j}(\overline{x})\delta x_j^m+O\left(\left|\delta x^m\right|^2\right)}{f''_{x_ix_i}(\overline{x_1}+\delta x_1^{m+1},\ldots,\overline{x_{i-1}}+\delta x_{i-1}^{m+1},\overline{x_i}+\delta x_i^m,\ldots,\overline{x_n}+\delta x_n^m)}=-\frac{\delta x_i^m}{\dfrac{f''_{x_ix_i}(\overline{x_1}+\delta x_1^{m+1},\ldots,\overline{x_n}+\delta x_n^m)}{f''_{x_ix_i}(\overline{x_1},\overline{x_2},\ldots,\overline{x_n})}}-$$

$$-\frac{\sum\limits_{j=1}^{i-1}f''_{x_ix_j}(\overline{x})\delta x_j^{m+1}+\sum\limits_{j=i+1}^{n}f''_{x_ix_j}(\overline{x})\delta x_j^m}{f''_{x_ix_i}(\overline{x_1}+\delta x_1^{m+1},\ldots,\overline{x_n}+\delta x_n^m)}+O\left(\left|\delta x^m\right|^2\right)=-\frac{\delta x_i^m}{1+\dfrac{\sum\limits_{j=1}^{i-1}f^{(3)}_{x_ix_ix_j}(\overline{x})\delta x_j^{m+1}+\sum\limits_{j=i+1}^{n}f^{(3)}_{x_ix_ix_j}(\overline{x})\delta x_j^m}{f''_{x_ix_i}(\overline{x_1},\overline{x_2},\ldots,\overline{x_n})}}+O\left(\left|\delta x^m\right|^2\right)-$$

$$-\frac{\sum\limits_{j=1}^{i-1}f''_{x_ix_j}(\overline{x})\delta x_j^{m+1}+\sum\limits_{j=i+1}^{n}f''_{x_ix_j}(\overline{x})\delta x_j^m}{f''_{x_ix_i}(\overline{x_1}+\delta x_1^{m+1},\ldots,\overline{x_n}+\delta x_n^m)}=-\delta x_i^m-\frac{\sum\limits_{j=1}^{i-1}f''_{x_ix_j}(\overline{x})\delta x_j^{m+1}+\sum\limits_{j=i+1}^{n}f''_{x_ix_j}(\overline{x})\delta x_j^m}{f''_{x_ix_i}(\overline{x_1}+\delta x_1^{m+1},\ldots,\overline{x_n}+\delta x_n^m)}+O\left(\left|\delta x^m\right|^2\right).$$

Сокращая промежуточные действия, получим

$$\delta x_i^{m+1}-\delta x_i^m=-\delta x_i^m-\frac{\sum\limits_{j=1}^{i-1}f''_{x_ix_j}(\overline{x})\delta x_j^{m+1}+\sum\limits_{j=i+1}^{n}f''_{x_ix_j}(\overline{x})\delta x_j^m}{f''_{x_ix_i}(\overline{x_1}+\delta x_1^{m+1},\ldots,\overline{x_n}+\delta x_n^m)}+O\left(\left|\delta x^m\right|^2\right)\ \text{или}$$

$$\delta x_i^{m+1}=-\frac{\sum\limits_{j=1}^{i-1}f''_{x_ix_j}(\overline{x})\delta x_j^{m+1}+\sum\limits_{j=i+1}^{n}f''_{x_ix_j}(\overline{x})\delta x_j^m}{f''_{x_ix_i}(\overline{x_1}+\delta x_1^{m+1},\ldots,\overline{x_n}+\delta x_n^m)}+O\left(\left|\delta x^m\right|^2\right). \quad (9)$$

Учитывая индуктивное предположение $\left|\delta x_k^{m+1}\right|\le\left|\delta x^m\right|$, $k=\overline{1,i-1}$, имеем

$$\left|\delta x_i^{m+1}\right|\le\frac{\sum\limits_{j=1}^{i-1}\left|f''_{x_ix_j}(\overline{x})\right|\left|\delta x_j^{m+1}\right|+\sum\limits_{j=i+1}^{n}\left|f''_{x_ix_j}(\overline{x})\right|\left|\delta x_j^m\right|}{\left|f''_{x_ix_i}(\overline{x_1}+\delta x_1^{m+1},\ldots,\overline{x_n}+\delta x_n^m)\right|}+O\left(\left|\delta x^m\right|^2\right)\le\frac{\sum\limits_{j=1,j\ne i}^{n}\left|f''_{x_ix_j}(\overline{x})\right|\left|\delta x_j^m\right|}{f''_{x_ix_i}(\overline{x_1}+\delta x_1^{m+1},\ldots,\overline{x_n}+\delta x_n^m)}+O\left(\left|\delta x^m\right|^2\right),$$

$$\left|\delta x_i^{m+1}\right|\le\left|\delta x^m\right|q_i=\left|\delta x^m\right|q_i\le\left|\delta x^m\right|q<\left|\delta x^m\right|. \quad (10)$$

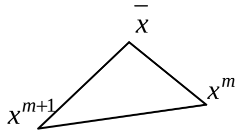
Индуктивно доказано, что $\left|\delta x_k^{m+1}\right|\le\left|\delta x^m\right|q<\left|\delta x^m\right|$ при $k=i$, поэтому $\left|\delta x_k^{m+1}\right|\le\left|\delta x^m\right|q<\left|\delta x^m\right|$, $k=\overline{1,n}$. Следовательно, $\left|\delta x^{m+1}\right|=\max\limits_{k=\overline{1,n}}\left|\delta x_k^{m+1}\right|\le\left|\delta x^m\right|q<\left|\delta x^m\right|$. Таким образом, сходимость систем итераций (4) и (6) при выполнении условий теоремы доказана.

