

# Оглавление

<b>1</b>	<b>Интерполяция</b>	<b>6</b>
1.1	Метод Лагранжа полиномиальной интерполяции . . . . .	6
1.1.1	Область применения . . . . .	7
1.1.2	Случай постоянного шага . . . . .	8
1.2	Интерполяция кубическими сплайнами . . . . .	8
1.2.1	Уравнения на концах . . . . .	9
1.3	Периодические функции . . . . .	10
1.3.1	Конечная цепочка . . . . .	10
1.4	Бесконечная решетка . . . . .	11
1.4.1	Ряды Фурье . . . . .	12
1.4.2	Матрица Фурье – преобразования . . . . .	13
<b>2</b>	<b>Локальные интерполяции</b>	<b>15</b>
2.1	Линейная интерполяция . . . . .	15
2.2	Гладкая интерполяция . . . . .	15
2.2.1	Уравнения на концах . . . . .	17
2.2.2	Дополнительные точки . . . . .	17
<b>3</b>	<b>Регрессия. Метод наименьших квадратов</b>	<b>18</b>
3.1	Проведение наилучшей прямой . . . . .	19
3.2	Проведение наилучшей параболы . . . . .	20
3.3	Общая линейная регрессия . . . . .	20
3.4	Регрессия сплайнами . . . . .	22
3.4.1	Граничные участки . . . . .	23
<b>4</b>	<b>Решение уравнений</b>	<b>25</b>
4.1	Численное решение уравнений . . . . .	25
4.1.1	Линейное уравнение . . . . .	25
4.1.2	Метод секущих . . . . .	26

4.1.3	Итерационные методы	26
4.2	Методы сканирования	26
4.2.1	Поиск интервала с корнем	26
4.2.2	Деление отрезка пополам (“дихотомия”)	27
4.2.3	Метод “золотого сечения”	27
<b>5</b>	<b>Решение систем линейных уравнений и обращение матриц</b>	<b>28</b>
5.1	Решение систем линейных уравнений	28
5.1.1	Специальные матрицы	29
5.1.2	Теоремы о разложении	30
5.2	Обращение матриц	31
5.2.1	Обращение специальных матриц	31
5.3	Методы исключения	32
5.3.1	Метод исключения Гаусса	32
5.3.2	Компактная схема исключения	33
5.4	Итерационные методы	34
5.4.1	Система уравнений и экстремальные задачи	34
5.4.2	Простая итерация	34
5.4.3	Метод Зайделя	34
5.4.4	Метод координатной релаксации	35
5.4.5	Проекционный метод (алгоритм Качмаржа)	35
5.5	Обращение матриц	36
5.5.1	Разбиение на клетки	36
5.5.2	Метод окаймления	36
<b>6</b>	<b>Системы нелинейных уравнений</b>	<b>38</b>
6.1	Симплексы	38
6.1.1	Симплексное сканирование	39
6.2	Метод секущих гиперплоскостей	41
6.3	Метод квазикасательных	41
6.4	“Дихотомия”	42
<b>7</b>	<b>Интегрирование и дифференциальные уравнения</b>	<b>43</b>
7.1	Конечные разности	43
7.1.1	Сдвиг функции	44
7.2	Интегрирование	45
7.2.1	Равноотстоящие узлы	45
7.2.2	Квадратурные формулы Гаусса и Чебышева	45
7.2.3	Метод Монте-Карло	46

7.3	Дифференциальные уравнения . . . . .	47
7.3.1	Одношаговые методы . . . . .	47
7.3.2	Метод Рунге-Кутта . . . . .	47
7.3.3	Разностные схемы решения задачи Коши . . . . .	48
7.4	Системы дифференциальных уравнений . . . . .	49
7.4.1	Метод Рунге-Кутта . . . . .	49
7.5	Д.у. высших порядков . . . . .	50
7.5.1	Метод Рунге-Кутта . . . . .	50
<b>8</b>	<b>Методы поиска экстремума . . . . .</b>	<b>51</b>
8.1	Одномерные задачи . . . . .	51
8.1.1	Метод сечений . . . . .	51
8.1.2	Метод квадратичной аппроксимации . . . . .	52
8.2	Многомерные экстремумы . . . . .	52
8.2.1	Симплексный поиск . . . . .	53
8.2.2	Поиск на кубической решетке . . . . .	53
8.2.3	Метод покоординатного спуска . . . . .	53
8.2.4	Градиентный метод . . . . .	54
8.2.5	Метод наискорейшего спуска . . . . .	54
8.2.6	Метод Хука-Дживса . . . . .	54
8.2.7	Метод квадратичной аппроксимации . . . . .	55

## Глава 1

# Интерполяция

*Интерполяцией* называются процедуры нахождения значения функции, заданной в конечном множестве точек в некоторой области, в тех точках внутри области, где значение функции не задано. Нахождение значения функции вне заданной области называется *экстраполяцией*.

Методы интерполяции разделяются на *глобальные* и *локальные*. В глобальных методах ищется единая функция, проходящая через все заданные точки.

В локальных методах вся область разбита на участки и на каждом участке строится своя интерполяционная функция, с той или иной степенью гладкости сшиваемая с такими же функциями соседних участков.

### 1.1 Метод Лагранжа полиномиальной интерполяции

Через две точки с координатами  $(x_1, y_1)$  и  $(x_2, y_2)$  однозначно проводится прямая  $y(x)$ :

$$y(x) = y_1 \frac{x - x_2}{x_1 - x_2} + y_2 \frac{x - x_1}{x_2 - x_1} \quad (1.1)$$

Это выражение состоит из двух слагаемых, имеющих линейными множителями  $y_1$  и  $y_2$ , каждое из которых линейно по  $x$ , причем при  $x = x_1$

множитель перед  $y_1$  обращается в 1, а перед  $y_2$  в 0; При  $x = x_2$ , наоборот, множитель перед  $y_1$  обращается в 0, а перед  $y_2$  в 1, что гарантирует прохождение прямой через заданные точки. То, что полученная кривая – прямая, определяется линейностью каждого слагаемого, а, следовательно, и всей формулы, по  $x$ .

Лагранж распространил этот метод на случай  $n$  точек с координатами  $(x_1, y_1), (x_2, y_2) \dots (x_n, y_n)$ . Конструкция формулы:

$$y(x) = \sum_{i=1}^n y_i g_i(x), \quad (1.2)$$

где  $g_i(x)$  – функции отклика – должны обладать уже известным свойством: обращаться в 1 при  $x = x_i$  и в 0 при  $x = x_j$ ;  $j \neq i$ , поэтому при  $x = x_i$  функция принимает значение  $y_i$ :

$$g_i(x_k) = \delta_{ik}. \quad (1.3)$$

Лагранж сконструировал такие функции:

$$\begin{aligned} g_1(x) &= \frac{(x - x_2)(x - x_3) \dots (x - x_n)}{(x_1 - x_2)(x_1 - x_3) \dots (x_1 - x_n)}; \\ g_2(x) &= \frac{(x - x_1)(x - x_3) \dots (x - x_n)}{(x_2 - x_1)(x_2 - x_3) \dots (x_2 - x_n)}; \\ &\dots \\ g_n(x) &= \frac{(x - x_1)(x - x_2) \dots (x - x_{n-1})}{(x_n - x_1)(x_n - x_2) \dots (x_n - x_{n-1})}. \end{aligned} \quad (1.4)$$

Каждая функция отклика, а, следовательно, и все выражение является полиномом степени  $n - 1$  по  $x$ . Полином степени  $n - 1$  имеет  $n$  коэффициентов – ровно столько, сколько задаваемое значений функций.

Функция отклика  $g_k(x)$  – представляет из себя график, когда во всех точках, кроме  $k$ -й заданы нулевые значения, а в  $k$ -й задана единица.

### 1.1.1 Область применения

Лагранжева интерполяция достаточно хорошо работает при небольшом количестве точек (4 – 6). При большем количестве точек степень полинома повышается, и могут возникнуть резкие колебания функции между узлами, хотя она продолжает точно проходить через заданные узлы.

### 1.1.2 Случай постоянного шага

При равноотстоящих значениях аргумента (постоянный шаг), масштабным преобразованием аргумента этот шаг может быть приведен к единице, а сдвигом наименьшая координата может быть выбрана за 0. При заданных  $(n + 1)$ -й точке, координаты узлов тогда принимают значения 0, 1, 2, ...  $n$ . Формула (1.4) в этом случае определяет  $n + 1$  полином  $g_k^n(x)$  степени  $n$  ( $0 \leq k \leq n$ ):

$$g_k^n(x) = \frac{(-1)^{n-k}}{k!(n-k)!} \prod_{s=0, s \neq k}^n (x - s)$$

со свойствами

$$g_k^n(m) = \delta_{km}$$

и следующим отсюда *свойством ортогональности*:

$$\sum_{m=0}^n g_k^n(m) g_l^n(m) = \delta_{kl}.$$

Интерполируемая функция представляется в виде полинома степени  $n$ :

$$y_n(x) = \sum_{k=0}^n y_k g_k^n(x).$$

Представляется полезным вывод изменения функции при добавлении нового узла  $y_{n+1}$ :

$$y_{n+1}(x) = \frac{n+1-x}{n+1} y_n(x) + y_{n+1} \frac{x(x-1)(x-2) \cdots (x-n)}{(n+1)!}.$$

## 1.2 Интерполяция кубическими сплайнами

Имеется  $n + 1$  равноотстоящих вдоль оси  $x$  точек с координатами  $y_0, y_1, y_2, \dots, y_n$ . Нужно провести через них гладкую кривую без разрыва не только первых, но и вторых производных.

Так как по оси  $x$  интервалы равные, изменением мрср они могут быть сделаны равными единице — на каждом участке  $x$  изменяется от 0 до 1.

Полином определяется четырьмя константами:

$$f_i(x) = a_i + b_i x + c_i x^2 + d_i x^3;$$

$$f'_i(x) = b_i + 2c_i x + 3d_i x^2;$$

$$f''_i(x) = 2c_i + 6d_i x.$$

При этом, подставляя  $x = 0$  и  $x = 1$  (левая и правая границы участка), получаем:

$$y_{i-1} = a_i; \quad y_i = a_i + b_i + c_i + d_i; \quad ;$$

Из этих выражений коэффициенты  $i + 1$ -го участка выражаются через коэффициенты  $i$ -го:

$$b_{i+1} = b_i + 2c_i + 3d_i;$$

$$c_{i+1} = c_i + 3d_i.$$

Коэффициент  $d_{i+1}$  выражается через  $y_{i+2}$ :

$$y_{i+2} = y_{i+1} + b_{i+1} + c_{i+1} + d_{i+1},$$

откуда

$$d_{i+1} = y_{i+2} - y_{i+1} - b_{i+1} - c_{i+1} = y_{i+2} - y_{i+1} - b_i - 3c_i - 6d_i.$$

Таким образом, все коэффициенты  $i + 1$ -го участка выражаются через коэффициенты  $i$ -го.

### 1.2.1 Уравнения на концах

Для определения коэффициентов на первом и последнем участках нам не хватает данных ( $y_{-1}$  и  $y_{n+1}$ ), поэтому на этих участках нужно ограничиться квадратичной параболой. Поэтому на самом левом участке полагаем  $d_1 = 0$ . на левом участке  $y = y_0 + a_1 x + b_1 x^2$ , причем при  $x = 1$   $y = y_1$ , откуда  $b_1 = y_1 - y_0 - a_1$  и неопределен всего один коэффициент  $a$ . для того, чтобы добиться  $d_n = 0$ , воспользуемся линейностью связи коэффициентов последующего интервала с коэффициентами предыдущего. Коэффициент  $d_n$  линейно зависит от  $a_1$ :

$$d_n = A + B a_1,$$

где  $A$  и  $B$  пока неизвестные константы. Из этого соотношения видно, что  $d_n$  обращается в нуль при  $a_1 = -A/B$ . Чтобы найти  $A$  и  $B$ , положим

сначала  $a_1 = 0$  и найдем  $d_n = d_n^{(0)}$ , значение которого и равно константе  $A$ . Теперь положим  $a_1 = 1$  и снова вычислим  $d_n = d_n^{(1)}$ . Тогда  $B = d_n^{(1)} - d_n^{(0)}$ , после чего находим на левом конце

$$a_1 = \frac{d_n^{(0)}}{d_n^{(0)} - d_n^{(1)}}.$$

Теперь на левом конце все коэффициенты определены. Сплайны такого типа называются *сплайнами со свободными границами*.

