NYILATKOZAT

Név: Kupás Vendel Péter

ELTE Természettudományi Kar, szak: Matematika BSc

NEPTUN azonosító: JTC3ZA

Szakdolgozat címe:
Többváltozós szélsőérték problémák egyváltozós eszközökkel

A **szakdolgozat** szerzőjeként fegyelmi felelősségem tudatában kijelentem, hogy a dolgozatom önálló szellemi alkotásom, abban a hivatkozások és idézések standard szabályait következetesen alkalmaztam, mások által írt részeket a megfelelő idézés nélkül nem használtam fel.

Budapest, 2021.05.30.

Kupás Vendel Péter

a hallgató aláírása

Eötvös Loránd Tudományegyetem

Természettudományi Kar

Kupás Vendel Péter

Matematika Bsc

Többváltozós szélsőérték problémák egyváltozós eszközökkel

szakdolgozat

Témavezető:

Sigray István

Analízis Tanszék

Budapest, 2021

Köszönetnyílvánítás

Ezúton szeretnék köszönetet mondani témavezetőmnek, Sigray Istvánnak, hogy felkeltette érdeklődésemet a téma iránt és ötleteivel, meglátásaival segítette a dolgozat létrejöttét.

Hálával tartozom családomnak és barátaimnak a támogatásukért és segítségükért.

Tartalomjegyzék

1. fejezet

Bevezetés

A matematikai problémamegoldás során és a mindennapi életben is gyakran találkozunk szélsőérték feladatokkal. Egyváltozóban sok eszköz ismert ezek megoldására. Kétszer differenciálható f függvény esetén az f' és f'' függvények segítségével adhatjuk meg a szélsőérték helyeket és azok típusát, de több numerikus módszer is ismert, amelyeket alkalmazhatunk.

A többváltozós szélsőérték problémák megoldása még az egyszerűbbnek tűnő esetekben sem mindig könnyű. Ha f differenciálható, akkor visszavezethetjük a problémát a $\nabla f = \underline{0}$ nem feltétlenül lináris egyenletrendszerre. Ezek pontos megoldására nincs általános módszer. Természetesen vannak eszközök, amikkel speciális alakú egyenletrendszerek megoldásait meg tudjuk adni. Ezek általában hosszadalmasak és nagyon sok számolással járnak. Illusztrálásképp lássunk egy olyat, amit akkor használhatunk, ha két változónk van és a bal oldalon többváltozós polinomok állnak:

$$\begin{cases} f(x,y) = 0 \\ g(x,y) = 0 \end{cases}$$

ahol $f(x,y) = a_n(y)x^n + .. + a_0(y)$ és $g(x,y) = b_m(y)x^m + .. + b_0(y)$ kétváltozós polinomok, melyek n illetve m-ed fokú polinomoknak tekinthetőek az x változóban. A feladat úgy is megfogalmazható, hogy adjunk meg f és g közös gyökeit.

Vezessük be a rezultáns fogalmát és mondjunk ki egy tételt.

1.1. Definíció Legyenek $p(x) = a_nx^n + .. + a_0$ és $q(x) = b_mx^m + .. + b_0$ n illetve m fokú egyváltozós $\mathbb{R}$ feletti polinomok. Ekkor p és q rezultánsa az az $(m+n) \times (m+n)$-es determináns, amit a következőképpen készítünk el. Az első sorba az $a_n, a_{n-1}, ..., a_0$ együtthatókat írjuk, majd csupa nullákat. A második sor első eleme nulla, ezután jönnek sorban

a_n,$a_{n-1}, ..., a_0$, majd ismét csupa nulla. A harmadik sor elején már két nulla van. Ezt a lépcsőt összesen m soron át folytatjuk, ekkor az m-edik sorban a_0 lesz a legutolsó elem. Ezután ugyanezt az eljárást a maradék n sorban elvégezzük a $b_m, b_{m-1}, ..., b_0$ együtthatókkal is.

Példaként lássuk ezt a determinánst, amikor $n = 4$ és $m = 3$:

$$R(p,q) = \begin{vmatrix} a_4 & a_3 & a_2 & a_1 & a_0 & 0 & 0 \\ 0 & a_4 & a_3 & a_2 & a_1 & a_0 & 0 \\ 0 & 0 & a_4 & a_3 & a_2 & a_1 & a_0 \\ b_3 & b_2 & b_1 & b_0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & b_3 & b_2 & b_1 & b_0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & b_3 & b_2 & b_1 & b_0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & b_3 & b_2 & b_1 & b_0 \end{vmatrix}$$

1.2. Tétel Legyenek $p(x) = a_n x^n + ... + a_0$ és $q(x) = b_m x^m + ... + b_0$ $\mathbb{R}$ fölötti polinomok. melyek $\mathbb{R}$ fölött gyöktényezőkre bomlanak.

- Ha $p(x) = a_n(x - \alpha_1)...(x - \alpha_n)$ és $q(x) = b_m(x - \beta_1)...(x - \beta_n)$, ahol $\alpha_i, \beta_j \in \mathbb{R}$ és a_n és b_m egyike sem nulla, akkor

$$R(p,q) = a_n^m q(\alpha_1) \cdot .. \cdot q(\alpha_n) = a_n^m b_m^n \prod_{1 \le i \le n} \prod_{1 \le j \le m} (\alpha_i - \beta_j)$$
$$= (-1)^{nm} b_m^n p(\beta_1) \cdot .. \cdot (\beta_m) = (-1)^{nm} R(g,f)$$

- Az R(f,g) akkor és csak akkor nulla, ha vagy $a_n = b_m = 0$, vagy a két polinomnak van közös gyöke $\mathbb{R}$-ben.

Ha f-re és g-re mint x szerint egyváltozós polinomkra gondolunk, ahogyan a rezultáns bevezetése előtt felírtuk őket, akkor $R(f,g)$ egy y-tól függő kifejezés lesz. Ha f-nek és g-nek közös zérushelye van az (x_0, y_0) pontban, akkor, az előző tétel szerint, $R(f,g)(y_0) = 0$. Tehát az $R(f,g)(y) = 0$ egyenlet megoldásai között ott lesznek azon y értékek, amelyekhez van x, hogy (x,y) közös gyöke f-nek és g-nek. Pontosabban azokat az y értékeket kapjuk meg így, amelyekhez létezik x, hogy (x,y) közös gyöke f-nek és g-nek, vagy mindkét főegyüttható 0-vá változik. Nézzünk erre egy példát:

Vegyük a $h(x,y) = x^2 y + \frac{x^2}{2} + x - \frac{y^3}{3} - y$ függvényt.
Ezt deriválva a következő egyenletrendszerhez jutunk:

$$\begin{cases} x^2 + y^2 - 1 = 0 \\ (2y+1)x + 1 = 0 \end{cases}$$

Írjuk fel a 2 polinom rezultánsát és tegyük egyenlővé 0-val:

$$R(x^2 + y^2 - 1, (2y + 1)x + 1) = 1 + (y^2 - 1)(2y + 1)^2 = y(4y^3 + 4y^2 - 3y - 4) = 0$$

A rezultáns pontosan akkor nulla, ha vagy mindkét főegyüttható nulla, vagy a két polinomnak van közös gyöke. Az első egyenletbe a főegyüttható 1, így csak a második eset fordulhat elő.