Оценим погрешность метода. Пусть

$$\left|\delta x^{m+1}\right|\le\left|\delta x^m\right|q\le\left|\delta x^{m-1}\right|q^2\le\ldots\le\left|\delta x^1\right|q^m\le\left|\delta x^0\right|q^{m+1}\underset{m\to\infty}{\to}0, \quad (11)$$

где $\left|\delta x^0\right|=\max\limits_{i=\overline{1,n}}\left|\delta x_i^0\right|=\max\limits_{i=\overline{1,n}}\left|x_i^0-\overline{x_i}\right|$ – начальное приближение стационарной точки, начальная точка $x^0=(x_1^0,x_2^0,\ldots,x_n^0)\in A$. Первый порядок скорости следует из формулы (11) и определения 2 ($C=q$, $p=1$).

На практике известны не величины $\left|\delta x^{m+1}\right|$ и $\left|\delta x^m\right|$, а расстояния между последовательными итерациями x^m, x^{m+1} (рис.). Из неравенства треугольника имеем



Рисунок

$$\left|x^{m+1}-x^m\right|=\left|x^{m+1}-\overline{x}-(x^m-\overline{x})\right|=\left|\delta x^{m+1}-\delta x^m\right|\le\left|\delta x^m\right|+\left|\delta x^{m+1}\right|\le(1+q)\left|\delta x^m\right|.$$

Принимая во внимание неравенство $\left|\delta x^{m+1}\right| \le q\left|\delta x^{m}\right|$ и используя неравенство треугольника, получим после m итераций

$$\left|x^m - \overline{x}\right| \le \left|x^m - x^{m+1}\right| + \left|x^{m+1} - x^{m+2}\right| + \left|x^{m+2} - x^{m+3}\right| + \ldots + \left|x^{m+n} - x^{m+n+1}\right| + \left|x^{m+n+1} - \overline{x}\right| \le$$

$$\le \sum_{i=m}^{\infty}\left|x^{i+1} - x^{i}\right| \le (1+q)\left|\delta x^m\right| + (1+q)\left|\delta x^{m+1}\right| + (1+q)\left|\delta x^{m+2}\right| + \ldots = (1+q)(\left|\delta x^m\right| + \left|\delta x^{m+1}\right| + \left|\delta x^{m+2}\right| + \ldots) \le$$

$$\le (1+q)\left|\delta x^0\right| q^m \sum_{i=0}^{\infty} q^i = \frac{(1+q)\left|\delta x^0\right| q^m}{1-q}.$$

Поскольку $\left|\delta x^1\right| \le q\left|\delta x^0\right|$, запишем неравенство треугольника с избытком и недостатком:

$$(1-q)\left|\delta x^0\right| \le \left|\delta x^0\right| - \left|\delta x^1\right| \le l_0 = \left|x^1 - x^0\right| \le \left|\delta x^0\right| + \left|\delta x^1\right| \le (1+q)\left|\delta x^0\right|.$$

Окончательно оценка погрешности (невязки) имеет следующий вид:

$$\left|\delta x^m\right| = \left|x^m - \overline{x}\right| \le \frac{(1+q)\left|\delta x^0\right| q^m}{1-q} \le \frac{(1+q)q^m}{(1-q)^2} l_0. \tag{12}$$

Теорема доказана.

Замечание 1 (необходимость). Условие 2 диагонального преобладания матрицы Гессе является также и необходимым условием сходимости. Достаточно привести пример с условием $q > 1$, в котором итерация (6) расходится: $f(x_1, x_2) = x_1^{\,2} + x_2^{\,2} + 3x_1x_2$, $f_{x_1}(x_1, x_2) = 2x_1 + 3x_2$, $f_{x_2}(x_1, x_2) = 2x_2 + 3x_1$. Стационарная точка $(\overline{x_1}, \overline{x_2}) = (0{,}0)$, $f_{x_1x_1}(\overline{x_1}, \overline{x_2}) = f_{x_2x_2}(\overline{x_1}, \overline{x_2}) = 2$, $f_{x_1x_2}(\overline{x_1}, \overline{x_2}) = f_{x_2x_1}(\overline{x_1}, \overline{x_2}) = 3$, $q = \frac{3}{2} > 1$. Согласно (9) получим

$$\begin{cases} \delta x_1^{m+1} = -\dfrac{f_{x_1x_2}(\overline{x_1}, \overline{x_2})\delta x_2^m}{f_{x_1x_1}(\overline{x_1} + \delta x_1^m, \overline{x_2} + \delta x_2^m)} + O\left(\left|\delta x^m\right|^2\right) = -\dfrac{3}{2}\delta x_2^m, \\ \delta x_2^{m+1} = -\dfrac{f_{x_2x_1}(\overline{x_1}, \overline{x_2})\delta x_1^m}{f_{x_2x_2}(\overline{x_1} + \delta x_1^{m+1}, \overline{x_2} + \delta x_2^m)} + O\left(\left|\delta x^m\right|^2\right) = -\dfrac{3}{2}\delta x_1^m, \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} \delta x_1^{m+1} = \dfrac{9}{4}\delta x_1^{m-1} + O\left(\left|\delta x^m\right|^2\right), \\ \delta x_2^{m+1} = \dfrac{9}{4}\delta x_2^{m-1} + O\left(\left|\delta x^m\right|^2\right), \end{cases}$$