## 1.3 Периодические функции

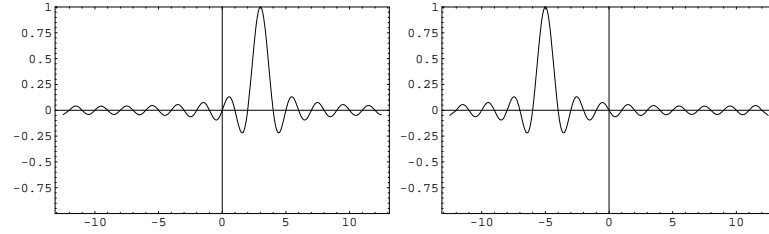
### 1.3.1 Конечная цепочка

Функция с двумя параметрами  $n$  и  $0 \leq k \leq n-1$

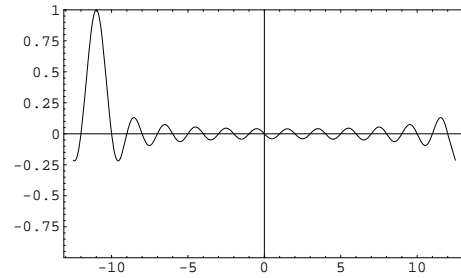
$$u_k^{(n)}(x) = \frac{\sin(\pi(x-k))}{n \sin(\pi \frac{x-k}{n})} \quad (1.5)$$

равна нулю при любом целом  $x$  кроме  $x = k \bmod n$ .

При  $n = 12$ ,  $k = 3$ ,  $k = -5$



При  $k = -11$ :

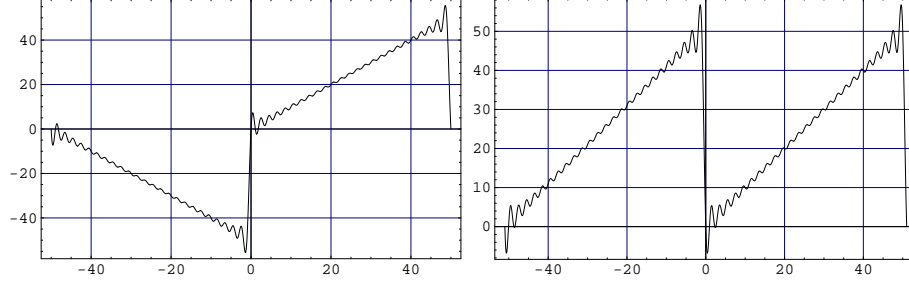




На интервале от  $-n$  до  $n$  функция, представляемая рядом

$$f(x) = \sum_{k=0}^{n-1} k \cdot u_k^{(n)}(x),$$

(“прямая линия”) при  $n = 50$  и  $n = 51$  выглядят по-разному:



Четные функции

$$\frac{\sin(2m+1)x}{\sin x} = 1 + 2(\cos 2x + \cos 4x + \dots + \cos 2mx), \quad (1.6)$$

$$\frac{\sin 2(m+1)x}{\sin x} = 2(\cos x + \cos 3x + \dots + \cos(2m+1)x). \quad (1.7)$$

раскладываются в конечный ряд косинусов  $\cos lx$ ,  $l < n$ .

## 1.4 Бесконечная решетка

При бесконечном числе узлов функция  $u_k^{(n)}(x)$  переходит в функцию

$$g_k(x) = \frac{\sin(\pi(x-k))}{\pi(x-k)}, \quad (1.8)$$

принимаяющая значение 1 при  $x = k$  и 0 при любых других целочисленных значениях  $x$ . Используя эту функцию при заданных значениях интерполируемой функции в некоторых целочисленных узлах оси  $x = k : y_k$  с помощью этой функции можно построить интерполяционную функцию

$$y(x) = \sum_k y_k \frac{\sin(\pi(x-k))}{\pi(x-k)}.$$

### 1.4.1 Ряды Фурье

Для любого числа  $s$  формула геометрической прогрессии:

$$1 + s + s^2 + s^3 \dots + s^{n-1} = \sum_{k=0}^{n-1} (s)^k = \frac{1 - s^n}{1 - s}. \quad (1.9)$$

Если выбрать  $s_m = e^{2\pi i \frac{m}{n}}$ ,  $m < n$

$$\sum_{k=0}^{n-1} (s_m)^k = \frac{e^{2m\pi i} - 1}{e^{2\pi i \frac{m}{n}} - 1} = \begin{cases} n & m = 0 \\ 0 & m \neq 0 \end{cases},$$

А отсюда следует

$$\sum_{k=0}^{n-1} u(m, k) \bar{u}(l, k) = \sum_{k=0}^{n-1} (s_{m-l})^k = \frac{e^{2(m-l)\pi i} - 1}{e^{2\pi i \frac{m-l}{n}} - 1} = \begin{cases} n & m = l \\ 0 & m \neq l \end{cases} \quad (1.10)$$

Функции  $u(m, k) = e^{2\pi i \frac{mk}{n}}$  с  $0 \leq m \leq n-1$  *ортгоналльны* друг другу на множестве точек  $0, 1, 2, \dots, n-1$ .

Если задано  $n$  равноотстоящих точек, которые высега выбором начала и масштаба можно привести к множеству  $0, 1, 2, \dots, n-1$  и в этих точках задан набор и  $n$  величин (значений некоторой функции)  $f_k$ , то с помощью функций  $u(m, k)$  из этих значений можно получить другой набор  $n$  величин – коэффициентов Фурье:

$$a_m = \frac{1}{n} \sum_{k=0}^{n-1} f_k u(m, -k); \quad m = 0, \dots, n-1, \quad (1.11)$$

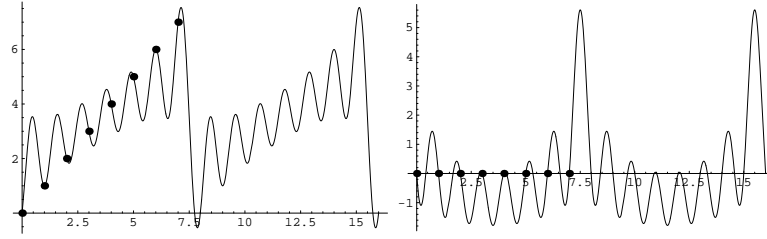
через которые исходные величины восстанавливаются в соответствии с формулами (1.10):

$$f(k) = \sum_{m=0}^{n-1} a_m u(m, k). \quad (1.12)$$

На заданном множестве точек восстановленные значения в точности совпадают с исходными.

Если же теперь разрешить переменной  $k$  принимать непрерывные значения, то получится комплексная функция, являющаяся фурье - интерполяцией исходных значений.

Пример:  $n = 8$ ;  $f_k = 0, 1, \dots, 7$ . Линейная интерполяция – прямая линия. Вещественная и мнимая части фурье - интерполяции:



Точками отмечены исходные значения.  
Обе функции периодичны с периодом  $n = 8$ .

### 1.4.2 Матрица Фурье – преобразования

Функции  $u(m, k)$  можно представить в виде матрицы:

$$[F] = \frac{1}{\sqrt{n}} [e^{2\pi i \frac{m k}{n}}]. \quad (1.13)$$

Матрица  $[F]$  обладает рядом свойств, упрощающих работу с ней.

1. Эта матрица симметрична:  $F_{km} = F_{mk}$ .
2. Эта матрица унитарна:  $F^* \cdot F = I$ .
3. Сопряженные элементы (при  $k > 0$ ,  $m > 0$ ) находятся в самой матрице Фурье:

$$\bar{F}_{km} = \frac{1}{\sqrt{n}} e^{-\frac{2\pi}{n} k m} = \frac{1}{\sqrt{n}} e^{\frac{2\pi}{n} (n-k) m} = \frac{1}{\sqrt{n}} e^{\frac{2\pi}{n} k (n-m)} = F_{(n-k), m} = F_{k, (n-m)}.$$

4. Квадрат матрицы Фурье равен симметричной матрице перестановок.

$$F_{km} F_{ml} = \frac{1}{n} \sum_{m=0}^{n-1} e^{2\pi i m \frac{k+l}{n}} = \begin{cases} 1 & k+l = 0 \pmod{n}; \\ 0 & k+l \neq 0 \pmod{n}. \end{cases}$$

Ненулевые (равные единице) компоненты могут иметь индексы либо  $k = 0$ ,  $l = 0$ , либо  $k + l = n$ , то есть:

$$[F] \cdot [F] = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 \\ 0 & 0 & \cdots & 1 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 1 & \cdots & 0 & 0 \end{bmatrix} = [S]. \quad (1.14)$$

5. Матрица (1.14) переставляет у вектора  $k$ -ю и  $(n - k)$ -ю компоненты. Повторное применение этого преобразования возвращает все точки в исходное состояние – квадрат этой матрицы равен единичной. Собственные значения матрицы  $S$  вследствие этого равны  $\pm 1$ . Следовательно, собственные значения матрицы Фурье  $F$  могут принимать значения лишь  $\pm 1, \pm i$ .
6. Так как  $S^2 = I$ , а  $S = F^2$ , то  $F^4 = I$  – четвертая степень любой матрицы Фурье равна единичной матрице.
7. Несмотря на то, что элементами матрицы  $[F]$  являются корни, возможно, более, чем четвертой степени (каковыми являются  $\pm i$ ), ее детерминант вследствие предыдущего свойства является степенью числа  $i$ .
8. Из предыдущего следует  $(S \cdot F) \cdot F = 1$ . Следовательно, обратная матрица

$$F^{-1} = S \cdot F = F^3 = F \cdot S. \quad (1.15)$$

Обратная матрица получается из исходной перестановкой  $k$  - го и  $(n - k)$  - го столбцов (или строк).

## Глава 2

# Локальные интерполяции

При локальной интерполяции вся исследуемая область разбивается на участки и на каждом участке функция описывается своим уравнением, так чтобы на границах участков функция сшивалась с нужной степенью гладкости.

### 2.1 Линейная интерполяция

Когда нет необходимости в более сложных методах, нужно применять линейную интерполяцию. На каждом участке заданные точки соединяются прямыми.

$$y = y_i + (y_{i+1} - y_i)x/l,$$

где  $l$  — длина интервала, аргумент  $x$  изменяется от 0 до  $l$ .

Основная проблема в применении этого метода (она есть и в других) — поиск участка  $x_i \leq x \leq x_{i+1}$ .

### 2.2 Гладкая интерполяция

Имеется  $n + 1$  равноотстоящих вдоль оси  $x$  точек с координатами  $y_0, y_1, y_2, \dots, y_n$ . Нужно провести через них гладкую (без разрыва первых производных) кривую.

Так как по оси  $x$  интервалы равные, изменением масштаба они могут быть сделаны равными единице — на каждом участке  $x$  изменяется от 0

до 1. В каждой точке первая производная должна определяться через ближайших соседей.

Вычислим сначала производные, а затем, проводя интерполяцию на каждом участке, используя эти значения, мы гарантируем непрерывность функции и ее производных на границах участков.

Наиболее простой способ вычисления первых производных (при равных шагах):

$$y'_i = (y_{i+1} - y_{i-1})/2.$$

Таким образом, на каждом участке (от  $x_{i-1}$  до  $x_i$ ) функция задана четырьмя величинами: 2-мя значениями функции и 2-мя значениями ее производной на левом и правом концах интервала. Минимальная степень полинома 3, ибо такой полином определяется четырьмя константами:

$$\begin{aligned} y_i(x) &= a_i + b_i x + c_i x^2 + d_i x^3; \\ y'_i(x) &= b_i + 2c_i x + 3d_i x^2. \end{aligned}$$

При этом, подставляя  $x = 0$  и  $x = 1$  (левая и правая границы участка), получаем:

$$\begin{aligned} y_i &= a_i; & y_{i+1} &= a_i + b_i + c_i + d_i; \\ y'_i &= b_i; & y'_{i+1} &= b_i + 2c_i + 3d_i. \end{aligned}$$

Отсюда можно выразить  $c$  и  $d$ :

$$c = 3(y_{i+1} - y_i) - y'_{i+1} - 2y'_i; \quad d = 2(y_i - y_{i+1}) + y'_i + y'_{i+1}. \quad (2.1)$$

Таким образом, значения функции и ее первых производных на границах участка полностью определяют функцию на данном участке.

Производные в узле можно выразить через значения функции в соседних узлах:

$$(y_{i+1} - y_{i-1})/2 = b_i; \quad (y_{i+2} - y_i)/2 = b_i + 2c_i + 3d_i.$$

Из этих выражений коэффициенты  $i$ -го участка выражаются через значения функции в четырех точках: на границах участка и двух соседних с ними:  $y_{i-1}$ ,  $y_i$ ,  $y_{i+1}$ ,  $y_{i+2}$ :

$$\begin{aligned} y_i(x) &= y_i + \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2}x + \frac{2y_{i-1} - 5y_i + 4y_{i+1} - y_{i+2}}{2}x^2 + \\ &\quad \frac{y_{i+2} - 3y_{i+1} + 3y_i - y_{i-1}}{2}x^3. \end{aligned} \quad (2.2)$$

Это и есть основная интерполяционная формула. Если интервалы имеют длину  $h$ , то в этой формуле нужно заменить  $x$  на  $x/h$ .