Megoldva az egyváltozós egyenletet kapjuk, hogy $y = 0$ és $y \approx 0.938$ a valós gyökök. Ezeket behelyettesítve a második egyenletbe megkapjuk a metszéspontokat, melyek a $(-1{,}0)$ és $(-0.348, 0.938)$.

Ez a módszer alkalmas több ismeretlenes, több egyenletből álló rendszer gyökeinek megtalálására is. Ekkor többször egymás után kell a fent leírtakat alkalmazni.

Az előző példa ügyeskedéssel (kivonogatással, szorzattá alakítással) rezultáns nélkül is megoldható lenne. Ha „igazi", ilyen trükkökkel nem megoldható példát választottunk volna, akkor a rezultánsok kiszámítása, a kapott egyismeretlenes egyenlet megoldása is reménytelenül hosszadalmas lenne, több ismeretlen vagy változó esetén pedig még esélytelenebbek vagyunk.

Visszatérve az eredeti kérdéshez, kereshetjük f szélsőértékeit numerikus módszerekkel is. A $\nabla f = 0$ egyenletrendszer megoldásait közelíthetjük Newton-módszerrel vagy használhatunk fixpont tételen alapuló iterációt is.
Szakdolgozatomban egy olyan eljárást mutatok be, ami csak egyváltozós eszközöket használva közelíti f kritikus pontjait.

2. fejezet

Többváltozós függvények

Mielőtt rátérünk a szakdolozatban tárgyalt módszer leírására, vegyük át azokat a legfontosabb fogalmakat, tételeket, amelyeket majd használni fogunk. A dolgozat egésszében a jobb átláthatóság és a helytakarékosság érdekében az oszlopvektorokat is sorvektorokként írjuk le. A transzponálás műveletét nem írjuk ki, csak ott, ahol a megértést segíti.

Ebben a fejezetben legyenek n és k pozitív egész számok, G pedig mindig egy $\mathbb{R}^n$-beli nyílt halmazt fog jelölni.

2.1. $\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^k$ leképezések

2.1. Definíció (derivált) Legyen $f : G \to \mathbb{R}^k$ leképezés és $x \in G$. Ha létezik
$A : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^k$ lineáris transzformáció, melyre

$$\lim_{\underline{h}\to 0} \frac{||f(x+h) - f(x) - Ah||}{||h||} = 0,$$

akkor f differenciálható az x pontban és $f'(x) = A$.
Ha f differenciálható minden $x \in G$ pontban, akkor azt mondjuk, hogy f differenciálható a G halmazon.

2.2. Definíció (Parciális derivált) Legyen $f : G \to \mathbb{R}^k$ leképezés, $x = (x_1, .., x_n) \in G$, $1 \leq i \leq k$, $1 \leq j \leq n$. Ekkor az f leképezés i-edik komponensének j-edik változó szerinti parciális deriváltja az x helyen

$$(\partial_j f_i)(x) = \lim_{t\to 0} \frac{f_i(x + te_j) - f_i(x)}{t}$$

feltéve, hogy ez létezik. Itt e_j a j-edik egységvektort jelöli.

2.3. Tétel Legyen $f : G \to \mathbb{R}^k$ differenciálható az $x \in G$ pontban. Ekkor a $(\partial_j f_i(x))$ parciális deriváltak léteznek minden $i = 1, .., k$-ra és $j = 1, .., n$-re, továbbá

$$f'(x)e_j = \begin{pmatrix} \partial_j f_1(x) \\ ... \\ \partial_j f_k(x) \end{pmatrix}$$

2.4. Definíció Az $f : G \to \mathbb{R}^k$ leképezés folytonosan differenciálható a G halmazon, ha itt léteznek a $\partial_j f_i$ parciális deriváltak és folytonosak minden $i = 1, .., k$-ra és $j = 1, .., n$-re.

2.5. Tétel Az $f : G \to \mathbb{R}^k$ leképezés differenciálható az $x \in G$ pontban pontosan akkor, ha minden f_i $(i = 1, .., k)$ komponense differenciálható x-ben.

2.6. Tétel (inverzfüggvény tétel) Ha $f : G \to \mathbb{R}^n$ folytonosan differenciálható az $a \in G$ pontban, és az $f'(a) : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ lineáris leképezés invertálható, akkor léteznek δ és η pozitív számok úgy, hogy

1. minden $x \in B(f(a), \delta)$ ponthoz létezik egyetlen $\varphi(x) \in B(a, \eta)$ pont, amelyre $f(\varphi(x)) = x$,
2. az így definiált φ függvény differenciálható a $B(f(a), \delta)$ gömbben és folytonosan differenciálható az $f(a)$ pontban, továbbá
3. $f'(x)$ invertálható minden $x \in B(a, \eta)$-ra, és teljesül a $\varphi'(f(x)) = f'(x)^{-1}$ egyenlőség minden $x \in B(f(a), \delta)$-ra.

Ha f folytonosan differenciálható a egy környezetében, akkor a δ és η számokat úgy is megválaszthatjuk, hogy φ folytonosan differenciálható legyen $B(f(a), \delta)$-ban.

2.7. Tétel (implicitfüggvény-tétel) Legyen $H \subset \mathbb{R}^{n+m}$ és $(a, b) \in intH$, ahol $a \in \mathbb{R}^n$ és $b \in \mathbb{R}^m$. Tegyük fel, hogy az $f : H \to \mathbb{R}^m$ függvény az (a, b) pontban az $\mathbb{R}^m$-beli 0 vektort veszi fel. Jelölje f_a az $y \to f(a, y)$ szekciófüggvényt. Ha f folytonosan differenciálható (a, b)-ben és az $(f_a)'(b)$ lineáris leképezés injektív, akkor léteznek olyan δ és η pozitív számok, hogy

1. minden $x \in B(a, \delta)$-hoz létezik egyetlen $\varphi(x) \in B(b, \eta)$ pont, amelyre $f(x, \varphi(x)) = 0$.
2. Az így definiált φ függvény differenciálható a $B(a, \delta)$ gömbben és folytonosan differenciálható az a pontban.
3. Ha f folytonosan differenciálható (a, b) egy környezetében, akkor δ és η úgy is megválaszható, hogy φ folytonosan differenciálható a $B(a, \delta)$ gömbben.