$$\begin{cases} \left|\delta x_1^{m+1}\right| = \dfrac{9}{4}\left|\delta x_1^{m-1}\right| + O\left(\left|\delta x^m\right|^2\right), \\ \left|\delta x_2^{m+1}\right| = \dfrac{9}{4}\left|\delta x_2^{m-1}\right| + O\left(\left|\delta x^m\right|^2\right), \end{cases} m = 2,4,6,\ldots, \begin{cases} \left|\delta x_1^{m}\right| = \dfrac{9}{4}\left|\delta x_1^{m-2}\right| + O\left(\left|\delta x^{m-1}\right|^2\right), \\ \left|\delta x_2^{m}\right| = \dfrac{9}{4}\left|\delta x_2^{m-2}\right| + O\left(\left|\delta x^{m-1}\right|^2\right), \end{cases} m = 2,4,6,\ldots.$$

Заметим, что во всех четных и нечетных итерациях невязка возрастает, результат каждой следующей итерации удаляется от стационарной точки.

Замечание 2. Формула (9) выполняется локально, то есть условия теоремы 1 справедливы в окрестности стационарной точки. Так как условия теоремы 1 выполняются абсолютно во всей области $A \subset R^n$, то они выполнены и локально в точке $(\overline{x_1}, \overline{x_2}, \ldots, \overline{x_n}) \in A$.

Замечание 3. Если итерация для невязки задана формулой $\delta x^{m+1} = A\delta x^m$ – аналогом формулы (9), где A – линейный оператор и сжимающее отображение, то есть $\left|\delta x^{m+1}\right| \le q\left|\delta x^m\right| < \left|\delta x^m\right|$ (что обеспечивается условием 2 теоремы 1, то по теореме о неподвижной точке в метрических пространствах [4] сжимающее отображение имеет единственное решение. Таким образом, единственность решения итерации (6) доказана.

Замечание 4. Сходимость (6) выполняется при различных значениях $q_i < 1$, $i = \overline{1,n}$. Если по всем переменным $i = \overline{1,n}$ в итерации (6) недиагональные элементы матрицы Гессе $\frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_i \partial x_j} \equiv 0$, $i = \overline{1,n}$, $j = \overline{1,n}$, $i \neq j$, то скорость сходимости (6) не линейная, а квадратичная.

Замечание 5. Отметим, что с помощью первой и второй теорем можно находить не только минимумы и максимумы, но и другие стационарные точки, в том числе и седловые точки в теории игр и матричных играх. Например, $f(x_1, x_2) = x_1^2 - x_2^2$, $(\overline{x_1}, \overline{x_2}) = (0,0)$.

В качестве экстремальной задачи, решенной численно, рассмотрим из [1]

$$f(x_1, x_2, x_3) = x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 - x_1 x_2 + x_1 - 2x_3 \to extr .$$

Запишем градиент и матрицу Гессе для функции $f(x_1, x_2, x_3)$:

$$\nabla f(x_1, x_2, x_3) = (2x_1 - x_2 + 1,\ 2x_2 - x_1, 2x_3 - 2),\ H_{i,j}(x_1, x_2, x_3) = \frac{\partial^2 f(\bar{x})}{\partial x_i \partial x_j} = \begin{vmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{vmatrix}.$$

Условия теоремы 1 выполнены:

$$\left|H_{1,1}\right| = 2 > \left|H_{1,2}\right| + \left|H_{1,3}\right| = 1 + 0 = 1,\ q_1 = \frac{1}{2} < 1,$$

$$\left|H_{2,2}\right| = 2 > \left|H_{2,1}\right| + \left|H_{2,3}\right| = 1 + 0 = 1,\ q_2 = \frac{1}{2} < 1,$$

$$\left|H_{3,3}\right| = 2 > \left|H_{3,1}\right| + \left|H_{3,2}\right| = 0 + 0 = 0,\ q_3 = 0 < 1,\ q = \max\left\{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right\} = \frac{1}{2}.$$

Запишем итерацию по формуле (6):

$$\begin{cases} x_1^{m+1} = x_1^m - \dfrac{(2x_1^m - x_2^m + 1)}{2}, \\ x_2^{m+1} = x_2^m - \dfrac{(2x_2^m - x_1^{m+1})}{2}, \\ x_3^{m+1} = x_3^m - \dfrac{2x_3^m - 2}{2} = 1. \end{cases}$$

Из (12) найдем необходимое число итераций:

$$N \geq \frac{\ln\left(\dfrac{\left|\delta x^m\right|}{\left|\delta x^0\right|}\left(\dfrac{1-q}{1+q}\right)\right)}{\ln q} = \frac{\ln\left(\dfrac{\left|\delta x^0\right|}{\left|\delta x^m\right|}\left(\dfrac{1+q}{1-q}\right)\right)}{\ln 1/q}, \tag{13}$$

$$N \geq \frac{\ln\left(\dfrac{\left|\delta x^m\right|}{l_0}\left(\dfrac{(1-q)^2}{1+q}\right)\right)}{\ln q} = \frac{\ln\left(\dfrac{l_0}{\left|\delta x^m\right|}\left(\dfrac{1+q}{(1-q)^2}\right)\right)}{\ln 1/q}. \tag{14}$$

Выберем $\left|\delta x^m\right| = 10^{-15}$, $\left|\delta x^0\right| = 10^2$, тогда $N = \ln(10^{17} * 3) / \ln 2 = 58$ итераций.