### 2.2.1 Уравнения на концах

Для определения коэффициентов на первом и последнем участках нам не хватает данных ( $y_{-1}$  и  $y_{n+1}$ ), поэтому на этих участках нужно ограничиться квадратичной параболой. Полагая  $d_1 = 0$  и  $d_n = 0$ , находим необходимые для этого значения  $y_{-1}$  и  $y_{n+1}$  и подставляя эти значения в формулу (2.2) при  $i = 1$  и  $i = n$ , получаем на левом

$$y_1(x) = y_0 + \frac{4y_1 - 3y_0 - y_2}{2}x + \frac{y_0 - 2y_1 + y_2}{2}x^2 \quad (2.3)$$

и на правом концах

$$y_n(x) = y_{n-1} + \frac{y_n - y_{n-2}}{2}x + \frac{y_{n-2} - 2y_{n-1} + y_n}{2}x^2. \quad (2.4)$$

### 2.2.2 Дополнительные точки

Проблему концевых участков можно решить еще и другим способом – введением дополнительных фиктивных точек со значениями  $f_{-1}$  для точки левее нулевой и  $f_{N+1}$  – для точки правее самой правой и интерполяцию проводить на всех участках по единым формулам.

Так как на левом участке парабола, продлим ее еще на один шаг влево. Параболу построим по Лагранжу:

$$f(x) = f_0 \frac{(x-1)(x-2)}{2} + f_1 \frac{x(x-1)}{(-1)} + f_2 \frac{x(x-1)}{2}$$

и подставим в нее значение  $x = -1$ :

$$f_{-1} = 3(f_0 - f_1) + f_2. \quad (2.5)$$

Так как на участке  $(-1, 1)$  это единая формула, то значение функции и ее производных в точке 0 слева и справа совпадают.

Аналогичная ситуация получается и на самом правом участке: можно ввести точку с значением

$$f_{N+1} = 3(f_N - f_{N-1}) + f_{N-2} \quad (2.6)$$

и проведенная на последнем участке кривая по общей формуле 5-й степени (она окажется параболой), будет удовлетворять всем изначально установленным условиям.

## Глава 3

# Регрессия. Метод наименьших квадратов

Методы регрессии применяются для обработки экспериментальных данных, когда заведомо известно, что замеренное значение отличается от истинного на некоторую *погрешность*. Поэтому регрессионная кривая не проходит точно через заданные точки, а проводится так, чтобы минимизировать сумму квадратов погрешностей (отклонений по вертикали от регрессионной кривой) всех точек (метод наименьших квадратов). Вводится *регрессионная функция*

$$\bar{y}(x) = \sum_{k=1}^n a_k u_k(x)$$

и вычисляются отклонения экспериментальных точек от регрессионной кривой:

$$\delta_\alpha = y_\alpha - \bar{y}(x_\alpha) = y_\alpha - \sum_{k=1}^n a_k u_k(x_\alpha).$$

Полагается, что эти отклонения имеют нормальное распределение с неопределенной нормой  $\sigma$ . Произведение функций нормального распределения приводит к выражению с экспонентой, в показателе которой стоит величина

$$\Delta^2 = \sum_{\alpha=1}^N (\delta_\alpha)^2,$$

минимизация которой определяет наиболее вероятные значения коэффициентов  $a_i$ .



### 3.1 Проведение наилучшей прямой

Это, как правило, относится к задачам эксперимента: имеется  $N$  точек с координатами  $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_N, y_N)$ , для которых нужно построить наилучшее приближение прямой линией:

$$y(x) = a + bx; \quad y_\alpha = a + bx_\alpha + \delta_\alpha, \quad \delta_\alpha = y_\alpha - a - bx_\alpha, \quad (3.1)$$

где  $\delta_\alpha$  — отклонение  $\alpha$ -й точки от прямой.

Наилучшие коэффициенты  $a$  и  $b$  минимизируют сумму квадратов отклонений всех точек:

$$\Delta^2 = \sum_{\alpha=1}^N \delta_\alpha^2.$$

для сокращения записи введем обозначение для сумм по всем точкам:

$$\sum_{\alpha=1}^N F(\alpha) \equiv \langle F \rangle, \quad (3.2)$$

например,

$$\langle xy \rangle = \sum_{\alpha=1}^N x_\alpha y_\alpha.$$

В этих обозначениях

$$\Delta^2 = \langle \delta^2 \rangle = \langle y^2 \rangle + a^2 N + 2ab \langle x \rangle + b^2 \langle x^2 \rangle - 2a \langle y \rangle - 2b \langle xy \rangle,$$

и наиболее вероятные значения коэффициентов  $a, b$  ( $\bar{a}, \bar{b}$ ) находятся из условия экстремума:

$$\frac{\partial \Delta^2}{\partial a} = 2(\bar{a} N + \bar{b} \langle x \rangle - \langle y \rangle) = 0;$$

$$\frac{\partial \Delta^2}{\partial b} = 2(\bar{a} \langle x \rangle + \bar{b} \langle x^2 \rangle - \langle xy \rangle) = 0.$$

Это линейная система двух линейных уравнений, которую можно представить в матричном виде

$$\begin{vmatrix} N & \langle x \rangle \\ \langle x \rangle & \langle x^2 \rangle \end{vmatrix} \begin{vmatrix} \bar{a} \\ \bar{b} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \langle y \rangle \\ \langle xy \rangle \end{vmatrix}$$

### 3.2 Проведение наилучшей параболы

Как и в предыдущем случае нужно построить для  $N$  точек с координатами  $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_N, y_N)$  наилучшее приближение, но не прямой, а параболой:

$$y(x) = a + bx + cx^2; \quad y_\alpha = a + bx_\alpha + cx_\alpha^2 + \delta_\alpha, \quad \delta_\alpha = y_\alpha - a - bx_\alpha - cx_\alpha^2,$$

где  $\delta_\alpha$  – отклонение  $\alpha$ -й точки от параболы.

Наилучшие коэффициенты  $a$ ,  $b$  и  $c$  минимизируют сумму квадратов отклонений всех точек:

$$\Delta^2 = \langle \delta^2 \rangle = \langle y^2 \rangle + a^2 N + 2ab \langle x \rangle + (b^2 + 2ac) \langle x^2 \rangle + 2bc \langle x^3 \rangle + c^2 \langle x^4 \rangle + \\ - 2a \langle y \rangle - 2b \langle xy \rangle - 2c \langle x^2 y \rangle$$

и находятся из условия экстремума:

$$\frac{\partial \Delta^2}{\partial a} = 2(an + b \langle x \rangle + c \langle x^2 \rangle - \langle y \rangle) = 0;$$

$$\frac{\partial \Delta^2}{\partial b} = 2(a \langle x \rangle + b \langle x^2 \rangle + c \langle x^3 \rangle - \langle xy \rangle) = 0.$$

$$\frac{\partial \Delta^2}{\partial c} = 2(a \langle x^2 \rangle + b \langle x^3 \rangle + c \langle x^4 \rangle - \langle x^2 y \rangle) = 0.$$

Это система трех линейных уравнений, которую можно представить в матричном виде

$$\begin{vmatrix} N & \langle x \rangle & \langle x^2 \rangle \\ \langle x \rangle & \langle x^2 \rangle & \langle x^3 \rangle \\ \langle x^2 \rangle & \langle x^3 \rangle & \langle x^4 \rangle \end{vmatrix} \begin{vmatrix} a \\ b \\ c \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \langle y \rangle \\ \langle xy \rangle \\ \langle x^2 y \rangle \end{vmatrix}$$

### 3.3 Общая линейная регрессия

Регрессия называется *линейной*, если неопределенные коэффициенты в регрессионной кривой ( $a_k$ ) входят линейными множителями перед *базовыми функциями*  $u_k(x)$  при произвольном (линейно независимом) задании последних:

$$\bar{y}(x) = \sum_0^n a_k u_k(x) \equiv a_k u_k(x).$$

(В дальнейшем мы будем полагать, как это принято во многих дисциплинах, что если некоторый индекс повторяется, то по нему берется сумма.) Поэтому рассмотренные выше регрессии прямой линией и параболой относятся к линейной регрессии.

В общем случае, как и в уже рассмотренных частных случаях, в основе лежат отклонения экспериментальных точек от регрессионной кривой:

$$\delta_\alpha = y_\alpha - \bar{y}(x_\alpha) = y_\alpha - a_k u_k(x_\alpha).$$

Байесов подход (см. Приложение) приводит к выделению коэффициентов, минимизирующих это отклонение

$$F(a) = \langle \delta^2 \rangle = \langle y^2 \rangle - 2a_k \langle y u_k \rangle + a_i a_k \langle u_i u_k \rangle = \\ \langle y^2 \rangle - 2a_i B_i + a_i a_k K_{ik}$$

Это положительно определенная функция коэффициентов  $a_i$  достигает минимума в точке, где обращаются в нуль ее частные производные по этим коэффициентам. Вследствие квадратичности функции уравнения на ее минимум оказываются линейными по  $a_i$ . Если обозначить

$$B_i = \langle y u_i \rangle = \sum_{\alpha=1}^N y_\alpha u_i(x_\alpha)$$

и

$$K_{ik} = \langle u_i u_k \rangle = \sum_{\alpha=1}^N u_i(x_\alpha) u_k(x_\alpha), \quad (3.3)$$

то уравнения минимума

$$\frac{\partial F(a)}{\partial a_i} = 2(-B_i + K_{ik} a_k)$$

определяют минимизирующие коэффициенты

$$\bar{a}_i = (K^{-1})_{ik} B_k \quad (3.4)$$

Значение функции в минимуме

$$F(a) = F(\bar{a}) + K_{ij}(a_i - \bar{a}_i)(a_j - \bar{a}_j) = \\ \sum_{\alpha=1}^N (y_\alpha - \bar{a}_i u_i(x_\alpha))^2 + K_{ij}(a_i - \bar{a}_i)(a_j - \bar{a}_j)$$

равно

$$F(\bar{a}) \equiv \Delta^2 = \sum_{\alpha=1}^N (y_\alpha - \bar{a}_i u_i(x_\alpha))^2 \quad (3.5)$$

– сумме квадратов отклонений всех точек от регрессионной кривой.

### 3.4 Регрессия сплайнами

Для ее реализации также нужно получить массив значений функции  $(\bar{y}_i)$  указанным выше образом.

Сплайновая регрессия может быть получена из вариационного принципа. Кривизна кривой при малых отклонениях ее от оси  $x$  приблизительно равна второй производной. Минимизируя интеграл по  $x$  от квадрата второй производной при задании точного прохождения кривой через заданные точки, получается кривая минимальной кривизны, проходящая через заданные точки. Однако, при регрессии мы можем заменить условие точного прохождения кривой через узловые точки условием одновременной с минимумом критичны минимизацией суммы квадратов отклонений кривой в узлах от заданных значений:

$$Q = \frac{1}{2} \int_0^l (y'')^2 dx + \frac{\lambda}{2} \sum_0^n (y_i - \bar{y}_i)^2,$$

где константа  $\lambda$  определяет

$$y'''' + \lambda \sum_0^n (y_i - \bar{y}_i) \delta(x - x_i) = 0.$$

Интегрируя это уравнение в окрестности  $i$ -й границы, получим связь между скачком третьей производной в узле и смещением кривой по вертикали от заданного узла:

$$y'''_{i-} - y'''_{i+} = \lambda(\bar{y}_i - y_i). \quad (3.6)$$

На интервалах между заданными точками кривая подчиняется уравнению  $y'''' = 0$ , то есть является кубическим полиномом, как и в случае сплайновой интерполяции:

$$\begin{aligned} y_k(x) &= a_k + b_k x + c_k x^2 + d_k x^3; \\ y'_k(x) &= b_k + 2c_k x + 3d_k x^2; \\ y''_k(x) &= 2c_k + 6d_k x; \quad y'''_k(x) = 6d_k. \end{aligned}$$

Сшивание вплоть до вторых производных приводит к связи коэффициентов на  $(k-1)$ -м и  $k$ -м участках:

$$\begin{aligned} a_k &= a_{k-1} + b_{k-1} + c_{k-1} + d_{k-1}; \\ b_k &= b_{k-1} + 2c_{k-1} + 3d_{k-1}; \\ c_k &= c_{k-1} + 3d_{k-1}. \end{aligned}$$

А из уравнения (3.6) следует связь и на коэффициенты  $d_k$ :

$$d_k = (1 + \lambda)d_{k-1} + \lambda(a_{k-1} + b_{k-1} + c_{k-1}). \quad (3.7)$$

Эти четыре соотношения, как и в случае сплайновой интерполяции определяют коэффициенты полинома на  $k$ -м участке через коэффициенты на  $(k-1)$ -м и заданное значение функции на их границе. Интегрируя это уравнение в окрестности  $i$ -й границы, получим связь между скачком третьей производной в узле и смещением кривой по вертикали от заданного узла:

$$y'''_{i\leftarrow} - y'''_{i\rightarrow} = 6\lambda(\bar{y}_i - y_i). \quad (3.8)$$

На интервалах между заданными точками кривая подчиняется уравнению  $y'''' = 0$ , то есть является кубическим полиномом, как и в случае сплайновой интерполяции:

$$\begin{aligned} y_k(x) &= a_k + b_k x + c_k x^2 + d_k x^3; \\ y'_k(x) &= b_k + 2c_k x + 3d_k x^2; \\ y''_k(x) &= 2c_k + 6d_k x; \quad y'''(x) = 6d_k. \end{aligned}$$

Сшивание вплоть до вторых производных приводит к связи коэффициентов на  $(k-1)$ -м и  $k$ -м участках:

$$\begin{aligned} a_k &= a_{k-1} + b_{k-1} + c_{k-1} + d_{k-1}; \\ b_k &= b_{k-1} + 2c_{k-1} + 3d_{k-1}; \\ c_k &= c_{k-1} + 3d_{k-1}. \end{aligned} \quad (3.9)$$

А из уравнения (3.8) следует связь и на коэффициенты  $d_k$ :

$$d_k = d_{k-1} + \lambda(\bar{y}_k - a_k). \quad (3.10)$$

Эти четыре соотношения, как и в случае сплайновой интерполяции определяют коэффициенты полинома на  $k$ -м участке через коэффициенты на  $(k-1)$ -м и заданное значение функции на их границе.