2.2. Többváltozós valós függvények

2.8. Definíció (gradiens) Legyen $f : G \to \mathbb{R}$ deriválható valós függvény. Ekkor f gradiense az $x \in G$ pontban

$$\nabla f(x) = \begin{pmatrix} \partial_1 f(x) \\ ... \\ \partial_n f(x) \end{pmatrix}$$

2.9. Tétel Legyen $f : G \to \mathbb{R}$. Ha a $\partial_j f$ parciális deriváltak léteznek és folytonosak G-n minden $j = 1, .., n$-re, akkor f differenciálható G-n.

2.10. Definíció (iránymenti derivált) Legyen $f : G \to \mathbb{R}$, $v \in \mathbb{R}^n$ egységvektor, $x \in G$. A

$$\lim_{\tau \to 0} \frac{f(x + t\tau) - f(x)}{\tau}$$

határértéket (ha létezik) az f függvény x-beli v irányú iránymenti deriváltjának nevezzük és $\partial_v f(x)$-szel jelöljük.

2.11. Definíció (másodrendű parciális derivált) Ha az $f : G \to \mathbb{R}$ függvénynek a $\partial_1 f, ..., \partial_n f$ parciális deriváltjai léteznek és parciálisan deriválhatóak, akkor f másodrendű parciális deriváltjai a $\partial_i \partial_j f = \partial_i(\partial_j f)$ függvények $(i, j = 1, .., n)$.

2.12. Definíció Ha $f : G \to \mathbb{R}$ és a $\partial_j f$ függvények differinciálhatóak G-n minden $j =$ $= 1, .., n$-re, akkor f kétszer differenciálható G-n.

2.13. Tétel (Young tétel) Ha az $f : G \to \mathbb{R}$ kétszer differenciálható az $x \in G$ pontban, akkor $\partial_i \partial_j f(x) = \partial_j \partial_i f(x)$ minden $i, j = 1, .., n$-re.

2.14. Definíció (első és második differencia) Legyen $f : G \to \mathbb{R}$ kétszer differenciálható az $x \in G$ pontban. Ekkor f x-beli első differenciáján a $df : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$

$$df(x, h) = \sum_{j=1}^{n} (\partial_j f(x)) h_j$$

lineáris formát értjük.
Az f x-beli második differenciáján a $d^2 f : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$

$$d^2 f(x, h) = \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} (\partial_j \partial_i f(x)) h_j h_i$$

kvadratikus formát értjük.

2.15. Definíció A $q(h) = \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} a_{ij} h_i h_j$ kvadratikus forma pozitív (negatív) definit, ha $q(h) > 0$ $(q(h) < 0)$ minden $h \in \mathbb{R}^n$, $h \neq 0$ vektor esetén.

A q formát reprezentálhatjuk azzal az A mátrixszal, aminek i-edik sorának j-edik eleme a_{ij}. Ekkor $q(h) = h^T Ah$ minden $h \in \mathbb{R}^n$ vektorra. Így értelmezhetjük a mátrixok definitségét is.
Az $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ mátrix pozitív definit, ha $x^T Ax > 0$ minden $x \in \mathbb{R}^n$, $x \neq 0$ vektorra és negatív definit, ha $(x^T Ax < 0)$.

2.16. Tétel Legyen $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ egy szimmetrikus mátrix és jelölje A_i az A bal felső $i \times i$ méretű részmátrixát. Ekkor A akkor és csak akkor pozitív definit, ha

$$det(A_i) > 0 \quad \forall\, i = 1, .., n.$$

Egy $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ szimmetrikus mátrix akkor és csak akkor negatív definit, ha

$$sgn(det(A_i)) = (-1)^i \quad \forall\, i = 1, .., n.$$

2.17. Definíció Legyen f n-változós valós függvény és $H \subset Dom(f)$. Az $a \in H$ pontban f-nek H-ra nézve abszolút maximuma (minimuma) van, ha minden $x \in H$-ra $f(x) \leq f(a)$ $(f(x) \geq f(a))$. Szigorú maximuma (szigorú minimuma) van $a \in H$-ban ha az egyenlőséget sem engedjük meg.

2.18. Definíció (lokális szélsőérték hely) Azt mondjuk, hogy az f n-változós valós függvénynek az $a \in \mathbb{R}^n$ pontban lokális maximuma (lokális minimuma) van, ha a-nak van olyan U környezete, amelyben f értelmezve van, és minden $x \in U$-ra $f(x) \leq f(a)$ $(f(x) \geq f(a))$. Ekkor az a pontot az f függvény lokális maximumhelyének (lokális minimumhelyének) nevezzük.

2.19. Tétel Legyen $f : G \to \mathbb{R}$, $a \in G$. Ha a az f lokális szélsőérték helye és létezik $(\partial_j f)(a)$, akkor $(\partial_j f)(a) = 0$.

2.20. Definíció (kritikus pont) Legyen $f : G \to \mathbb{R}$, $a \in G$ olyan, melyre $(\partial_j f)(a) = 0$ minden $j = 1, .., n$-re. Ekkor azt mondjuk, hogy a kritikus pontja az f függvénynek.

2.21. Tétel Legyen $f : G \to \mathbb{R}$, $a \in G$, $f'(\underline{a}) = 0$ és f kétszer folytonosan differenciálható a-ban. Ha $d^2 f(a, h) > 0$ $(d^2 f(a, h) < 0)$ minden $h \neq 0$-ra, akkor a az f lokális minimum (maximum) helye.
Ha $d^2 f(a, h)$ pozitív és negatív értékeket is felvesz, akkor a nem lokális szélsőértékhely.

2.22. Tétel (implicitfüggvény-tétel egyváltozós alakja) Legyen $H \subset \mathbb{R}^2$ és $(a, b) \in intH$. Tegyük fel, hogy az $f : H \to \mathbb{R}$ függvény az (a, b) pontban az $\mathbb{R}^2$-beli 0 vektort veszi fel és folytonosan differenciálható (a, b)-ben. Tegyük fel továbbá, hogy a $\partial_2 f$ parciális derivált létezik, véges és nullától különböző az (a, b) pont egy környezetében. Ekkor léteznek olyan δ és η pozitív számok, hogy

1. minden $x \in (a-\delta, a+\delta)$-hoz létezik egyetlen $\varphi(x) \in (b-\eta, b+\eta)$ szám, amelyre $f(x, \varphi(x)) = 0$, továbbá

2. az így definiált φ függvény differenciálható az $(a-\delta, a+\delta)$ intervallumban és folytonosan deriválható az a pontban.

3. Ha f folytonosan differenciálható (a, b) egy környezetében, akkor δ és η úgy is megválaszható, hogy φ folytonosan differenciálható az $(a-\delta, a+\delta)$ intervallumon.