Составим на языке С программу:

```
#include<stdio.h>
#include<math.h>
double fx1(double x1,double x2, double x3);
double fx2(double x1,double x2, double x3);
double fx3(double x1, double x2, double x3);
double fxx1(double x1, double x2, double x3);
```

```
double fxx2(double x1,double x2, double x3);
double fxx3(double x1, double x2, double x3);
int main()
{
int n,i;
double x1,x2,x3;
        n=60;
        x1=-100.0;
        x2=100.0;
        x3=100.0;
        for(i=1;i<=n ;i++)
        {
                x1=x1-fx1(x1,x2,x3)/fxx1(x1,x2,x3);
                x2=x2-fx2(x1,x2,x3)/fxx2(x1,x2,x3);
                x3=x3-fx3(x1,x2,x3)/fxx3(x1,x2,x3);
        }
printf("x1=%.16lf,x2=%.16lf,x3=%.16lf,extr=%.16lf\n",x1,x2,x3,x1*x1+x2*x2+x3*x3-x1*x2+x1-2.0*x3);
}
double fx1(double x1,double x2,double x3)
{
return 2.0*x1-x2+1.0;
}
 double fx2(double x1,double x2, double x3)
{
        return 2.0*x2-x1;
}
double fx3(double x1,double x2,double x3)
{
        return 2.0*x3-2.0;
}
double fxx1(double x1, double x2, double x3)
{
        return 2.0;
}
double fxx2(double x1,double x2,double x3)
{
        return 2.0;
        }
        double fxx3(double x1,double x2,double x3)
        {
        return 2.0;
        }
```

Программа возвращает решение задачи и значение функционала:

$$x_1 = -0.6666666666666666,\ x_2 = -0.3333333333333333,\ x_3 = 1.0000000000000000,$$
$$extr = -1.3333333333333330.$$

Матрица Гессе положительно определена и, следовательно, в точке $\bar{x} = \left(-\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, 1\right)$ находится локальный минимум функции. Точное решение: $\overline{x_1} = -\frac{2}{3}$, $\overline{x_2} = -\frac{1}{3}$, $\overline{x_3} = 1$, $f(\overline{x_1}, \overline{x_2}, \overline{x_3}) = -\frac{4}{3}$.

Рассмотрим разностную формулу, полученную из (6), в которой первая производная заменена центральной разностью с шагом $h/2$:

Теорема 2. Пусть функционал $f(x) \in C^6(A)$ имеет гладкость не хуже шестого порядка, и его матрица Гессе имеет строгое диагональное преобладание. Тогда итерационные формулы (6) и (13) сравнимы по точности с порядком $O(h^2) = O\left(\left|\delta x^m\right|^2\right)$ и итерационная последовательность (13) сходится к единственной стационарной точке $\bar{x} = (\bar{x}_1, \bar{x}_2, ..., \bar{x}_n) \in A$. Оценка верхней границы для оптимального шага h_i^m определяется формулой

$$h_i^{upper} = \min\left\{ \sqrt{\frac{12\left|f''_{x_i}(x^m)\right|}{\left|f^{(4)}_{x_i}(x^m)\right|}}, \sqrt{\left(\frac{240 f^{(3)}_{x_i}(\bar{x}) f''_{x_i}(\bar{x})}{20 f^{(3)}_{x_i}(\bar{x}) f^{(4)}_{x_i}(\bar{x}) - 3 f^{(5)}_{x_i}(\bar{x}) f''_{x_i}(\bar{x})}\right)} \right\}.$$

Доказательство. Разложим в ряд Тейлора числитель и знаменатель формул (6), обозначим $x^m = (x_1^m, ..., x_n^m)$:

$$f\left(x_1^m, .., x_i^m \pm \frac{h}{2}, ..., x_i^m\right) = f(x^m) \pm \frac{h}{2} f'_{x_i}(x^m) + \frac{h^2}{8} f''_{x_i}(x^m) \pm \frac{h^3}{48} f^{(3)}_{x_i}(x^m) + \frac{h^4}{384} f^{(4)}_{x_i}(x^m) \pm \frac{h^5}{3840} f^{(5)}_{x_i}(x^m),$$

$$\frac{f\left(x_1^m, .., x_i^m + \frac{h}{2}, ..., x_n^m\right) - f\left(x_1^m, .., x_i^m - \frac{h}{2}, ..., x_n^m\right)}{h} = f'_{x_i}(x^m) + \frac{h^2}{24} f^{(3)}_{x_i}(x^m) + \frac{h^4}{1920} f^{(5)}_{x_i}(x^m) + O(h^6),$$

$$f(x_1^m, ..., x_i^m \pm h, ..., x_n^m) = f(x^m) \pm h f'_{x_i}(x^m) + \frac{h^2}{2} f''_{x_i}(x^m) \pm \frac{h^3}{6} f^{(3)}_{x_i}(x^m) + \frac{h^4}{24} f^{(4)}_{x_i}(x^m) \pm \frac{h^5}{120} f^{(5)}_{x_i}(x^m) + \frac{h^6}{720} f^{(6)}_{x_i}(x^m),$$

$$\frac{f(x_1^m, ..., x_i^m + h, ..., x_n^m) + f(x_1^m, ..., x_i^m - h, ..., x_n^m) - 2 f(x_1^m, x_2^m, ..., x_n^m)}{h^2} = f''_{x_i}(x^m) + \frac{h^2}{12} f^{(4)}_{x_i}(x^m) + \frac{h^4}{360} f^{(6)}_{x_i}(x^m) + O(h^6),$$