### 3.4.1 Граничные участки

Как и при интерполяции сплайнами граничные участки (самый левый и самый правый) нужно рассматривать отдельно.

$$\begin{aligned} \delta Q &= \int y'' \delta y'' dx + 6\lambda \sum_{k=0}^n (y_k - \bar{y}_k) \delta y(x_k) = \\ &\quad \sum_{k=0}^n (y'' \delta y' - y''' \delta y + \\ c_0 &= 0; \quad c_n = 0; \quad d_0 + \lambda(a_0 - \bar{y}_0) = 0. \end{aligned}$$

$$c_n = 0; \quad \delta = d_n + \lambda(a_n - \bar{y}_n) = 0$$

Из-за линейности соотношений (3.9-3.10), связывающих коэффициенты на соседних участках, коэффициенты на последнем участке линейно выражаются через коэффициенты на первом:

$$\delta = d_n + \lambda(a_n - \bar{y}_n) = A a_0 + B b_0 + K;$$

$$c \equiv c_n = C a_0 + D b_0 + L.$$

Вычислим их

при  $a_0 = 0$ ,  $b_0 = 0$  и обозначим рассогласования при этом

$$\delta_{00} = K; \quad c_{00} = L;$$

При  $a_0 = 1$ ,  $b_0 = 0$ :

$$\delta_{10} = K + A; \quad c_{10} = C + L;$$

При  $a_0 = 0$ ,  $b_0 = 1$ :

$$\delta_{01} = K + B; \quad c_{01} = D + L,$$

откуда

$$K = \delta_{00}; \quad A = \delta_{10} - \delta_{00}; \quad B = \delta_{01} - \delta_{00};$$

$$L = c_{00} \quad C = c_{10} - c_{00}; \quad D = c_{01} - c_{00}.$$

$$DD = AD - BC = (\delta_{10}c_{01} - \delta_{01}c_{10}) + \delta_{00}(c_{10} - c_{01}) + c_{00}(\delta_{01} - \delta_{10}).$$

$$a_0 = \frac{BL - DK}{AD - BC} = \frac{\delta_{01}c_{00} - c_{01}\delta_{00}}{DD};$$

$$b_0 = \frac{CK - AL}{AD - BC} = \frac{\delta_{00}c_{10} - c_{00}\delta_{10}}{DD}.$$

## Глава 4

# Решение уравнений

### 4.1 Численное решение уравнений

Численному решению уравнения

$$f(z) = 0 \quad (4.1)$$

должно предшествовать хотя бы грубое исследование вопросов существования и положения корней. Решения могут быть проверены подстановкой.

#### 4.1.1 Линейное уравнение

$$f(z) = a z + b; \quad f(z_0) = 0; \quad z_0 = -\frac{b}{a} \quad (4.2)$$

По Лагранжу функция определяется двумя точками

$$f(z) = f(z_1) \frac{z - z_2}{z_1 - z_2} + f(z_2) \frac{z - z_1}{z_2 - z_1}.$$

Отсюда  $f(z_0) = 0$  при

$$z_0 = -\frac{b}{a} = \frac{z_2 f(z_1) - z_1 f(z_2)}{f(z_1) - f(z_2)}. \quad (4.3)$$

Для линейной функции корень находится за один шаг для совершення которого нужно вычислить функцию в двух точках.

### 4.1.2 Метод секущих

Если функция нелинейная, то за один шаг не находится. В формуле (4.3)  $z_1 \rightarrow z_{j-1}$ ,  $z_2 \rightarrow z_j$ ,  $z_0 \rightarrow z_{j+1}$ :

$$z_{j+1} = \frac{z_j f(z_{j-1}) - z_{j-1} f(z_j)}{f(z_{j-1}) - f(z_j)}. \quad (4.4)$$

Далее  $z_{j+1} \rightarrow z_j$ , но либо  $z_j \rightarrow z_{j-1}$ , либо  $z_{j-1}$  не меняется.

### 4.1.3 Итерационные методы

Уравнение (4.1) приводится к виду

$$z = \varphi(z); \quad z^{i+1} = \varphi(z^i). \quad (4.5)$$

Имеются различные способы приведения уравнения (4.1) к виду (4.5):

$$\begin{aligned} z^{j+1} &= z^j - k f(z^j); \\ z^{j+1} &= z^j - \frac{f(z^j)}{f'(z^j)}; \\ z^{j+1} &= z^j - \frac{f(z^j)}{f'(z^j)} - \frac{(f(z^j))^2 f''(z^j)}{2(f'(z^j))^2}. \end{aligned}$$

В окрестности кратных или близлежащих корней итерационные методы могут расходиться.

## 4.2 Методы сканирования

### 4.2.1 Поиск интервала с корнем

1. Выбирается начальная точка  $x_0$ , вычисляется  $f_0 = f(x_0)$ .
2. Выбирается шаг  $h$  (не очень маленький) по  $x$  и вычисляется  $f_1 = f(x_0 + h)$ .



3. Если  $f_0$  и  $f_1$  имеют противоположные знаки, то корень непрерывной функции находится на интервале  $[x_0, x_1]$ .
4. Если  $|f_1| > |f_0|$ , то нужно сменить направление поиска, сменив знак  $h$  и вернуться к пункту 2.
5. Если  $|f_1| < |f_0|$ , то поиск идет в правильном направлении, нужно принять  $x_1$  за  $x_0$  — новую начальную точку,  $f_1$  за  $f_0$  и повторить с пункта 2.

#### 4.2.2 Деление отрезка пополам (“дихотомия”)

После того, как интервал найден, можно искать корень, последовательно деля отрезок пополам до достижения нужной точности, отбрасывая ту точку, в которой функция имеет тот же знак, что и в середине отрезка.

#### 4.2.3 Метод “золотого сечения”

Если на концах отрезка функция имеет противоположные знаки, то корень находится внутри отрезка. Однако модуль функции в одной точке может быть больше, чем в другой, что говорит о том, что она, вероятно, дальше от корня. Поэтому лучше отрезок делить не пополам, а приближая к точке, где модуль меньше. Один из популярных алгоритмов учета модулей для неравного деления — метод золотого сечения.

$$\frac{x}{1} = \frac{1-x}{x}; \quad x^2 + x - 1 = 0; \quad x = \frac{-1 + \sqrt{5}}{2} = 0.618.$$

Если длина интервала  $h$ , то точку нужно выбрать на расстоянии  $0.618h$  от точки, в которой модуль функции больше.

## Глава 5

# Решение систем линейных уравнений и обращение матриц

### 5.1 Решение систем линейных уравнений

Систему линейных уравнений

$$\begin{aligned}a_{11} x_1 + a_{12} x_2 + a_{13} x_3 + \dots + a_{1n} x_n &= y_1 \\a_{21} x_1 + a_{22} x_2 + a_{23} x_3 + \dots + a_{2n} x_n &= y_2 \\&\dots \\a_{n1} x_1 + a_{n2} x_2 + a_{n3} x_3 + \dots + a_{nn} x_n &= y_n\end{aligned}\tag{5.1}$$

можно записать в матричном виде

$$[a] \cdot [x] = [y].\tag{5.2}$$

Здесь

$$[a] = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \dots & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \dots & a_{nn} \end{bmatrix}; \quad [x] = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \dots \\ x_n \end{bmatrix}; \quad [y] = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \dots \\ y_n \end{bmatrix}\tag{5.3}$$

Решение матричного уравнения (5.2) – через обратную матрицу

$$[a]^{-1} \cdot [a] = [\mathbf{1}] = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix}. \quad (5.4)$$

Решение

$$[\mathbf{1}] \cdot [\mathbf{x}] = [\mathbf{x}]; \quad [\mathbf{x}] = [\mathbf{a}]^{-1} \cdot [\mathbf{y}]. \quad (5.5)$$

### 5.1.1 Специальные матрицы

- Диагональные  $N = n$ :

$$[D] = \begin{bmatrix} a_{11} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & a_{22} & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & a_{nn} \end{bmatrix}; \quad [D]^{-1} = \begin{bmatrix} a_{11}^{-1} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & a_{22}^{-1} & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & a_{nn}^{-1} \end{bmatrix} \quad (5.6)$$

- Верхняя треугольная  $N = n(n+1)/2$ :

$$[Ut] = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ 0 & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & a_{nn} \end{bmatrix}. \quad (5.7)$$

- Нижняя треугольная  $N = n(n+1)/2$ :

$$[Dt] = \begin{bmatrix} a_{11} & 0 & \dots & 0 \\ a_{21} & a_{22} & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{bmatrix}. \quad (5.8)$$

- Специальная верхняя треугольная  $N = n(n-1)/2$ :

$$[Us] = \begin{bmatrix} 1 & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ 0 & 1 & \dots & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix}. \quad (5.9)$$

- Специальная нижняя треугольная  $N = n(n-1)/2$ :

$$[Ds] = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ a_{21} & 1 & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & 1 \end{bmatrix}. \quad (5.10)$$

- Антисимметричная  $N = n(n-1)/2$ :

$$[A] = \begin{bmatrix} 0 & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ -a_{12} & 0 & \cdots & a_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ -a_{1n} & -a_{2n} & \cdots & 0 \end{bmatrix}. \quad (5.11)$$

- Симметричная  $N = n(n+1)/2$ :

$$[S] = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{12} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{1n} & a_{2n} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix}. \quad (5.12)$$

- Ленточная симметричная  $N = 2n-1$ :

$$[L] = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ a_{12} & a_{22} & a_{23} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & a_{23} & a_{33} & a_{34} & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & \cdots & 0 & a_{n-3 \ n-2} & a_{n-1 \ n-1} & a_{n-1 \ n} \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & a_{n-1 \ n} & a_{nn} \end{bmatrix}. \quad (5.13)$$

- Теплицева  $a_{ij} = f_{i-j}$ ;  $N = n$ , симметричная теплицева  $N = [n/2] + 1$ :

$$[T] = \begin{bmatrix} a & b & c & d \\ d & a & b & c \\ c & d & a & b \\ b & c & d & a \end{bmatrix}; \quad [Ts] = \begin{bmatrix} a & b & c & b \\ b & a & b & c \\ c & b & a & b \\ b & c & d & a \end{bmatrix} \quad (5.14)$$

### 5.1.2 Теоремы о разложении

Единичная матрица является диагональной, симметричной, верхней треугольной, нижней треугольной, специальной верхней треугольной, специальной нижней треугольной, теплицевой.

**Теорема 1** Произведение диагональных матриц есть диагональная матрица.

**Теорема 2** Произведение верхних треугольных матриц есть верхняя треугольная матрица.

Произведение нижних треугольных матриц есть нижняя треугольная матрица.

Произведение теплицевых матриц есть теплицева матрица.

**Теорема 3** Матрица, обратная диагональной матрице есть диагональная матрица.

Матрица, обратная верхней треугольной матрице есть верхняя треугольная матрица.

Матрица, обратная нижней треугольной матрице есть нижняя треугольная матрица.

Матрица, обратная теплицевой матрице есть теплицева матрица.