2.23. Tétel (Lagrange multiplikátor tétel) Legyen $G \subset \mathbb{R}^n$ nyílt halmaz, $m < n$ szám, $f, g_1, .., g_m$ G-n folytonosan differenciálható függvények, $b_1, .., b_m \in \mathbb{R}$ és $S = \{x \in \mathbb{R}^n : g_j(x) = b_j, j = 1, .., m\}$. Tegyük fel, hogy minden $a \in S$ pontban $\nabla g_1(a), .., \nabla g_m(a)$ lineárisan függetlenek és f-nek feltételes szélsőértéke van a-ban S-re vonatkozólag. Ekkor létezik $\lambda_1, .., \lambda_m \in \mathbb{R}$, hogy

$$\nabla f(a) = \lambda_1 \nabla g_1(a) + .. + \lambda_m \nabla g_m(a).$$

3. fejezet

Elemi algoritmus

Legyen f egy differenciálható, n-változós valós függvény. Célunk f kritikus pontjainak a megtalálása, amit az ebben a fejezetben leírt egyszerű iterációs módszerrel szeretnénk megvalósítani.
Először definiálni fogjuk az algoritmust, majd megvizsgáljuk, hogy milyen feltételek mellett konvergál a kapott pontsorozat és végül a konvergencia sebességre mondunk ki egy tételt.

3.1. Az algoritmus leírása

Bemenetként meg kell adnunk az f differenciálható függvényt, aminek a kritikus pontjait keressük, f változóinak a számát és egy x_0 kezdőpontot, ahonnan az iterációt fogjuk indítani.
Az algoritmus minden lépésében egy egyenesen fogunk egyváltozós értelemben vett kritikus pontot keresni.
Vegyük sorba a koordináta irányokat ciklikusan. Azt a pontot, ahol a k. lépés előtt vagyunk jelöljük x_{k-1}-gyel. A k. lépésben határozzuk meg az x_{k-1} ponton átmenő, a k. egységvektorral párhuzamos egyenesen lévő, x_{k-1}-hez legközelebbi, egyváltozós értelemben vett kritikus pontot. Ha ez létezik, akkor lépjünk oda, ha nem, akkor maradjunk x_{k-1}-ben. Természetesen a k. egységvektornál a k-t modulo n kell érteni.
Tehát minden lépésben egy $\partial_j f((y_1, .., y_{j-1}, x, y_{j+1}, .., y_n)) = 0$ egyenlet megoldásait keressük rögzített $y \in \mathbb{R}^n$, $j \in \{1, .., n\}$ mellett, majd, ha létezik, kiválasztjuk az y_j-hez legközelebbi megoldást.
Az így kapott végtelen sorozatot jelölje $\{x_k\}$.
A gyakorlatban az algoritmus nem futhat végtelen ideig, meg kell adnunk a leállási feltételeket. Az iteráció akkor álljon le, ha olyan pontba jutunk, ahonnan egyik irányba sem

tudunk elmozdulni vagy 1000-szer léptünk arrébb vagy a gradiens elegendően kicsi vagy minden irányban elég kicsit léptünk.

Pszeudokóddal leírva ez a következő alakot ölti:

Algoritmus 1 Elemi algoritmus (n,f,x_0)

$k = 0,\ s = 0,\ pr = 0,\ eps =$egy elég kicsi szám.
$crp = x_0$
$lepes = (eps + 1, .., eps + 1)$
while $pr < 1000$ *and* $s < n$ *and* $||\nabla f(crp)|| < eps$ *and* $max(lepes) < eps$ **do**
    $j = (pr\ mod\ n) + 1$
    Legyen u a $\partial_j f((rsp_1, .., crp_{j-1}, x, crp_{j+1}, .., crp_n)) = 0$ egyenlet crp_j-hez legközelebbi megoldása.
    $pr = pr + 1$
    if létezik u **then**
        $lepes(j) = |crp_j - u|$
        if $u = P_j$ **then**
            $s = s + 1$
        else
            $s = 0$
        $crp_j = u$
        $k = k + 1$
    else
        $s = s + 1$
if $s == n$ or $pr = 1000$ **then**
    $crp =$"Nem létezik"
return(crp)

Itt crp az a pont, ahol aktuálisan vagyunk, k a lépések száma, pr a próbálkozások száma az egyenlet megoldására, s azt jelöli, hogy az utolsó hány lépésben nem találtunk gyökét az egyenletnek és $lepes$ pedig azt, hogy az egyes irányokba mekkorát léptünk utoljára. Nyilván akkor nem tudunk egy pontból arrébb lépni, ha minden irányba sikertelenül kerestünk kritikus pontot. Ez n db próbálkozást jelent.

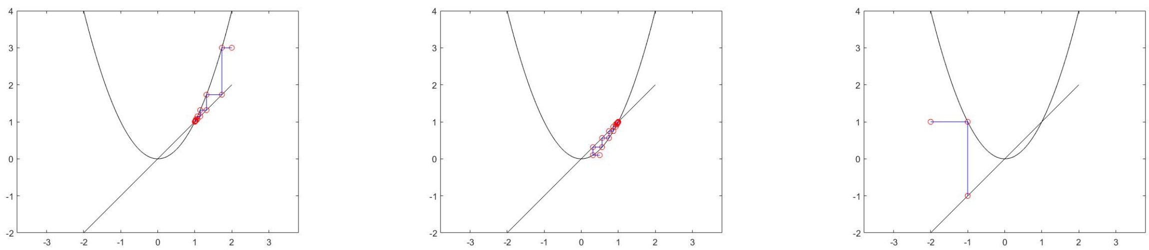
Lássunk egy 2 dimenziós példát, ami mutatja, hogy az algoritmus valóban használható kritikus pontok keresésére, de egyáltalán nem biztos, hogy minden kritikus pontot megkaphatunk határértékként.

3.1. Példa Legyen $f(x,y) = \frac{x^3}{3} - xy + \frac{y^2}{2}$. Ez egy egyszerű függvény, a $\nabla f(x,y) = 0$ egyenletből meg tudjuk határozni f kritikus pontjait.

$$\partial_x f(x,y) = x^2 - y = 0$$
$$\partial_y f(x,y) = y - x = 0$$

Ezen egyenletrendszer megoldásai az (1,1) és (0,0) pontok. A második derivált vizsgálatából kiderül, hogy az (1,1) lokális minimum, míg az origó nyeregpont.