$$\begin{cases} x_1^{m+1} = x_1^m - \dfrac{\dfrac{f\left(x_1^m + \frac{h}{2}, x_2^m, ..., x_n^m\right) - f\left(x_1^m - \frac{h}{2}, x_2^m, ..., x_n^m\right)}{h} + O(h^2)}{\dfrac{f(x_1^m + h, x_2^m, ..., x_n^m) + f(x_1^m - h, x_2^m, ..., x_n^m) - 2 f(x_1^m, x_2^m, ..., x_n^m)}{h^2} + O(h^2)}, \\ ..., \\ x_i^{m+1} = x_i^m - \dfrac{\dfrac{f\left(x_1^m, ..., x_i^m + \frac{h}{2}, ..., x_n^m\right) - f\left(x_1^m, ..., x_i^m - \frac{h}{2}, ..., x_n^m\right)}{h} + O(h^2)}{\dfrac{f(x_1^m, ..., x_i^m + h, ..., x_n^m) + f(x_1^m, ..., x_i^m - h, ..., x_n^m) - 2 f(x_1^m, x_2^m, ..., x_n^m)}{h^2} O(h^2)}, \\ ..., \\ x_i^{m+1} = x_i^m - \dfrac{\dfrac{f\left(x_1^m, x_2^m, ..., x_n^m + \frac{h}{2}\right) - f\left(x_1^m, x_2^m, ..., x_n^m - \frac{h}{2}\right)}{h} + O(h^2)}{\dfrac{f(x_1^m, x_2^m, ..., x_n^m + h) + f(x_1^m, x_2^m, ..., x_n^m - h) - 2 f(x_1^m, x_2^m, ..., x_n^m)}{h^2} + O(h^2)}. \end{cases} \quad (15)$$

Откуда видно, что (6) отличается от (15) с точностью до $O(h^2)$. Заменим h на $\left|x_i^{m+1} - x_i^m\right| = h_i^m$, где h_i^m – абсолютная разность i-й координаты между соседними итерациями с номерами m и $m+1$. Примем во внимание условие

$$\left|\delta x_i^m\right|(1-q) \le \left|\delta x_i^m\right| - \left|\delta x_i^{m+1}\right| \le \left|x_i^{m+1} - x_i^m\right| \le \left|\delta x_i^m\right| + \left|\delta x_i^{m+1}\right| \le \left|\delta x_i^m\right|(1+q),$$

$$\frac{h_i^m}{(1+q)} = \frac{\left|x_i^{m+1} - x_i^m\right|}{(1+q)} \le \left|\delta x_i^m\right| \le \frac{\left|x_i^{m+1} - x_i^m\right|}{(1-q)} = \frac{h_i^m}{(1-q)}, \ (1-q)\left|\delta x_i^m\right| \le h_i^m \le (1+q)\left|\delta x_i^m\right|.$$

Запись $\varphi(x) = O(\psi(x))$ при $x \in X$ означает, что существует постоянная $A > 0$ такая, что $\left|\varphi(x)\right| \le A\left|\psi(x)\right|$ для $x \in X$ [3]. Для дискретного задания функции аналогично запишем: $\varphi_m = O(\psi_m)$ при $m = 0,1,2,...$, если существует постоянная A такая, что $\left|\varphi_m\right| \le A\left|\psi_m\right|$ при $m = 0,1,2,...$. Поскольку для функций h_i и δx_i получено неравенство $0 \le h_i^m \le (1+q)\left|\delta x_i^m\right|$, то есть существует постоянная $A = 1+q$ такая, что $h_i^m \le A\left|\delta x_i^m\right|$ для любого $m = 0,1,2,\dots$. Следовательно, $h_i = O(\delta x_i^m)$, $i = \overline{1,n}$.

С другой стороны, $\left|\delta x_i^m\right| \le \dfrac{h_i^m}{1-q}$ для любого $m = 0,1,2,\dots$. Тогда $\delta x_i = O(h_i)$, $i = \overline{1,n}$ с постоянной $A = \dfrac{1}{1-q}$. На основании свойств $O(x^n)O(x^m) = O(x^{n+m})$ и $O(O(f(x))) = O(f(x))$ имеем $O(h_i^2) = O(O(\delta x_i)O(\delta x_i)) = O(O(\delta x_i)) = O(\delta x_i^2)$, поэтому равенство $O((h_i^m)^2) = O(\left|\delta x_i^m\right|^2)$ справедливо для любого $m = 0,1,2,\dots$, значит системы (6) и (15) эквивалентны со вторым порядком точности. Если в теореме 2 выполнены условия теоремы 1, то существует единственное решение итерации (15), сходящееся к решению системы (2). Число итераций по-прежнему определяется формулами (13), (14). Теорема доказана.