- По симметрии –

$$[M] = [A] + [S]; \quad A_{ij} = \frac{1}{2} (M_{ij} - M_{ji}); \quad S_{ij} = \frac{1}{2} (M_{ij} + M_{ji}).$$

- Треугольные матрицы

$$[M] = [Dt] \cdot [Us] = [Ds] \cdot [Ut]; \quad [M] = [Ut_1] \cdot [Ds_1] = [Us_1] \cdot [Dt_1].$$

$$[M] = [Ds] \cdot [D] \cdot [Us] = [Us_1] \cdot [D_1] \cdot [Ds_1].$$

- Разложение симметричной матрицы

$$[S] = [Dt] \cdot [Dt]^T = [Ut] \cdot [Ut]^T = [Ds] \cdot [D] \cdot [Ds]^T = [Us] \cdot [D_1] \cdot [Us]^T.$$

## 5.2 Обращение матриц

### 5.2.1 Обращение специальных матриц

- Диагональная

$$a_{ii} x_i = y_i; \quad x_i = a_{ii}^{-1} y_i.$$

- Нижняя треугольная

$$a_{11} x_1 = y_1; \quad a_{21} x_1 + a_{22} x_2 = y_2; \quad a_{31} x_1 + a_{32} x_2 + a_{33} x_3 = y_3; \quad \dots$$

$$x_1 = a_{11}^{-1} y_1; \quad x_2 = \frac{y_2}{a_{22}} - \frac{a_{21} y_1}{a_{11} a_{22}}; \quad \dots$$

- Верхняя треугольная – тот же алгоритм с конца:

$$a_{nn} x_n = y_n; \quad a_{n-1 n} x_n + a_{n-1 n-1} x_{n-1} = y_{n-1}; \quad \dots$$

$$x_n = a_{nn}^{-1} y_n; \quad x_{n-1} = \frac{y_{n-1}}{a_{n-1 n-1}} - \frac{a_{n-1 n} y_n}{a_{nn} a_{n-1 n-1}}; \quad \dots$$

## 5.3 Методы исключения

### 5.3.1 Метод исключения Гаусса

$$\left. \begin{array}{ccccccc} a_{11} x_1 + a_{12} x_2 + & \dots & + a_{1n} x_n & = & b_1 \\ a_{21} x_1 + a_{22} x_2 + & \dots & + a_{2n} x_n & = & b_2 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n1} x_1 + a_{n2} x_2 + & \dots & + a_{nn} x_n & = & b_n \end{array} \right\} \quad (5.15)$$

Из первого уравнения выражаем  $x_1$

$$x_1 = \frac{1}{a_{11}} (b_1 - a_{12} x_2 - \dots - a_{1n} x_n). \quad (5.16)$$

Затем, умножая вторую строку на  $a_{11}$ , а первую на  $a_{21}$  и вычитая, исключаем из второй строки  $x_1$ :

$$(a_{22} a_{11} - a_{12} a_{21}) x_2 + (a_{23} a_{11} - a_{13} a_{21}) x_3 + \dots = (a_{11} b_2 - a_{21} b_1),$$

и проделывая то же самое со следующими строками, получаем систему  $n - 1$  уравнений с  $n - 1$  переменными:

$$\left. \begin{array}{ccccccc} a_{22}^{(1)} x_2 + a_{23}^{(1)} x_3 + & \dots & + a_{2n}^{(1)} x_n & = & b_2^{(1)} \\ a_{32}^{(1)} x_2 + a_{33}^{(1)} x_3 + & \dots & + a_{3n}^{(1)} x_n & = & b_3^{(1)} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n2}^{(1)} x_2 + a_{n3}^{(1)} x_3 + & \dots & + a_{nn}^{(1)} x_n & = & b_n^{(1)} \end{array} \right\}, \quad (5.17)$$

где

$$a_{ij}^{(1)} = a_{11} a_{ij} - a_{i1} a_{1j}; \quad b_i^{(1)} = a_{11} b_i - a_{i1} b_1. \quad (5.18)$$

Теперь все можно повторять сначала, исключая уже  $x_2$ . Получилась *рекурсивная схема*. Исключив  $x_1, x_2, \dots, x_{k-1}$  получаем систему из  $n - k + 1$  уравнений с  $n - k + 1$  переменными:

$$\left. \begin{array}{cccccc} a_{kk}^{(k-1)} x_k + a_{k, k+1}^{(k-1)} x_{k+1} + & \dots & + a_{kn}^{(k-1)} x_n & = & b_k^{(k-1)} \\ a_{k+1, k}^{(k-1)} x_k + a_{k+1, k+1}^{(k-1)} x_{k+1} + & \dots & + a_{k+1, n}^{(k-1)} x_n & = & b_{k+1}^{(k-1)} \\ & \ddots & & & \ddots \\ a_{nk}^{(k-1)} x_k + a_{n, k+1}^{(k-1)} x_{k+1} + & \dots & + a_{nn}^{(k-1)} x_n & = & b_n^{(k-1)} \end{array} \right\}, \quad (5.19)$$

где

$$\begin{aligned} a_{ij}^{(k)} &= a_{kk}^{(k-1)} a_{ij}^{(k-1)} - a_{ik}^{(k-1)} a_{kj}^{(k-1)}; \\ b_i^{(k)} &= a_{kk}^{(k-1)} b_i^{(k-1)} - a_{ik}^{(k-1)} b_k^{(k-1)}; \quad i, j \geq k. \end{aligned} \quad (5.20)$$

При этом

$$x_k = \frac{1}{a_{kk}} (b_k^{(k-1)} - a_{k, k+1}^{(k-1)} x_{k+1} - \dots - a_{kn}^{(k-1)} x_n). \quad (5.21)$$

В частности, подставив  $k = 1$ , получим формулы (5.18) и (5.16).

### 5.3.2 Компактная схема исключения

Матрица (5.15) приводится к верхней диагональной

$$\left. \begin{array}{cccc} x_1 + \alpha_{12} x_2 + \alpha_{13} x_3 + \dots + \alpha_{1n} x_n & = & \beta_1 \\ x_2 + \alpha_{23} x_3 + \dots + \alpha_{2n} x_n & & \beta_2 \\ & \dots & \dots & \dots \\ & x_n & = & \beta_n \end{array} \right\} \quad (5.22)$$

и из полученной системы находятся  $x_n, x_{n-1}, \dots, x_2, x_1$ .

Коэффициенты  $\alpha, \beta$ , а также промежуточные коэффициенты  $\gamma$  образуют  $(n+1) \times n$  матрицу:

$$\begin{array}{cccccc} \gamma_{11} & \alpha_{12} & \alpha_{13} \dots & \alpha_{1n} & \beta_1 \\ \gamma_{21} & \gamma_{22} & \alpha_{23} \dots & \alpha_{2n} & \beta_2 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \gamma_{n1} & \gamma_{n2} & \gamma_{n3} \dots & \gamma_{nn} & \beta_n \end{array}$$

$$\gamma_{i1} = a_{i1} \quad (i = 1, 2, \dots, n); \quad \alpha_{1k} = \frac{a_{1k}}{a_{11}} \quad (k = 2, 3, \dots, n);$$

$$\begin{aligned}\gamma_{ik} &= a_{ik} - \sum_{j=1}^{k-1} \gamma_{ij} \alpha_{jk} \quad (i, k = 2, 3, \dots, n; i > k); \\ \alpha_{ik} &= \frac{1}{\gamma_{ii}} \left( a_{ik} - \sum_{j=1}^{k-1} \gamma_{ij} \alpha_{jk} \right) \quad (i, k = 2, 3, \dots, n; i < k); \\ \beta_1 &= \frac{b_1}{a_{11}}; \quad \beta_i = \frac{1}{\gamma_{ii}} \left( b_i - \sum_{j=1}^{i-1} \gamma_{ij} \beta_j \right) \quad (i = 2, 3, \dots, n).\end{aligned}$$

## 5.4 Итерационные методы

### 5.4.1 Система уравнений и экстремальные задачи

Условия экстремума (минимума) квадратичной функции

$$f = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_{ij} x_i x_j - \sum_{i=1}^n b_i x_i; \quad \frac{\partial f}{\partial x_i} = 0 \quad (5.23)$$

приводит к системе линейных уравнений (5.2).

Итерационный поиск минимума

$$x_i^{(j+1)} = x_i^{(j)} + \lambda^{(j)} v_i^{(j)} \quad (i = 1, 2, \dots, n; j = 0, 1, 2, \dots), \quad (5.24)$$

### 5.4.2 Простая итерация

$$x_i^{(j+1)} = x_i^{(j)} - \lambda^{(j)} \frac{1}{a_{ii}} \left( \sum_{k=1}^n a_{ik} x_k^{(j)} - b_i \right) \quad (i = 1, 2, \dots, n; j = 0, 1, 2, \dots).$$

### 5.4.3 Метод Зайделя

Уже найденные новые координаты сразу используются для нахождения последующих.

$$\begin{aligned}x_i^{(j+1)} &= x_i^{(j)} - \frac{1}{a_{ii}} \left( \sum_{k=1}^{i-1} a_{ik} x_k^{(j+1)} + \sum_{k=i}^n a_{ik} x_k^{(j)} - b_i \right) \\ &\quad (i = 1, 2, \dots, n; j = 0, 1, 2, \dots).\end{aligned}$$



#### 5.4.4 Метод координатной релаксации

На каждом шаге уничтожается наибольшая по абсолютной величине невязка  $f_i^{(j)}$  путем исправления только одного  $x_i$ :

$$x_i^{(j+1)} = x_i^{(j)} - \frac{f_i^{(j)}}{a_{ii}}; \quad f_i^{(j)} = \sum_{k=1}^n a_{ik} x_k^{(j)} - b_i;$$

$$x_k^{(j+1)} = x_k^{(j)} \quad k \neq i.$$

#### 5.4.5 Проекционный метод (алгоритм Качмаржа)

Каждое уравнение системы  $\sum_{j=1}^n a_{ij} x^j - b_i = 0$  — это уравнение  $(n-1)$ -мерной гиперплоскости в  $n$ -мерном пространстве. Например,  $a_{i1}x + a_{i2}y - b_i = 0$  — уравнение прямой на плоскости,  $a_{i1}x + a_{i2}y + a_{i3}z - b_i = 0$  — уравнение плоскости.

Пересечение  $n$  не совпадающих гиперплоскостей и есть точка — решение.

Коэффициенты  $a_{ij}$  пропорциональны нормали к  $i$ -й гиперповерхности, а

$\sum_{j=1}^n a_{ij} x^j$  — проекция вектора с координатами  $x^j$  на нормаль.

Алгоритм Качмаржа состоит в том, что из исходной точки производится сдвиг по нормали к одной из гиперповерхностей до пересечения с ней. Затем из этой точки — сдвиг по нормали ко второй гиперповерхности до пересечения с ней и т. д., пока не будет достигнута желаемая точность.

Сдвиг по нормали к  $i$ -й гиперповерхности:

$$\bar{x}^j = x^j + t a_{ij}$$

Параметр  $t$  нужно выбрать так, чтобы  $i$ -е уравнение выполнялось точно:

$$\sum_{j=1}^n a_{ij} \bar{x}^j = \sum_{j=1}^n a_{ij} x^j + t \sum_{j=1}^n (a_{ij})^2 - b_i = 0.$$

Отсюда

$$t = \frac{b_i - \sum_{s=1}^n a_{is} x^s}{\sum_{s=1}^n (a_{is})^2},$$

где  $x^j$  – координаты исходной точки. Теперь, вычислив  $t$ , находим следующую точку. Она точно лежит на  $i$  - й гиперповерхности, но не на других:

$$\bar{x}^j = x^j + \frac{b_i - \sum_{s=1}^n a_{is} x^s}{\sum_{s=1}^n (a_{is})^2} a_{ij}.$$

Затем ищем новую точку на следующей гиперповерхности и т.д.

Алгоритм Качмаржа всегда сходится к решению, хотя и медленно.

## 5.5 Обращение матриц

### 5.5.1 Разбиение на клетки

$$(A^{(m+k \ m+k)}) = \begin{pmatrix} (A_{11}^{(mm)}) & (A_{12}^{(mk)}) \\ (A_{21}^{(km)}) & (A_{22}^{(kk)}) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} X_1^{(m)} \\ X_2^{(k)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} B_1^{(m)} \\ B_2^{(k)} \end{pmatrix}.$$

$$(A_{11}^{(mm)}) X_1^{(m)} + (A_{12}^{(mk)}) X_2^{(k)} = B_1^{(m)};$$

$$(A_{21}^{(km)}) X_1^{(m)} + (A_{22}^{(kk)}) X_2^{(k)} = B_2^{(k)};$$

Умножив первую систему слева на обратную матрицу  $A_{11}$ , выражаем столбец  $X_1$ :

$$X_1 = A_{11}^{-1} (B_1 - A_{12} X_2);$$

$$(A)^{-1} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} \\ C_{21} & C_{22} \end{pmatrix};$$

$$C_{11} = (A_{11} - A_{12} A_{22}^{-1} A_{21})^{-1}; \quad C_{21} = -A_{22}^{-1} A_{21} C_{11}; \quad (5.25)$$

$$C_{22} = (A_{22} - A_{21} A_{11}^{-1} A_{12})^{-1}; \quad C_{12} = -A_{11}^{-1} A_{12} C_{22}.$$

### 5.5.2 Метод окаймления

Предыдущий метод при  $m = n - 1$ ,  $k = 1$ .