Próbaképp futtassuk az elemi algoritmust a (2,3), (0.5,0.2) és $(-2,1)$ pontokból indítva. Ekkor a következő 3 képen látható lefutásokat kapjuk:

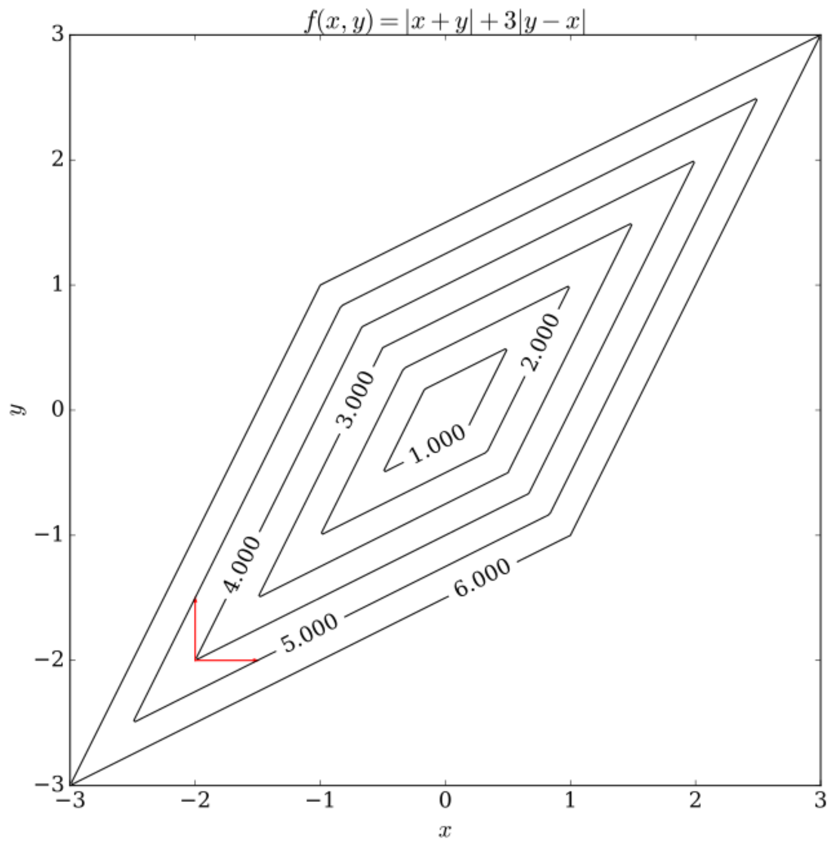


3.1. ábra

Itt a két fekete görbe azon pontok halmaza, amelyeken az egyik parciális derivált a 0 értéket veszi fel. Nyilván ezen két görbe metszéspontjai adják f kritikus pontjait. Az algoritmus során ezen 2 görbe között lépkedünk felváltva. Azt látjuk, hogy az első két esetben a kapott sorozat konvergál az (1,1) ponthoz, míg a harmadik esetben 2 lépés után leáll az algoritmus, mert a $(-1,-1)$ pontban a vízszintes egyenesen nem talált olyan pontot, ahol az x-szerinti parciális derivált 0. Belátható, hogy az origót semmilyen, önmagán kívüli, kezdőpontból indulva nem kaphatjuk meg.

Definiálhattuk volna úgy is az algoritmust, hogy az egyes lépésekben az egyenesen ne a legközelebbi kritikus pontot, hanem a legközelebbi lokális minimumhelyet (vagy maximumhelyet) találja meg (vagy bizonyos irányokba minimumhelyet, a többibe maximumhelyet). Több numerikus módszer van egyváltozóban, amely úgy keres lokális minimumhelyet, hogy nincs szüksége a deriváltra. Így az f függvénynek most is tudnánk kritikus pontjait keresni, viszont nem kell feltennünk f-ről, hogy deriválható. Viszont ha f nem deriválható, akkor általában nem használható ez a módosított algoritmus kritikus pont keresésre, amint azt a következő példa is mutatja. Tehát annyi előnyünk származik abból, ha így definiáljuk az algoritmust, hogy nem kell deriválni f-et.

3.2. Példa Legyen $f(x,y) = |x+y| + 3|x-y|$. Ekkor f nem deriválható az $x = y$ és $x = -y$ egyeneseken és a szinthalmazoknak csúcsai vannak ezen egyenesekkel vett metszéspontaikban, ahogyan azt a 3.2 ábra mutatja.



3.2. ábra

Könnyen látszik, hogy bárhonnan is indítjuk az algoritmust, az első lépés után rálépünk az $x = y$ egyenesre, majd innen nem tudunk tovább lépni, mert a ponthoz tartozó rombusz alakú szinthalmaznak egy 90°-nál kisebb szögű csúcsa van itt.

3.2. Konvergencia

Először megmutatjuk, hogy ha konvergens az elemi algoritmus által adott sorozat, akkor a határérték a függvénynek egy kritikus pontja. Ez a tétel adja a motivációt, hogy ilyen módon próbálkozzunk egy függvény kritikus értékeinek keresésével.

3.3. Tétel Tegyük fel, hogy $G \subset \mathbb{R}^n$ nyílt halmaz, az $f : G \to \mathbb{R}$ függvény folytonosan differenciálható G-n és az algoritmus minden lépésében új pontba jut vagy létezik k_0, hogy x_{k_0} kritikus pontja f-nek. Ha a kapott sorozat az x^* ponthoz konvergál, akkor $f'(x^*) = 0$, azaz x^* kritikus pont.

Bizonyítás. Ha x_{k_0} kritikus pontja f-nek, akkor minden $k \geq k_0$-ra $x_k = x_{k_0}$, így feltehető, hogy az $\{x_k\}$ sorozat egyik eleme sem kritikus pontja f-nek.

Rögzítsünk egy $1 \leq i \leq n$ számot. Vegyük $\{x_k\}$-nak azon részsorozatát, amelyet azok a pontok alkotnak, amelyeket az i-edik koordinátairányba keresve kaptunk. Legyen ez x_{k_l}.

$$\lim_{l\to\infty} x_{k_l} = x^*$$

és

$$\partial_i f(x_{k_l}) = 0 \qquad \forall\, l \in \mathbb{N}$$

A derivált folytonossága miatt $\partial_i f(x^*) = 0$.
Ez igaz $\forall\, i \in \{1,2,..,n\}$-re, így $f'(x^*) = 0$ teljesül. ■

Megjegyzés. Elegendő azt feltenni, hogy minden irányban végtelen sokszor találunk gyököt, a bizonyítás ebben az esetben ugyan úgy megy mint az előbb.

A továbbiakban azt vizsgáljuk, hogy mikor teljesülnek az előző tétel feltételei.
Látjuk, hogy új pontba mindig egy $\partial_j f((a_1,..,a_{j-1},x,a_{j+1},..,a_n)) = 0$ egyenlet megoldásával lépünk. Nézzük meg, hogy mikor tudjuk megoldani ezt az egyenletet. Először vegyük a 3.1 példát. Az első két esetben minden lépésben találtunk zérushelyet, így új pontba tudtunk lépni. A harmadik esetben belépünk a $(-1,-1)$ pontba, ahol vízszintes irányba keressük az x szerinti parciális derivált zérushelyét. Viszont ez nem létezik, mert a parabola pontjai mind az y-tengely fölött helyezkednek el. Tehát nem tudunk mindig új pontba lépni.