Чтобы устранить неопределенность в (15) при малых h, преобразуем ее к (16). На первый взгляд, формулы (16) от шага h_i^m не зависят. Действительно, числитель и знаменатель дроби прямо пропорциональны в первом приближении $(h_i^m)^2$ и сокращаются на $(h_i^m)^2$. Следовательно, для оптимального шага с наименьшей погрешностью нужно учесть члены более высокого порядка $O(h_i^m)^2$:

$$\begin{cases} x_1^{m+1} = x_1^m - h_1^m \dfrac{f\left(x_1^m + \dfrac{h_1^m}{2}, x_2^m, \dots, x_n^m\right) - f\left(x_1^m - \dfrac{h_1^m}{2}, x_2^m, \dots, x_n^m\right)}{f(x_1^m + h_1^m, x_2^m, \dots, x_n^m) + f(x_1^m - h_1^m, x_2^m, \dots, x_n^m) - 2f(x_1^m, x_2^m, \dots, x_n^m)} + O((h_1^m)^2), \\ \dots, \\ x_i^{m+1} = x_i^m - h_i^m \dfrac{f\left(x_1^m, \dots, x_i^m + \dfrac{h_i^m}{2}, \dots, x_n^m\right) - f\left(x_1^m, \dots, x_i^m - \dfrac{h_i^m}{2}, \dots, x_n^m\right)}{f(x_1^m, \dots, x_i^m + h_i^m, \dots, x_n^m) + f(x_1^m, \dots, x_i^m - h_i^m, \dots, x_n^m) - 2f(x_1^m, x_2^m, \dots, x_n^m)} + O((h_i^m)^2), \\ \dots, \\ x_n^{m+1} = x_n^m - h_n^m \dfrac{f\left(x_1^m, x_2^m, \dots, x_n^m + \dfrac{h_n^m}{2}\right) - f\left(x_1^m, x_2^m, \dots, x_n^m - \dfrac{h_n^m}{2}\right)}{f(x_1^m, x_2^m, \dots, x_n^m + h_n^m) + f(x_1^m, x_2^m, \dots, x_n^m - h_n^m) - 2f(x_1^m, x_2^m, \dots, x_n^m)} + O((h_n^m)^2). \end{cases} \tag{16}$$

Преобразуя i-е уравнение ($i = \overline{1,n}$) системы (16), получим

$$\begin{aligned} x_i^{m+1} &= x_i^m - h_i^m \frac{f\left(x_1^m, \dots, x_i^m + \dfrac{h_i^m}{2}, \dots, x_n^m\right) - f\left(x_1^m, \dots, x_i^m - \dfrac{h_i^m}{2}, \dots, x_n^m\right)}{f(x_1^m, \dots, x_i^m + h_i^m, \dots, x_n^m) + f(x_1^m, \dots, x_i^m - h_i^m, \dots, x_n^m) - 2f(x_1^m, x_2^m, \dots, x_n^m)} = \\ &= x_i^m - \frac{f'_{x_i}(x^m) + \dfrac{(h_i^m)^2}{24} f^{(3)}_{x_i}(x^m) + \dfrac{(h_i^m)^4}{1920} f^{(5)}_{x_i}(x^m) + O((h_i^m)^6)}{f''_{x_i}(x^m) + \dfrac{(h_i^m)^2}{12} f^{(4)}_{x_i}(x^m) + \dfrac{(h_i^m)^4}{360} f^{(6)}_{x_i}(x^m) + O((h_i^m)^6)} = \\ &= x_i^m - \frac{f'_{x_i}(x^m)}{f''_{x_i}(x^m)}\left(1 + \frac{(h_i^m)^2}{24}\frac{f^{(3)}_{x_i}(x^m)}{f'_{x_i}(x^m)} + \frac{(h_i^m)^4}{1920}\frac{f^{(5)}_{x_i}(x^m)}{f'_{x_i}(x^m)} + O((h_i^m)^6)\right) * \\ &* \left(1 - \frac{(h_i^m)^2}{12}\frac{f^{(4)}_{x_i}(x^m)}{f''_{x_i}(x^m)} - \frac{(h_i^m)^4}{360}\frac{f^{(6)}_{x_i}(x^m)}{f''_{x_i}(x^m)} + \left(\frac{(h_i^m)^2}{12}\frac{f^{(4)}_{x_i}(x^m)}{f''_{x_i}(x^m)}\right)^2 + O((h_i^m)^6)\right) = \\ &= x_i^m - \frac{f'_{x_i}(x^m)}{f''_{x_i}(x^m)}\left(1 + \frac{(h_i^m)^2}{24}\left(\frac{f^{(3)}_{x_i}(x^m)}{f'_{x_i}(x^m)} - \frac{2f^{(4)}_{x_i}(x^m)}{f''_{x_i}(x^m)}\right) + \right. \\ &\left. + (h_i^m)^4\left(\frac{1}{144}\left(\frac{f^{(4)}_{x_i}(x^m)}{f''_{x_i}(x^m)}\right)^2 + \frac{f^{(5)}_{x_i}(x^m)}{1920 f'_{x_i}(x^m)} - \frac{f^{(6)}_{x_i}(x^m)}{360 f''_{x_i}(x^m)} - \frac{f^{(3)}_{x_i}(x^m)}{288 f'_{x_i}(x^m)}\frac{f^{(4)}_{x_i}(x^m)}{f''_{x_i}(x^m)}\right) + O((h_i^m)^6)\right). \end{aligned} \tag{17}$$

В последнем разложении используется формула $\dfrac{1}{1+\alpha}=\sum\limits_{k=0}^{\infty}(-\alpha)^k$, для применимости которой достаточно выполнения условия $|\alpha|<1$, где

$$|\alpha|=\frac{1}{\left|f''_{x_i}(x^m)\right|}\left|\frac{(h_i^m)^2}{12}\,f^{(4)}_{x_i}(x^m)+\frac{(h_i^m)^4}{360}\,f^{(6)}_{x_i}(x^m)\right|, \tag{18}$$