Введем матрицу  $a_{ij}^{-1}$ , обратную подматрице  $a_{jk}$  размерности  $(n - 1) \times (n - 1)$  – на единицу меньше, чем у матрицы  $a_{ij}$ :

$$\sum_{j=1}^{n-1} a_{kj}^{-1} a_{jl} = \delta_{kl} = \begin{cases} 1 & (k = l) \\ 0 & (k \neq l) \end{cases} ; \quad k, l < n.$$

Из дополнительной строки матрицы  $a_{ni}$  и столбца  $a_{jn}$  ( $i, j < n$ ) образуем новые столбец и строку

$$c_k = \sum_{j=1}^{n-1} a_{kj}^{-1} a_{jn}; \quad d_k = \sum_{j=1}^{n-1} a_{nj} a_{jk}^{-1}; \quad D = a_{nn} - \sum_{j=1}^{n-1} a_{nk} c_k = a_{nn} - \sum_{k=1}^{n-1} d_k a_{kn}.$$

Тогда элементы обратной  $n \times n$  матрицы выразятся через элементы обратной  $(n-1) \times (n-1)$  матрицы и дополнительные элементы  $a_{in}$ ,  $a_{nn}$ ,  $a_{nj}$ :

$$\tilde{a}_{si}^{-1} = a_{si}^{-1} + \frac{c_s d_i}{D}; \quad \tilde{a}_{sn}^{-1} = -\frac{c_s}{D}; \quad \tilde{a}_{ns}^{-1} = -\frac{d_s}{D}; \quad \tilde{a}_{nn}^{-1} = \frac{1}{D}. \quad (5.26)$$

Этот метод можно применять рекурсивно. Обратим матрицу  $2 \times 2$

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}.$$

$$a_{11}^{-1} = \frac{1}{a_{11}}; \quad c_1 = \frac{a_{12}}{a_{11}}; \quad d_1 = \frac{a_{21}}{a_{11}}; \quad D = a_{22} - \frac{a_{21} a_{12}}{a_{11}}.$$

Теперь по формулам (5.26) вычислим обратную матрицу

$$\tilde{a}_{11}^{-1} = a_{11}^{-1} + \frac{c_1 d_1}{D} = \frac{1}{a_{11}} + \frac{a_{12} a_{21}}{a_{11}^2 (a_{22} - \frac{a_{21} a_{12}}{a_{11}})} = \frac{a_{22}}{a_{11} a_{22} - a_{21} a_{12}}.$$

$$\tilde{a}_{12}^{-1} = -\frac{c_1}{D} = \frac{-a_{12}}{a_{11} a_{22} - a_{21} a_{12}}; \quad \tilde{a}_{21}^{-1} = -\frac{d_1}{D} = \frac{-a_{21}}{a_{11} a_{22} - a_{21} a_{12}};$$

$$\tilde{a}_{22}^{-1} = \frac{1}{D} = \frac{a_{11}}{a_{11} a_{22} - a_{21} a_{12}}.$$

Если теперь эта матрица  $2 \times 2$  является подматрицей матрицы  $3 \times 3$ , то теперь, имея обратную  $2 \times 2$  матрицу, по тому же алгоритму можно вычислить обратную матрицу  $3 \times 3$  и т. д.

## Глава 6

# Системы нелинейных уравнений

Эта глава посвящена проблеме решения системы  $n$  уравнений с  $n$  переменными:

$$\left. \begin{aligned} f^1(x_1, x_2, \dots, x_n) &= 0; \\ f^2(x_1, x_2, \dots, x_n) &= 0; \\ &\dots \\ f^3(x_1, x_2, \dots, x_n) &= 0; \end{aligned} \right\} \quad (6.1)$$

### 6.1 Симплексы

В одномерном случае в методах сканирования осуществляется сдвиг координаты на некоторую величину, графически – на отрезок прямой, который является *одномерным симплексом*. В многомерном пространстве роль сдвигов по отрезкам играет *симплексный сдвиг*.

Симплекс в  $n$ -мерном пространстве определяется координатами  $n+1$  точек.

- Нульмерный симплекс – одна точка
- Одномерный симплекс – отрезок, строится на двух точках.
- Трехмерный симплекс – треугольник, строится на трех точках.

- Четырехмерный симплекс – тетраэдр, строится на четырех точках.

Центр тяжести  $n - 1$  - мерного симплекса

$$\mathbf{r}_c = \frac{1}{n} \sum \mathbf{r}_i; \quad x_c^i = \frac{1}{n} (x_1^i + x_2^i + \dots + x_n^i). \quad (6.2)$$

Инвертирование  $n$  - мерного симплекса в  $n + 1$  - й вершине:

$$\bar{\mathbf{r}}_{n+1} = \mathbf{r}_c - (\mathbf{r}_{n+1} - \mathbf{r}_c) = 2\mathbf{r}_c - \mathbf{r}_{n+1}; \quad \bar{x}_{n+1}^i = \frac{2}{n} (x_1^i + x_2^i + \dots + x_n^i) - x_{n+1}^i. \quad (6.3)$$

Например, в одномерном случае инвертирование вершины  $x_1$ :

$$\bar{x}_1 = \frac{2}{1} (x_2) - x_1 = x_2 + (x_2 - x_1)$$

сдвиг за  $x_2$  на шаг  $(x_2 - x_1)$ .

В двумерном случае инвертирование

$$\bar{\mathbf{r}}_3 = \mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3.$$

В трехмерном

$$\bar{\mathbf{r}}_4 = \frac{2}{3} (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2 + \mathbf{r}_3) - \mathbf{r}_4.$$

### 6.1.1 Симплексное сканирование

В  $n$  - мерном пространстве выбирается  $n + 1$  точек с координатами  $\mathbf{r}_j$ ,  $j = 0, 1, 2, \dots, n$ , в которых осуществляется вычисление значения исследуемых  $n$  функций  $f^i(\mathbf{r}_j) \equiv f_{ij}$  – всего получается  $n(n + 1)$  величин. Если размеры симплекса достаточно малы, внутри его функции можно полагать линейными и поиск решения можно осуществить линейными методами.

В системе линейных уравнений

$$\begin{aligned} a_{11} x_1 + a_{12} x_2 + a_{13} x_3 + \dots + a_{1n} x_n &= y_1 \\ a_{21} x_1 + a_{22} x_2 + a_{23} x_3 + \dots + a_{2n} x_n &= y_2 \\ &\dots \\ a_{n1} x_1 + a_{n2} x_2 + a_{n3} x_3 + \dots + a_{nn} x_n &= y_n \end{aligned} \quad (6.4)$$

$n(n+1)$  коэффициентов  $(a_{ij}, y_i)$  можно выразить через такое же количество значений функций  $f_{ij} = f^i(\mathbf{r}_j)$ , при этом система уравнений (6.4) переходит в систему

$$\sum_{j=0}^n g_j (\mathbf{r}_j - \bar{\mathbf{r}}) = 0, \quad (6.5)$$

где  $\bar{\mathbf{r}}$  – это и есть искомая точка, в которой все функции обращаются в нуль, а  $g_j$  – неприведенные весовые коэффициенты, определяемые как детерминанты матриц

$$g_0 = \det \begin{bmatrix} f_{11} & f_{12} & \cdots & f_{1n} \\ f_{21} & f_{22} & \cdots & f_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ f_{n1} & f_{n2} & \cdots & f_{nn} \end{bmatrix}; \quad (6.6)$$

$$g_1 = -\det \begin{bmatrix} f_{10} & f_{12} & \cdots & f_{1n} \\ f_{20} & f_{22} & \cdots & f_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ f_{n0} & f_{n2} & \cdots & f_{nn} \end{bmatrix}; \quad g_2 = -\det \begin{bmatrix} f_{11} & f_{10} & \cdots & f_{1n} \\ f_{21} & f_{20} & \cdots & f_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ f_{n1} & f_{n0} & \cdots & f_{nn} \end{bmatrix};$$

$$g_k = -\det \begin{bmatrix} f_{11} & \cdots & f_{1\,k-1} & f_{10} & \cdots & f_{1n} \\ f_{21} & \cdots & f_{2\,k-1} & f_{20} & \cdots & f_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ f_{n1} & \cdots & f_{n\,k-1} & f_{n0} & \cdots & f_{nn} \end{bmatrix},$$

– значения функций в нулевой точке стоят на месте  $k$ -го столбца. Знак перед каждым  $g_k$ , кроме нулевого, – отрицательный.

Систему уравнений (6.5) можно переписать в виде

$$\sum_{j=0}^n g_j \mathbf{r}_j = g \bar{\mathbf{r}}; \quad g = \sum_{j=0}^n g_j$$

и решить, разделив на *суммарный вес*  $g$ , введя *приведенные веса* или просто *веса*:

$$\bar{\mathbf{r}} = \sum_{j=0}^n \lambda_j \mathbf{r}_j; \quad \lambda_j = \frac{g_j}{g}; \quad \sum_{j=0}^n \lambda_j = 1. \quad (6.7)$$

Если размеры симплекса приемлемо малы и точка  $\bar{\mathbf{r}}$  лежит внутри симплекса, то ее можно принять за решение.

Точка  $\bar{\mathbf{r}}$  лежит внутри симплекса, если все веса  $\lambda_j$  положительны.

### Трехмерный пример

$$g_1 = -\det \begin{bmatrix} f_{10} & f_{12} & f_{13} \\ f_{20} & f_{22} & f_{23} \\ f_{30} & f_{32} & f_{33} \end{bmatrix}; \quad g_2 = -\det \begin{bmatrix} f_{11} & f_{10} & f_{13} \\ f_{21} & f_{20} & f_{23} \\ f_{31} & f_{30} & f_{33} \end{bmatrix};$$
$$g_3 = -\det \begin{bmatrix} f_{11} & f_{12} & f_{10} \\ f_{21} & f_{22} & f_{20} \\ f_{31} & f_{32} & f_{30} \end{bmatrix}; \quad g_0 = \det \begin{bmatrix} f_{11} & f_{12} & f_{13} \\ f_{21} & f_{22} & f_{23} \\ f_{31} & f_{32} & f_{33} \end{bmatrix};$$

## 6.2 Метод секущих гиперплоскостей

С помощью соотношения (6.5) метод секущих для одномерной задачи можно перенести на многомерную.

- Выбирается  $n + 1$  начальных точек и в них вычисляется  $n(n + 1)$  чисел  $f_{ij}$ .
- Вычисляется  $n + 1$  весовых коэффициентов и по формуле (6.7) находится новая точка  $\mathbf{r}_{n+1}$ .
- Отбрасывается точка, в которой вес  $\lambda_j$  минимальный. (Если все веса  $\lambda_i$  положительны, то искомая точка находится внутри симплекса).
- На оставшихся  $n + 1$  точках производится поиск нового кандидата на точку решения. Критерий остановки – заданная малость отличия функций от нуля.

## 6.3 Метод квазикасательных

Выбирается одна начальная точка  $\mathbf{r}_0$ , в ней вычисляется  $n$  значений функций  $f_{i0}$ . От нее делаются заранее определенные шаги по координатам  $x_j^i = x_0^i + h^i \delta_j^i$  и в этих точках вычисляется еще  $n^2$  значений  $f_{ij}$ .

Затем по формулам (6.5) ищется новая точка. Если она не удовлетворяет критерию завершения, от нее опять делается  $n$  шагов, может быть, уменьшенных и процесс повторяется от новой точки.

Отличие от метода “секущих” — симплекс с вершиной в заданной точке прогнозируем заранее, но вычислять приходится больше значений.

## 6.4 “Дихотомия”

Точка  $\bar{\mathbf{g}}$  лежит внутри симплекса, если все веса  $\lambda_j$  положительны. Если такой симплекс найден, далее нужно искать точку решения внутри него. Выбираются две точки — с наименьшим и наибольшим весами  $\lambda$  и вместо точки с наименьшим весом берется точка, лежащая на середине этой стороны. Ищется новый набор  $\lambda_j$  и т. д., пока не будет достигнута нужная точность.



## Глава 7

# Интегрирование и дифференциальные уравнения

### 7.1 Конечные разности

Пусть  $y = y(x)$  – функция действительного переменного  $x$ . Равноотстоящие значения аргумента

$$x_k = x_0 + k \Delta x \quad (k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots; \Delta x = h > 0).$$

для соответствующих значений функции

$$y_k = y(x_k) = y(x_0 + k \Delta x)$$

определяют **нисходящие разности** (для интерполяции вперед)

$$\Delta y_k = y_{k+1} - y_k;$$

$$\Delta^2 y_k = \Delta y_{k+1} - \Delta y_k = y_{k+2} - 2y_{k+1} + y_k;$$

.....

$$\Delta^r y_k = \Delta^{r-1} y_{k+1} - \Delta^{r-1} y_k = \sum_{j=0}^r (-1)^j \frac{r!}{j! (r-j)!} y_{k+r-j} \quad (7.1)$$

и **восходящие разности** ( для интерполяции назад)

$$\begin{aligned} \nabla y_k &= y_k - y_{k-1} = \Delta y_{k-1}; \\ \nabla^r y_k &= \nabla^{r-1} y_k - \nabla^{r-1} y_{k-1} = \Delta^r y_{k-r}. \end{aligned}$$

Число  $r$  называется порядком разности.