3.4. Tétel Legyen $G \subset \mathbb{R}^n$ nyílt halmaz és tegyük fel, hogy az $f : G \to \mathbb{R}$ kétszer folytonosan deriválható függvénynek kritikus pontja van az $a \in G$ pontban és $f''(a)$ pozitív vagy negatív definit. Ekkor a-nak létezik olyan $V \subset G$ környezete, ahol a $\partial_j f((c_1,..,c_{j-1},x,c_{j+1},..,c_n)) = 0$ egyenletnek létezik megoldása minden $j \in \{1,..,n\}$, $c \in V$ estén.

Bizonyítás. Az $f''(a)$ pozitív definit esetet vizsgáljuk. Negativ esetén hasonlóan bizonyítható a tétel vagy alkalmazhatjuk a pozitív definit esetét a $-f$ függvényre.

∇f folytonosan differenciálható az a pont egy környezetében és $f''(a)$ pozitív definit, így alkalmazhatjuk a 2.6-os inverzfüggvény-tételt a $\nabla f : G \to \mathbb{R}^n$ függvényre.

Létezik $\varepsilon > 0$, $\delta > 0$, hogy definiálható a $(\nabla f)^{-1} : B(0,\varepsilon) \to B(a,\delta)$ folytonosan deriválható inverz függvény és f'' pozitív (negatív) definit a $B(a,\delta)$ halmazon.

Először mutassuk meg, hogy a-nak létezik V_1 környezete, ahol a $\partial_1 f((x,c_2,..,c_n)) = 0$ egyenletnek létezik megoldása minden $c \in V_1$ esetén.
Nézzük a $\partial_1 f(x) = 0$ hiperfelületet. Ezen azok a pontok vannak rajta, ahol f első parciális

deriváltja 0, így az a pontot is tartalmazza. Paraméterezzük a felület $(\nabla f)^{-1}(B(0,\varepsilon)) \subset \subset B(a,\delta)$ halmazba eső részét. Tehát legyen $r : B_{n-1}(0,\varepsilon) \to B(a,\delta)$ az a hiperfelület, melyet az

$$r(u) = r(u_1, u_2, .., u_{n-1}) = (\nabla f)^{-1}(0,u) = (r_1(u), r_2(u), .., r_n(u)) = (r_1(u), r^1(u))$$

formulával értelmezünk, ahol $B_{n-1}(0,\varepsilon)$ az origó középpontú ε sugarú $n-1$ dimenziós gömböt jelöli.
$(\nabla f)^{-1}$ folytonos $B(0,\varepsilon)$-on, így r is folytonos a $B_{n-1}(0,\varepsilon)$ halmazon és a várakozásainknak megfelelően $r(0) = a$ és $\nabla f(r(u)) = (0,u)$, azaz $\partial_1 f(r(u)) = 0$ itt.

Lemma $r^1(u) = (r_2(u); ..; r_n(u))$ injektív a $B_{n-1}(0,\varepsilon)$ halmazon.

Megjegyzés: Szemléletesen ez azt jelenti, hogy az $x_1 = 0$ hipersíkra merőleges egyenesek legfeljebb egy pontban metszik az r által paraméterezett felületet.

Bizonyítás. Indirekt fogunk bizonyítani. Tegyük fel, hogy létezik $u_1 \neq u_2 \in B_{n-1}(0,\varepsilon)$, hogy $r^1(u_1) = r^1(u_2) = c$.
Legyen

$$\varphi(x) = f(x,c)$$

Ekkor $\varphi'(x) = \partial_1 f(x,c)$ és $\varphi''(x) = \partial_1^2 f(x,c)$.
Tudjuk, hogy

$$\varphi'(r_1(u_1)) = \partial_1 f(r_1(u_1), c) = \partial_1^2 f(r(u_1)) = 0$$

és

$$\varphi'(r_1(u_2)) = \partial_1 f(r_1(\underline{u_2}), \underline{c}) = \partial_1^2 f(r(u_2)) = 0$$

.
A Rolle tétel szerint létezik v, $r_1(u_1)$ és $r_1(u_2)$ között, melyre

$$\varphi''(v) = \partial_1^2 f(v,c) = 0.$$

Viszont $(v,c) \in B(a,\delta)$, ami ellentmond annak, hogy $f''(x)$ pozitív definit ha $x \in B(a,\delta)$. □

Tehát r^1 folytonos és injektív $B_{n-1}(0,\varepsilon)$-on és $r^1(0) = a^1 = (a_2, .., a_n)$, így r^1 az a^1 egy kis környezetének minden pontját felveszi, azaz létezik $V_1' \subset \mathbb{R}^{n-1}$ olyan környezete a^1-nek, melyre minden $d \in V_1'$-re létezik $u \in B_{n-1}(0,\varepsilon)$, melyre $r^1(u) = d$.

Legyen $V_1 = \mathbb{R} \times V_1' \subset \mathbb{R}^n$ és $c \in V_1$. Ekkor V_1 az a pontnak egy környezete és minden $c \in V_1'$ esetén c^1-hez létezik $u \in B_{n-1}(0,\varepsilon)$, hogy $r^1(u) = c^1$. Legyen $x^* = r_1(u)$. Ekkor $\partial_1 f(x^*, c^1) = \partial_1 f(r(u)) = 0$. Tehát x^* épp a $\partial_1 f(x, c^1) = 0$ egyenlet megoldása.

A többi koordinátairányban hasonlóan bizonyítható, hogy a-nak létezik $V_j \subset \mathbb{R}^n$ környezete, hogy a $\partial_j f((c_1, .., c_{j-1}, x, c_{j+1}, .., c_n)) = 0$-nak létezik megoldása minden $c \in V_j$-re.

Ha vesszük ezen környezetek metszetét, akkor a-nak egy olyan $V \subset \mathbb{R}^n$ környezetét kapjuk, melyben a $\partial_j f((c_1, .., c_{j-1}, x, c_{j+1}, .., c_n)) = 0$ egyenletnek létezik megoldása minden $j \in \{1, .., n\}$, $c \in V$-re. ■

Megjegyzés. Létezik $\eta > 0$, hogy a $B(a, \eta)$ halmazon f'' pozitív definit. V-t definiálhattuk volna úgy is, hogy legyen a $mar(B(a, \eta))$ minimum értékéhez tartozó szinthalmaz. Ekkor belátható, hogy V kompakt, konvex halmaz valamint f is konvex V-n. Így minden egyenes V-be eső részén egyetlen egy minimum van, tehát található kritikus pont. A következő tételben ezt be fogjuk látni.