тогда

$$\frac{1}{\left|f''_{x_i}(x^m)\right|}\left|\frac{(h_i^m)^2}{12}\,f^{(4)}_{x_i}(x^m)+\frac{(h_i^m)^4}{360}\,f^{(6)}_{x_i}(x^m)\right|\le\frac{1}{\left|f''_{x_i}(x^m)\right|}\frac{(h_i^m)^2}{12}\left|f^{(4)}_{x_i}(x^m)\right|+\frac{1}{\left|f''_{x_i}(x^m)\right|}\frac{(h_i^m)^4}{360}\left|f^{(6)}_{x_i}(x^m)\right|<1.$$

Обозначим $A=\dfrac{\left|f^{(4)}_{x_i}(x^m)\right|}{12\left|f''_{x_i}(x^m)\right|}\ge 0$, $B=\dfrac{\left|f^{(6)}_{x_i}(x^m)\right|}{360\left|f''_{x_i}(x^m)\right|}\ge 0$, $y=(h_i^m)^2$, тогда последнее неравенство примет следующий вид: $Ay+By^2-1<0$ при $y\ge 0$. Далее решаем неравенства, получим приближенную оценку верхней границы шага итерации:

$$0\le y<\frac{-A+\sqrt{A^2+4B}}{2B}=\frac{4B}{2B(\sqrt{A^2+4B}+A)}=\frac{2}{\sqrt{A^2+4B}+A}\le\frac{2}{2A}=\frac{1}{A}=\frac{12\left|f''_{x_i}(x^m)\right|}{\left|f^{(4)}_{x_i}(x^m)\right|}. \tag{19}$$

Чтобы формула (17) имела порядок точности $O((h_i^m)^6)$, необходимо:

$$(h_i^m)^2=\frac{\dfrac{f^{(3)}_{x_i}(x^m)}{f'_{x_i}(x^m)}-\dfrac{2f^{(4)}_{x_i}(x^m)}{f''_{x_i}(x^m}}{-\dfrac{1}{6}\left(\dfrac{f^{(4)}_{x_i}(x^m)}{f''_{x_i}(x^m)}\right)^2-\dfrac{f^{(5)}_{x_i}(x^m)}{80f'_{x_i}(x^m)}+\dfrac{f^{(6)}_{x_i}(x^m)}{15f''_{x_i}(x^m)}+\dfrac{f^{(3)}_{x_i}(x^m)}{12f'_{x_i}(x^m)}\dfrac{f^{(4)}_{x_i}(x^m)}{f''_{x_i}(x^m)}}=$$

$$=\frac{240(f^{(3)}_{x_i}(x^m)f''_{x_i}(x^m)-2f^{(4)}_{x_i}(x^m)f'_{x_i}(x^m))}{16f^{(6)}_{x_i}(x^m)f'_{x_i}(x^m)+20f^{(3)}_{x_i}(x^m)f^{(4)}_{x_i}(x^m)-3f^{(5)}_{x_i}(x^m)f''_{x_i}(x^m)-40\dfrac{f'_{x_i}(x^m)\left(f^{(4)}_{x_i}(x^m)\right)^2}{f''_{x_i}(x^m)}},\ i=\overline{1,n}. \tag{20}$$

Учитывая систему (2) $f'_{x_i}(x^m)\approx f'_{x_i}(\bar{x})=0$, упростим (20):

$$(h_i^m)^2=\left(\frac{240\,f^{(3)}_{x_i}(x^m)\,f''_{x_i}(x^m)}{20\,f^{(3)}_{x_i}(x^m)\,f^{(4)}_{x_i}(x^m)-3\,f^{(5)}_{x_i}(x^m)\,f''_{x_i}(x^m)}\right)\approx\left(\frac{240\,f^{(3)}_{x_i}(\bar{x})\,f''_{x_i}(\bar{x})}{20\,f^{(3)}_{x_i}(\bar{x})\,f^{(4)}_{x_i}(\bar{x})-3\,f^{(5)}_{x_i}(\bar{x})\,f''_{x_i}(\bar{x})}\right),\ i=\overline{1,n}. \tag{21}$$

При совместном выполнении условий (19) и (21) получим

$$h_i^{upper}=\min\left\{\sqrt{\frac{12\left|f''_{x_i}(x^m)\right|}{\left|f^{(4)}_{x_i}(x^m)\right|}},\sqrt{\left(\frac{240\,f^{(3)}_{x_i}(\bar{x})\,f''_{x_i}(\bar{x})}{20\,f^{(3)}_{x_i}(\bar{x})\,f^{(4)}_{x_i}(\bar{x})-3\,f^{(5)}_{x_i}(\bar{x})\,f''_{x_i}(\bar{x})}\right)}\right\}. \tag{22}$$

Для полиномов n переменных не выше четвертой степени из (22) получим

$$8\,h_i^{upper}=\sqrt{12\frac{\left|f''_{x_i}(\bar{x})\right|}{\left|f^{(4)}_{x_i}(\bar{x})\right|}}, \tag{23}$$

так как (19) и (21) дают равные значения.

Рассмотрим пример: $f(x_1, x_2) = 1 + x_1^4 + x_2^4 - x_1 x_2 + x_1^2 + x_2^2$, $f'_{x_1}(\bar{x}) = 4\bar{x}_1^3 - \bar{x}_2 + 2\bar{x}_1 = 0$, $f'_{x_2}(\bar{x}) = 4\bar{x}_2^3 - \bar{x}_1 + 2\bar{x}_2 = 0 \Rightarrow (\bar{x}_1 - \bar{x}_2)(4(\bar{x}_1^2 + \bar{x}_2^2 + \overline{x_1 x_2}) + 3) = 0 \Leftrightarrow \bar{x}_1 = \bar{x}_2 \Leftrightarrow 4\bar{x}_1^3 + \bar{x}_1 = 0 \Leftrightarrow \bar{x}_1 = \bar{x}_2 = 0$.

$$\frac{\partial^2 f(\bar{x}_1, \bar{x}_2)}{\partial x_i \partial x_j} = \begin{vmatrix} 12\bar{x}_1^2 + 2 & -1 \\ -1 & 12\bar{x}_2^2 + 2 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 2 \end{vmatrix}.$$

По теореме 1 матрица Гессе имеет диагональное преобладание. Оптимальный шаг найдем, применив формулу (23): $(h_1^m)^2 = (h_2^m)^2 = \frac{12 \cdot 2}{24} = 1$, $h_1^m = h_2^m = 1$.