### Центральные разности

$$\begin{aligned} \delta y_k &= y_{k+1/2} - y_{k-1/2}; \\ \delta^r y_k &= \delta^{r-1} y_{k+1/2} - \delta^{r-1} y_{k-1/2}. \end{aligned} \quad (7.2)$$

Например,

$$\delta^2 y_k = y_{k+1} - 2 y_k + y_{k-1}.$$

### 7.1.1 Сдвиг функции

Функцию, сдвинутую по аргументу, можно выразить через разности.  
Нисходящие

$$\begin{aligned} y_{k+1} &= y_k + \Delta y_k; \\ y_{k+2} &= y_k + 2 \Delta y_k + \Delta^2 y_k; \\ y_{k+3} &= y_k + 3 \Delta y_k + 3 \Delta^2 y_k + \Delta^3 y_k; \\ y_{k+m} &= y_k + m \Delta y_k + \sum_{j=2}^m \frac{m!}{j! (m-j)!} \Delta^j y_k. \end{aligned}$$

Восходящие

$$y_{k-m} = y_k - m \nabla y_k - \sum_{j=2}^m \frac{m!}{j! (m-j)!} \nabla^j y_k.$$

Это бывает нужно при аппроксимации дифференциальных уравнений разностными.

## 7.2 Интегрирование

### 7.2.1 Равноотстоящие узлы

Квадратурные формулы Ньютона – Котеса основаны на аппроксимации

$$\int_{x_0}^{x_0+n\Delta x} y(x) dx \approx a_0 y_0 + a_1 y_1 + a_2 y_2 + \dots + a_n y_n,$$

где

$$a_k = \frac{(-1)^{n-k} \Delta x}{k!(n-k)!} \int_0^n \frac{\lambda(\lambda-1)(\lambda-2)\dots(\lambda-n)}{(\lambda-k)} d\lambda. \quad (7.3)$$

п	Правило	$I' \approx \int_{x_0}^{x_0+n\Delta x} y(x) dx = I$	$I - I' \quad (x_0 < \xi < x_0 + n\Delta x)$
1	Трапеций	$\frac{\Delta x}{2}(y_0 + y_1)$	$-\frac{1}{12}\Delta x^3 y''(\xi)$
2	Симпсона	$\frac{\Delta x}{3}(y_0 + 4y_1 + y_2)$	$-\frac{1}{90}\Delta x^5 y^{(4)}(\xi)$
6	Уэддлля	$\frac{41\Delta x}{140}(y_0 + 5y_1 + y_2 + 6y_3 + y_4 + 5y_5 + y_6)$	$-\frac{\Delta x^7}{1400}(10y^{(6)}(\xi) + 9\Delta x^2 y^{(8)}(\xi'))$

### 7.2.2 Квадратурные формулы Гаусса и Чебышева

Интеграл

$$\int_a^b y(x) dx = \int_{-1}^1 \eta(\xi) d\xi$$

после замены переменных

$$x = \frac{b-a}{2}\xi + \frac{a+b}{2}, \quad \eta(\xi) = \frac{b-a}{2} y(x).$$

Если  $y(x)$  – полином степени  $n$ , то и  $\eta(\xi)$  полином той же степени.

Если  $\eta(\xi) = A + B\xi$  – линейная функция, то интеграл определяется только коэффициентом  $A$ :

$$\int_{-1}^1 (A + B\xi) d\xi = 2A = 2\eta(0).$$

Отсюда для любой линейной функции

$$\int_a^b y(x) dx = (b-a) y\left(\frac{a+b}{2}\right). \quad (7.4)$$

Для квадратичного полинома

$$\int_{-1}^1 (A + B\xi + C\xi^2) d\xi = 2\left(A + \frac{C}{3}\right) = 2\left(\eta\left(-\frac{1}{\sqrt{3}}\right) + \eta\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right)\right).$$

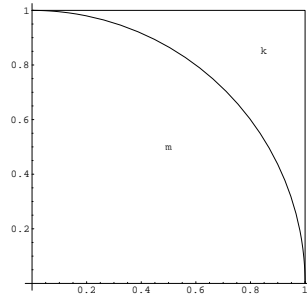
Общая  $n$  - точечная квадратурная формула Гаусса:

$$\int_{-1}^1 \eta(\xi) d\xi \approx \sum_{k=1}^n a_k \eta(\xi_k). \quad (7.5)$$

$n$	$\xi_k$	$a_k$	$n$	$\xi_k$	$a_k$
2	$\pm 0.577350$	1	4	$\pm 0.339981$	0.652145
				$\pm 0.861136$	0.347855
3	0	8/9	5	0	0.568889
	$\pm 0.774597$	5/9		$\pm 0.538469$	0.478629
				$\pm 0.906180$	0.236927

Она в точности выполняется для полинома степени  $2n - 1$ .

### 7.2.3 Метод Монте-Карло



$$\pi/4 \approx \frac{m}{m+k},$$

где  $m$  — число случайно выброшенных точек, попавших внутрь окружности (или другой фигуры), а  $k$  — число не попавших.

## 7.3 Дифференциальные уравнения

1. Одношаговые методы
2. Многошаговые методы

### 7.3.1 Одношаговые методы

Требуется найти решение дифференциального уравнения первого порядка

$$y' = f(x, y), \quad (7.6)$$

удовлетворяющее начальному условию  $y(x_0) = y_0$ .

Выберем фиксированное приращение  $\Delta x = h$  независимой переменной  $x$  и обозначим

$$x_0 + k h \equiv x_k, \quad y(x_k) = y(x_0 + k h) \equiv y_k; \quad f(x_k, y_k) \equiv f_k; \quad (k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots)$$

Простой метод Эйлера:

$$y_{k+1} = y_k + f_k \Delta x \quad (7.7)$$

Улучшенный метод Эйлера:

$$y_{k+1} = y_k + f \left( x_k + \frac{\Delta x}{2}, y_k + f_k \frac{\Delta x}{2} \right) \Delta x \quad (7.8)$$

Другой улучшенный метод Эйлера:

$$y_{k+1} = y_k + \frac{1}{2} (f_k + f(x_{k+1}, y_k + f_k \Delta x)) \Delta x \quad (7.9)$$

### 7.3.2 Метод Рунге-Кутты

Схема предиктор – корректор.

### Метод Рунге-Кутта 2-го порядка

Предиктор:

$$\begin{aligned}k_1 &= f(x_j, y_j) \Delta x \\k_2 &= f(x_{j+1}, y_j + k_1) \Delta x\end{aligned}$$

Корректор:

$$y_{j+1} = y_j + \frac{1}{2}(k_1 + k_2), \quad (7.10)$$

### Метод Рунге-Кутта 4-го порядка

Значение функции в следующей по  $x$  точке определяется выражением

$$y_{j+1} = y_j + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4), \quad (7.11)$$

где

$$\begin{aligned}k_1 &= f_j \Delta x = f(x_j, y_j) \Delta x \\k_2 &= f\left(x_j + \frac{\Delta x}{2}, y_j + \frac{k_1}{2}\right) \Delta x, \\k_3 &= f\left(x_j + \frac{\Delta x}{2}, y_j + \frac{k_2}{2}\right) \Delta x, \\k_4 &= f(x_{j+1}, y_j + k_3) \Delta x.\end{aligned}$$

### 7.3.3 Разностные схемы решения задачи Коши

Они строятся на представлении

$$y_{k+1} = y_k + \int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x, y) dx = y_{k-1} + \int_{x_{k-1}}^{x_{k+1}} f(x, y) dx, \quad (7.12)$$

где  $f(x, y)$  представляется интерполяционным многочленом по трем – пяти точкам  $f_i = f(x_i, y_i)$ .

### Метод Милна предсказание – уточнение

Сначала применяют “предсказывающую” формулу

$$y_{k+1} = y_{k-2} + \frac{4}{3}(2f_k - f_{k-1} + 2f_{k-2})\Delta x \quad (7.13)$$

для получения первого приближения  $f_{k+1}$ , затем вычисляют  $y_{k+1}$  по формуле уточнения

$$y_{k+1} = y_{k-1} + \frac{1}{3}(f_{k+1} + 3f_k + f_{k-1})\Delta x. \quad (7.14)$$

Затем  $k+1$ -я точка принимается  $k$ -й и т.д. и расчет повторяется: сначала идет предсказание по формуле (7.13), а затем уточнение по формуле (7.14).

Для начала вычислений нужно найти  $y_{-1}$ ,  $y_1$ ,  $y_2$ . Их можно построить методом Эйлера.

## 7.4 Системы дифференциальных уравнений

В системе дифференциальных уравнений первого порядка  $n$  иско-  
мых функций  $y^i(x)$ :

$$(y^i)' = f^i(x, y^1, y^2, \dots); \quad i = 1, \dots, n. \quad (7.15)$$

### 7.4.1 Метод Рунге-Кутты

Схема Рунге-Кутты такая же, как и для одной переменной, только у переменных появляется индекс (индекс вверх – номер переменной, индекс вниз – номер шага). Четырехточечная схема Рунге - Кутты:

$$y_{k+1}^i = y_k^i + \frac{1}{6}(k_1^i + 2k_2^i + 2k_3^i + k_4^i), \quad (7.16)$$

где

$$\begin{aligned} k_1^i &= f_k^i \Delta x = f(x_k, y_k^1, y_k^2, \dots) \Delta x \\ k_2^i &= f^i \left( x_k + \frac{\Delta x}{2}, y_k^1 + \frac{k_1^1}{2}, y_k^2 + \frac{k_1^2}{2}, \dots \right) \Delta x, \\ k_3^i &= f^i \left( x_k + \frac{\Delta x}{2}, y_k^1 + \frac{k_2^1}{2}, y_k^2 + \frac{k_2^2}{2}, \dots \right) \Delta x, \\ k_4^i &= f^i(x_{k+1}, y_k^1 + k_3^1, y_k^2 + k_3^2, \dots) \Delta x. \end{aligned}$$

## 7.5 Д.у. высших порядков

$$y'' = f(x, y, y') \quad (7.17)$$

при начальных условиях  $y(x_0) = y_0$ ;  $y'(x_0) = y'_0$

### 7.5.1 Метод Рунге-Кутта

Выполняется интегрирование по обычной схеме РК для производной и интегрирование выражения производной для самой функции:

$$\begin{aligned} y_{k+1} &= y_k + y'_k \Delta x + \frac{1}{6}(k_1 + k_2 + k_3) \Delta x \\ y'_{k+1} &= y'_k + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4), \end{aligned} \quad (7.18)$$

где

$$\begin{aligned} k_1 &= f(x_k, y_k, y'_k) \Delta x, \\ k_2 &= f\left(x_k + \frac{\Delta x}{2}, y_k + y'_k \frac{\Delta x}{2}, y'_k + \frac{k_1}{2}\right) \Delta x, \\ k_3 &= f\left(x_k + \frac{\Delta x}{2}, y_k + y'_k \frac{\Delta x}{2} + \frac{k_1}{4} \Delta x, y'_k + \frac{k_2}{2}\right) \Delta x, \\ k_4 &= f\left(x_{k+1}, y_k + y'_k \Delta x + \frac{k_2}{2}, y'_k + k_3\right) \Delta x, \end{aligned}$$



## Глава 8

# Методы поиска экстремума

Поиск экстремума – минимума или максимума всегда может быть сведен к поиску минимума: если исходно нужен максимум, смена знака функции приводит задачу к поиску минимума.

Минимумов может быть много. Минимум, в котором функция имеет наименьшее значение среди всех минимумов, называется *глобальным минимумом*. Все остальные называются *локальными минимумами*.

Стратегия:

- Нахождение области экстремума.
- Нахождение экстремума внутри локализованной области. Уменьшение области поиска.
- Уменьшение шага поиска.

### 8.1 Одномерные задачи

Совершается обход области с постоянным шагом и изучается поведение функции

#### 8.1.1 Метод сечений

- Деление отрезка пополам

- Деление золотым сечением

### 8.1.2 Метод квадратичной аппроксимации

В трех точках:  $x_1, x_2, x_3$  вычисляются значения функции  $y_1, y_2, y_3$  и по этим трем точкам строится парабола (методом Лагранжа):

$$y(x) = y_1 \frac{(x - x_2)(x - x_3)}{(x_1 - x_2)(x_1 - x_3)} + y_2 \frac{(x - x_1)(x - x_3)}{(x_2 - x_1)(x_2 - x_3)} + y_3 \frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_3 - x_1)(x_3 - x_2)}.$$

Ее экстремум

$$\frac{dy(x)}{dx} = y_1 \frac{(2x - x_2 - x_3)}{(x_1 - x_2)(x_1 - x_3)} + y_2 \frac{(2x - x_1 - x_3)}{(x_2 - x_1)(x_2 - x_3)} + y_3 \frac{(2x - x_1 - x_2)}{(x_3 - x_1)(x_3 - x_2)} = 0$$

определяет новую точку

$$x_4 = \frac{x_1^2(y_2 - y_3) + x_2^2(y_3 - y_1) + x_3^2(y_1 - y_2)}{2(x_1(y_2 - y_3) + x_2(y_3 - y_1) + x_3(y_1 - y_2))}$$

Однако, прежде чем вычислять эту точку, нужно вычислить знаменатель:

- Если он положителен – в точке  $x_4$  минимум параболы (но не обязательно искомой функции).
- Если он отрицателен – в точке  $x_4$  максимум параболы (но не обязательно искомой функции).
- Если он равен нулю – точки лежат на одной прямой.