Az előbb beláttuk, hogy ha $f''(a)$ pozitív vagy negatív definit, akkor a egy kis környezetében létezik megoldása a $\partial_j f((a_1, .., a_{j-1}, x, a_{j+1}, .., a_n)) = 0$ egyenletnek minden j-re. Mit mondhatunk abban az esetben, ha $f''(a)$ indefinit?
Vegyük az $f(x, y) = xy$ függvényt. Ennek a (0,0)-ban van kritikus pontja, és $det(f''(0{,}0)) = -1$. Könnyen látszik, hogy bármely (a, b) pontból indulva nem tudunk egyet sem lépni, mert a $\partial_x f(x, y) = 0$ görbe az x-tengely és a $\partial_y f(x, y) = 0$ görbe az y-tengely.

Lemma Legyen $H \subset \mathbb{R}^n$ kompakt halmaz, $\{x_k\} \subset H$ pontsorozat, $a \in H$. Ha $\{x_k\}$ minden konvergens részsorozata a-hoz tart, akkor $\{x_k\}$ is a-hoz tart.

Bizonyítás. Indirekt tegyük fel, hogy $\{x_k\}$ nem tart a-hoz. Ekkor létezik $\varepsilon > 0$, hogy minden $k_0 \in \mathbb{N}$-hez létezik $k > k_0$, hogy $||x_k - a|| > \varepsilon$, azaz $\{x_k\}$-nak létezik $\{x_{k_l}\}$ végtelen részsorozata, amely a $H - B(a, \varepsilon)$ kompakt halmazban van. $\{x_{k_l}\}$-nak létezik konvergens részsorozata. Viszont ez részsorozata $\{x_k\}$-nak is és nyilván nem tarthat a-hoz, ellentmondásra jutottunk. ■

3.5. Tétel Legyen $G \subset \mathbb{R}^n$ nyílt halmaz és tegyük fel, hogy az $f : G \to \mathbb{R}$ kétszer folytonosan deriválható függvénynek kritikus pontja van az $a \in G$ pontban és f"(a) pozitív vagy negatív definit. Ekkor a-nak létezik W környezete, amelyből indulva konvergens az algoritmus és a-hoz konvergál.

Bizonyítás. Most is csak a pozitív definit esetet bizonyítjuk.

Először a-nak egy olyan környezetét szeretnénk megadni, amiből indulva az algoritmus nem áll le azért, mert egy olyan pontba jutott, amelyből nem tud tovább lépni, pedig a gradiens ott nem a 0 vektor. Vegyük a 3.4 tétel által adott $V \subset \mathbb{R}^n$ halmazt és $\delta > 0$ számot. Legyen $V' = V \cap cl(B(a, \frac{\delta}{3}))$. Elég belátni, hogy a-nak létezik olyan $U \subset V'$ környezete, hogy ebből indulva végig U-ban maradunk.
Vegyük V' határát. f-nek létezik itt minimuma, mert $mar(V')$ zárt és f folytonos G-n. Legyen ez a minimum $b \in \mathbb{R}$ szám és legyen $U = \{x \in V' : f(x) \leq b\} \subset V'$.

Igazoljuk, hogy U konvex. Legyen $x, y \in U$ és tegyük fel, hogy $f(x) \geq f(y)$. Jelölje L az x-et y-nal összekötő zárt szakaszt. $x, y \in B(a, \frac{\delta}{3})$, így f pozitív definit L-en. f folytonos a G halmazon, így felveszi a maximumát L-en. Ha L nem lenne benne U-ban, az azt jelentené, hogy létezik $z \in L$, hogy $f(z) > b \geq f(x) \geq f(y)$. Tehát f maximuma nem a végpontokban vétetik fel, hanem a szakasz belsejében a $w \in intU$ pontban. Legyen v L-nek egy egység hosszú irányvektora. Ekkor $0 \geq \partial_v^2 f(w) = v^T f''(w) v$, ami nem lehetséges, mert feltettük, hogy f'' pozitív definit a V halmazon.

Most lássuk be indukcióval, hogy ha $intU$-ból indulunk, akkor végig $intU$-ban maradunk. $x_0 \in intU$ és tegyük fel, hogy az $x_k \in intU$ pontban vagyunk és a j-edik koordináta irányba keressük a $\partial_j f(x) = 0$ egyenlet megoldásait. Jelöljük L-lel az egyenes U-ba eső szakaszát és e-vel az egyenest. $U \subset V$,így találunk megoldását az egyenletnek az e egyenesen. f'' pozitív definit a $B(a, \delta)$ halmazon, így

$$\partial_j^2 f(x) > 0 \quad \forall x \in e \cap B(a, \delta),$$

azaz f szigorúan konvex az $e \cap B(a, \delta)$ szakaszon. Ezért pontosan egy szigorú minimuma van f-nek itt, azaz egy olyan y pont van az $e \cap B(a, \delta)$ szakaszon, amelyre $\partial_j f(y) = 0$. Nézzük az e egyenes és $mar(U)$ metszéspontjait. Ezekből 2 van, mert x_k $intU$-beli volt és U konvex. Az $e \cap U$ szakaszon olyan pontok vannak, ahol a függvényérték legfeljebb akkora, mint a metszéspontokban és y szigorú minimum itt, így $y \in intU$ teljesül.
x_k és y is a $B(a, \frac{\delta}{3})$ halmazban vannak, így az x_k-hoz legközelebb lévő gyöke az egyenletnek az e egyenesen épp y lesz, amiből $x_{k+1} = y \in intU$ következik.

Most már tudjuk, hogy minden lépésben találunk legközelebbi megoldását az egyenletnek. Rátérhatünk a konvergencia vizsgálatára.
Vizsgáljuk az $\{f(x_k)\}$ sorozatot. Az előbb beláttuk, hogy x_{k+1} szigorú minimumhely az őt x_k-val összekető egyenes U-ba eső szakaszán. Így

$$f(x_{k+1}) < f(x_k)$$

teljesül.

Mivel U kompakt, létezik $\{x_{k_l}\}$ konvergens részsorozata $\{x_k\}$-nak. Legyen $x^* = \lim x_{k_l}$. Feltehető, hogy x^*-nak tetszőleges kis környezetében van $\{x_{k_l}\}$-beli x pont, hogy $\partial_1 f(x) = 0$.
$\partial_1 f$ folytonos, így $\partial_1 f(x^*) = 0$.

Legyen $\{x'_l\}$ az $\{x_{k_l}\}$-nek az a részsorozata, amiben azok a pontok vannak, amelyekre $\partial_1 f(x) = 0$. Definiáljuk az $\{y_l\}$ sorozatot, úgy, hogy y_l legyen az a pont, amit az x'_l-ből a 2. koordinátairányba keresve találunk meg. Ekkor $\partial_2 f(y_l) = 0$ minden $l \in \mathbb{N}$-re.