Замечание 1. Существование оптимального шага $0 < h_i^m \le (h_i^m)^{upper}$ подтверждает численный эксперимент, поскольку погрешность вычислений стационарной точки увеличивается как при $h_i^m < (h_i^m)^{upper}$, так и при $h_i^m > (h_i^m)^{upper}$.

Примеры оценки оптимального шага можно встретить в [4].

Замечание 2. Несмотря на априорную гладкость функционала в (14), оценка оптимального шага требует как минимум гладкости четвертого порядка (в общем случае – частных производных шестого порядка).

Запишем программу на языке С (в данном примере мы используем $h_1^m = h_2^m = 1{,}0$, получаем решение с максимально возможной точностью – 16 значащих цифр):

```
#include<stdio.h>
#include<math.h>
double fx(double x1,double x2);
int main()
{
int n,i;
  double a1,b1,a2,b2,a3,b3,delta1,delta2,delta3;
  double h1,h2,h3,h;
  n=60;
  a1=100.0;
  a2=100.0;
  h1=1.0;
  h2=1.0;
for(i=1;i<=n;i++)
  {
  b1=a1-h1*(fx(a1+(h1/2.0),a2)-fx(a1-(h1/2.0),a2))/(fx(a1+h1,a2)+fx(a1-h1,a2)-2.0*fx(a1,a2));
  delta1=sqrt((b1-a1)*(b1-a1));
      a1=b1;
  b2=a2-h2*(fx(a1,a2+(h2/2.0))-fx(a1,a2-(h2/2.0)))/(fx(a1,a2+h2)+fx(a1,a2-h2)-2.0*fx(a1,a2));
  delta2=sqrt((b2-a2)*(b2-a2));
  a2=b2;
  }
printf("x1=%.30lf,x2=%.30lf,extr=%.30lf\n",b1,b2,fx(b1,b2));

printf(" h1=%.16lf,h2=%.16lf,h3=%.16lf\n",h1,h2);
}
double fx(double x1, double x2)
{
return  1.0+x1*x1*x1*x1+x2*x2*x2*x2+x1*x1-x1*x2+x2*x2;
}
```

Программа возвращает

$$h_1 = 1.0,\ h_2 = 1.0$$

$$x_1 = 0.00000000000000011,\ x_2 = 0.00000000000000011,\ extr = 1.00000000000000000000.$$

Выводы.

1. В теореме 1 получены условия для эффективной сходимости итерации поиска стационарной точки для функционалов третьего порядка гладкости, приведены формулы необходимого числа итераций для поиска экстремума с заданной точностью в конечномерной задаче.

2. Теорема 2 доказана для априорно гладких функционалов, возможно не представимых в виде композиции элементарных функций, показана эквивалентность точности итерационных формул в теоремах, определена верхняя граница оптимального шага.

3. Приведены программы и примеры, подтверждающие эффективность доказанных методов. Используя полученные теоремы, можно находить как экстремумы, так и точки перевала.

ЛИТЕРАТУРА

1. Галеев, Э.М. Краткий курс теории экстремальных задач / Э.М. Галеев, В.М. Тихомиров. – М. : Изд-во Москов. ун-т, 1989. – 204 с. : ил.
2. Бахвалов, Н.С. Численные методы / Н.С. Бахвалов, Н.П. Жидков, Г.М. Кобельков. – 7-е изд. – М. : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2011. – 636 с. – (Классический университетский учебник).
3. Федоренко, Р.П. Введение в вычислительную физику : учеб. пособие для вузов / Р.П. Федоренко. – Долгопрудный : Издательский дом «Интеллект», 2008. – 504 с.
4. Колмогоров, А.Н. Элементы теории функции и функционального анализа / А.Н. Колмогоров, С.В. Фомин. – М. :1989. – 450 с.

Поступила 15.03.2016

ON EFFECTIVE SEARCHING OF UNCONDITIONAL EXTREMUM SMOOTH FUNCTIONALS IN FINITE-DIMENSIONAL PROBLEMS

O. GOLUBEVA, S. EKHILEVSKIY, Y. PASTUHOV, D. PASTUHOV

Conditions of fast convergence of simple iteration in a finite-dimensional task on an extremum for functionality of the third order of smoothness are received. Formulas of necessary number of operations for achievement of the set largest accuracy of coordinates of a stationary point and value of functionality are given in a stationary point. The differential iterative formula for a priori smooth functionalities, perhaps not representable in the form of composition of elementary functions is received. Equivalence of an order of accuracy of the received iterative formulas is shown, the upper bound of an optimum step is defined. Efficiency of a method of search of points of an extremum and points of the pass is shown in examples and computer programs.

***Keywords**: smooth functionality, diagonal prevalence of elements of a matrix of Hess, uniform nondegeneracy, central difference of the first order, optimum step of an iterative formula.*