Затем отбрасывается точка, наиболее удаленная от  $x_4$  и на оставшихся трех точках алгоритм повторяется.

## 8.2 Многомерные экстремумы

Поиск экстремума имеет стратегию:

- Поиск области экстремума. В одномерном случае – шаги в направлении убывания функции, пока она не станет возрастать. Затем можно уменьшить шаг.
- Поиск в найденной области

### 8.2.1 Симплексный поиск

В  $n$ -мерном пространстве выбирается  $n + 1$  начальных точек, в которых вычисляется значение минимизируемой функции, и координаты точки, в которой значение функции максимально (далее всего от минимума) инвертируются по формуле (6.3).

В этой точке также вычисляется значение функции, и если оно опять оказывается максимальным, то минимум находится внутри области, составленной из исходного и инвертируемого симплексов.

В противном случае нужно инвертировать симплекс в вершине с максимальным значением функции. При этом максимальное значение все время уменьшается.

### 8.2.2 Поиск на кубической решетке

Более простая стратегия переноса одномерного поиска на многомерный – разбиение области  $n$ -мерного пространства на  $n$ -мерные кубы – построение  $n$ -мерной кубической решетки: деление по каждой переменной на равные промежутки.

Однако  $n$ -мерный куб имеет  $2^n$  вершин, в отличие от  $n$ -мерного симплекса, имеющего  $n + 1$  вершину, что при больших  $n$  приводит к большому объему вычислений. Например, при минимизации функции 10-и параметров нужно вычислить 11 значений для исходного симплекса и  $2^{10} = 1024$  значения для исходного куба. При инвертировании симплекса нужно вычислить одно дополнительное значение, а у куба  $2^{n-1}$  новых значений. (При  $n = 10$  их 512).

### 8.2.3 Метод покоординатного спуска

Из некоторой начальной точки с координатами  $x_1^0, x_2^0, \dots, x_n^0$  ищется минимум функции одной переменной  $x_1$  при фиксированных значениях  $x_2^0, \dots, x_n^0$ , затем уже при новом значении  $x_1^1$  и фиксированных  $x_2^0, \dots, x_n^0$  ищется одномерный минимум по  $x^2$  и т.д.

Метод универсален, однако учет специфики задачи может позволить менять не одну, а сразу несколько координат для ускорения процесса минимизации.

### 8.2.4 Градиентный метод

Осуществляется одномерная минимизация по переменной  $t$  при изменении координат  $\Delta x^i = t n^i$ , где вектор  $n^i$  определяется "разностным градиентом":

$$n^i = -a^i \frac{f(x^1, \dots, x^i + h^i, \dots, x^n) - f(x^1, \dots, x^n)}{h^i}; \quad i = 1, \dots, n.$$

Константы  $h^i$ ,  $a^i$  определяются из физических соображений, согласуясь с размерностью переменных  $x^i$ . Можно совершить несколько шагов с одним и тем же значением  $n^i$  для поиска минимума по  $t$ . После этого вычисляются новые значения вектора  $n^i$ .

Этот метод более прозрачен, когда переменные  $x^i$  приведены к безразмерному виду и масштаб их выбран так, что влияние их изменений на изменение минимизируемой функции приблизительно одинаково.

### 8.2.5 Метод наискорейшего спуска

Этот метод аналогичен предыдущему, но значения вектора  $n^i$  вычисляются заново после каждого шага по  $t$ .

### 8.2.6 Метод Хука-Дживса

Метод разработан в 1961 году. Поиск состоит из последовательности шагов вокруг базисной точки и затем – поиск по образцу.

- Выбор начальной базисной точки  $\mathbf{r}_0 = (x_0^1, x_0^2, \dots, x_0^n)$  и шага по каждой переменной  $h^i$ .
- Вычисляются значение функции и после приращения по каждой переменной по очереди на шаг  $h^i$ :

$$f_0 = f(\mathbf{r}_0); \quad f_i = f(x_0^1, x_0^2, \dots, x_0^i + h^i, \dots, x_0^n); \quad i = 1, \dots, n.$$

- Если сдвиг приводит к увеличению значения, то шаг меняется на обратный:

$$if(f_i > f_0) h^i = -h^i, f_i = f(x_0^1, x_0^2, \dots, x_0^i + h^i, \dots, x_0^n).$$

- Если и после этого  $f_i > f_0$ , то полагается  $h^i = 0$ .

Таким образом формируется вектор сдвига  $\mathbf{h} = (h^1, h^2, \dots, h^n)$ , где некоторые шаги могут оказаться нулевыми, а некоторые – противоположные по знаку первоначальным. После этого начинается процедура *сдвига по образцу*

- Вычисляется значение функции  $f(\mathbf{r}_1)$  в точке  $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_0 + \mathbf{h}$ .
- Если  $f(\mathbf{r}_1) < f(\mathbf{r}_0)$ , то формируется новый вектор координат

$$\mathbf{r}_2 = \mathbf{r}_1 + \mathbf{h}. \quad (8.1)$$

Такие шаги повторяются, пока функция не перестанет уменьшаться. Тогда предпоследняя точка вновь принимается за базисную, исходные шаги уменьшаются в два раза и весь процесс повторяется.

- Если шаги стали меньшими, чем установленная точность, процесс прекращается.

### 8.2.7 Метод квадратичной аппроксимации

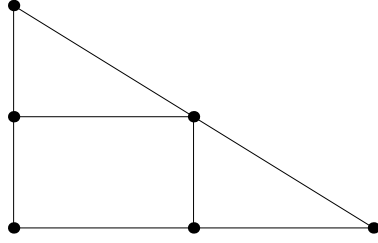
Выбирается  $(n + 1)(n + 2)/2$  точек и через них проводится квадратичная поверхность, у которой и ищется минимум.

Если в одномерном случае три точки для квадратичной аппроксимации можно выбирать достаточно произвольно, то в многомерном случае лучше этот выбор упорядочить.

## Двумерная задача

Начнем с двумерной задачи, где нужно выбрать шесть точек для построения квадратичной аппроксимации. Если координаты начальной точки выберем за  $(0, 0)$ , остальные пять точек выбираем сдвигом от нее на один или два постоянных шага  $h_x, h_y$ :

$$\begin{aligned} r_{02} &= (0, 2h_y); \\ r_{01} &= (0, h_y); & r_{11} &= (h_x, h_y); \\ r_{00} &= (0, 0); & r_{10} &= (h_x, 0); & r_{20} &= (2h_x, 0). \end{aligned} \quad (8.2)$$



В этих точках находим значения минимизируемой функции  $f_{00}, \dots, f_{02}$ . Теперь строим квадратичную двумерную аппроксимацию

$$F(r) = a_{11}x^2 + 2a_{12}xy + a_{22}y^2 - 2a_1x - 2a_2y + a_0 \quad (8.3)$$

и шесть коэффициентов  $a_0, a_i, a_{ij}$  находятся из шести линейных уравнений  $F(r_i) = f_i$ :

$$\begin{aligned} a_0 &= f_{00}; & a_1 &= \frac{3f_{00} - 4f_{10} + f_{20}}{4h_1}; & a_2 &= \frac{3f_{00} - 4f_{01} + f_{02}}{4h_2}; \\ a_{11} &= \frac{f_{00} - 2f_{10} + f_{20}}{2h_1^2}; & a_{12} &= \frac{f_{00} - f_{10} - f_{01} + f_{11}}{2h_1h_2}; & a_{22} &= \frac{f_{00} - 2f_{01} + f_{02}}{2h_2^2}. \end{aligned} \quad (8.4)$$

Теперь ищется минимум функции  $F$ :

$$\frac{\partial F}{\partial x} = 2(a_{11}x + a_{12}y - a_1) = 0; \quad \frac{\partial F}{\partial y} = 2(a_{12}x + a_{22}y - a_2) = 0.$$

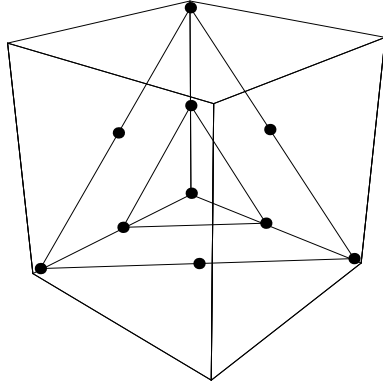
Из решения этой системы находится положение экстремума аппроксимирующей функции  $F$  (но не  $f$ ).

Теперь нужно уменьшить шаги  $h_1, h_2$  и повторить алгоритм в окрестности точки минимума  $x_0, y_0$ .

### Трехмерная задача

В трехмерной задаче точки (8.2) получают еще третью координату  $z = 0$  и к ним добавятся еще точки со смещением по  $z$  на один или два шага  $h_z$ :

$$\begin{aligned} r_{001} &= (0, 0, h_z) & r_{101} &= (h_x, 0, h_z) \\ r_{011} &= (0, h_y, h_z) \\ r_{002} &= (0, 0, 2h_z) \end{aligned}$$



По значениям минимизируемой функции в этих точках находятся коэффициенты квадратичной функции  $F$ . К коэффициентам (8.4) добавятся коэффициенты

$$\begin{aligned} a_3 &= \frac{3f_{000} - 4f_{001} + f_{002}}{4h_3}; & a_{33} &= \frac{f_{000} - 2f_{001} + f_{002}}{2h_3^2}; \\ a_{13} &= \frac{f_{000} - f_{100} - f_{001} + f_{101}}{2h_1h_3}; & a_{23} &= \frac{f_{000} - f_{010} - f_{001} + f_{011}}{2h_2h_3}, \end{aligned}$$

после чего сдвиг по  $x, y, z$  находится из системы линейных уравнений

$$a_{11}\Delta x + a_{12}\Delta y + a_{13}\Delta z = a_1;$$

$$a_{12}\Delta x + a_{22}\Delta y + a_{23}\Delta z = a_2;$$

$$a_{13}\Delta x + a_{23}\Delta y + a_{33}\Delta z = a_3.$$

Аналогично происходит добавление коэффициентов и уравнений при увеличении размерности.

## Многомерная задача

В общем случае при наличии  $n$  переменных выполняются действия, которые можно было проследить на двумерной и трехмерной задаче.

Введем некоторые обозначения. Значение функции в исходной точке обозначается

$$f_0 = f(x^1, x^2, \dots, x^n).$$

В точке, сдвинутой на один шаг по одной  $i$ -й переменной:

$$f_i = f(x^1, \dots, x^i + h^i, \dots, x^n).$$

В точке, сдвинутой на один шаг по двум разным переменным:

$$f_{ij} = f(x^1, \dots, x^i + h^i, \dots, x^j + h^j, \dots, x^n); \quad i \leq j,$$

причем при  $i = j$  функция вычисляется в точке, сдвинутой на два шага по одной переменной:

$$f_{ii} = f(x^1, \dots, x^i + 2h^i, \dots, x^n).$$

- Строится симметричная матрица  $a_{ij}$ :

$$a_{ij} = f_0 - f_i - f_j + f_{ij}, \quad i, j \leq n. \quad (8.5)$$

- Находятся  $n$  коэффициентов  $b_i$  по формуле

$$b_i = \frac{3f_0 - 4f_i + f_{ii}}{2}. \quad (8.6)$$

- Решается система линейных уравнений

$$\sum_{j=1}^n a_{ij} \Delta^j = b^i. \quad (8.7)$$

- Точка экстремума квадратично аппроксимирующей функции (новая точка поиска) имеет координаты

$$\bar{x}^i = x^i + h^i \Delta^i.$$

Нужно убедиться, что мы нашли минимум, а не максимум:  $f(\bar{x}) < f_0$ .

- Если  $h^i \Delta^i < \bar{\Delta}^i$  — заданных абсолютных погрешностей, или  $\Delta^i < \delta^i$  — заданных относительных погрешностей, то поиск минимума прекращается, иначе процесс повторяется сначала, может быть, с измененными (уменьшенными) шагами.



# Литература

- [1] Г. Корн, Т. Корн. Справочник по математике для научных работников и инженеров. М.: Наука, 1970.
- [2] А.А. Самарский. Введение в численные методы. М.: Наука, 1982.
- [3] Бахвалов Н.С. Численные методы. М.: Наука, 1975.
- [4] Марчук Г.И. Методы вычислительной математики. М.: Наука, 1980.
- [5] Фаддеев Д.К., Фаддеева В.Н. Вычислительные методы линейной алгебры. М.: Физматгиз, 1963.
- [6] Д. Мак-Кракен, У. Дорн. Численные методы и программирование на ФОРТРАНе. М.: Мир, 1977.
- [7] Численные методы в задачах обработки данных. ННГУ, 1998.
- [8] Б. Банди. Методы оптимизации. Вводный курс. М.: Радио и связь, 1988.
- [9] Дж. Ортега, У. Пул. Введение в численные методы решения дифференциальных уравнений. М.: Наука, 1986.