Lássuk be, hogy $\partial_2 f(x^*) = 0$.
$\{y_l\} \subset U$, így létezik $\{y_{l_m}\}$ konvergens részsorozata, aminek a határértéke legyen $y \in U$.

y rajta van az x^*-on átmenő x_2 tengellyel párhuzamos egyenesen és f kétszer folytonosan deriválhatósága miatt $\partial_2 f(y) = 0$. Tudjuk, hogy y szigorú minimumhely $e \cap B(a, \delta)$-n. Ha $y \neq x^*$, akkor $f(y) < f(x^*)$. f folytonos, így

$$\lim_{m\to\infty} f(y_{l_m}) = f(y).$$

A határérték definíciója szerint létezik m_0, hogy minden $m \geq m_0$-ra $f(y_{l_m}) < \frac{f(y)+f(x^*)}{2}$. Viszont

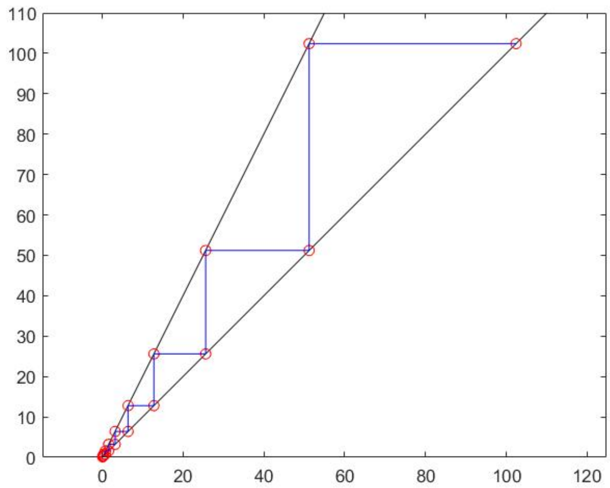
$$\lim_{l\to\infty} f(x_l') = f(x^*),$$

ami ellentmond annak, hogy $\{f(x_k)\}$ sorozat monoton csökken. Azaz $\{y_{l_m}\}$ x^*-hoz tart, így f folytonos deriválhatósága miatt $\partial_2 f(x^*) = 0$ is teljesül.

Hasonlóan belátható, hogy $\forall j \in \{1,2,..,n\}$-re $\partial_j f(x^*) = 0$. Azaz $\nabla f(x^*) = 0$, így az inverz függvény létezése miatt $x^* = a$.

Tehát $\{x_{k_l}\}$ a-hoz tart. Ez igaz $\{x_k\}$ minden konvergens részsorozatára, így maga az $\{x_k\}$ sorozat is tart a-hoz. ■

Itt is fontos, hogy $f''(a)$ pozitív vagy negatív definit, nem elég azt feltenni, hogy a-nak létezik olyan környezete, ahol a $\partial_j f((c_1,..,c_{j-1},x,c_{j+1},..,c_n)) = 0$ egyenletnek van megoldása minden környezetbeli c-re és $j \in \{1,2,..,n\}-$re.
Lássunk erre egy példát. Az $f(x,y) = 2x^2 - 4xy + y^2$ függvény esetén $f'(x,y) = (4x - 4y, -4x + 2y)$. Ekkor a $\partial_j f((c_1,..,c_{j-1},x,c_{j+1},..,c_n)) = 0$ egyenletnek minden $c \in \mathbb{R}^n$-re és $j = 1{,}2$-re létezik megoldása. Az egyetlen kritikus pont az origó, $det(f"(0{,}0)) = -8$ és az algoritmus minden lépésében távolodunk az origótól, bárhonnan is indulunk. Az ábrán a $(0.1{,}0.1)$ pontból indultunk.



3.3. ábra

3.3. Konvergencia sebesség

Az előző részben láttuk, hogy ha a kritikus pont és $f''(a)$ pozitív definit, akkor létezik a-nak olyan környezete, amelyből indulva konvergens az algoritmus. A következő kérdésünk a konvergencia sebessége lehet. Először 2 változóban adunk becslést erre.

3.6. Definíció (lineáris konvergencia) Az $\{x_k\} \subset \mathbb{R}^n$ sorozat lineárisan konvergál az $x \in \mathbb{R}^n$ ponthoz, ha létezik $k_0, l \in \mathbb{R}$ és $\lambda < 1$ szám, hogy minden $k \geq k_0$ esetén

$$||x_{k+l} - a|| < \lambda ||x_k - a||.$$

3.7. Tétel Legyen $G \subset \mathbb{R}^2$ nyílt halmaz és tegyük fel, hogy az $f : G \to \mathbb{R}$ kétszer folytonosan deriválható függvénynek kritikus pontja van az $a \in G$ pontban, $f''(a)$ pozitív vagy negatív definit és az elemi algoritmus által adott $\{X_k\} \subset \mathbb{R}^2$ sorozat konvergál a-hoz. Ekkor a konvergencia lineáris.

Bizonyítás. Most is csak azt az esetet bizonyítjuk, amikor $f''(a)$ pozitív definit.

f kétszer folytonosan differenciálható G-n, így $\partial_x f$ és $\partial_y f$ folytonosan deriválhatók G-n.

$$\partial_x f(a) = \partial_y f(a) = 0$$

és létezik $H \subset G$ környezete a-nak, hogy f'' pozitív definit H-n, így $\partial_x^2 f$ és $\partial_y^2 f$ pozitív H-n.
Ekkor teljesülnek a 2.22-os implicitfüggvény tétel feltételei, így léteznek a $\delta, \varepsilon_1, \varepsilon_2$ pozitív számok és $g : B(a_2, \delta) \to B(a_1, \varepsilon_1)$ és $h : B(a_1, \delta) \to B(a_2, \varepsilon_2)$ folytonosan differenciálható függvények úgy, hogy $\partial_x f(g(y), y) = 0$ és $\partial_y f(x, h(x)) = 0$ minden $x \in (a_1 - \delta, a_1 + \delta)$, $y \in (a_2 - \delta, a_2 + \delta)$ értékre.
Legyen $G : B(a_2, \delta) \to \mathbb{R}$ a következő:

$$G(y) = \partial_x f(g(y), y) = 0$$

Ekkor ha deriváljuk a G konstans 0 függvényt, akkor megkaphatjuk g deriváltját. Az összetett függvény deriválási szabályából:

$$0 = G'(y) = \partial_x^2 f(g(y), y) g'(y) + \partial_x \partial_y f(g(y), y)$$

Így

$$g'(y) = -\frac{\partial_x \partial_y f(g(y), y)}{\partial_x^2 f(g(y), y)}$$

$y = a_2$ helyen ez azt jelenti, hogy

$$g'(a_2) = -\frac{\partial_x \partial_y f(a)}{\partial_x^2 f(a)}$$

Hasonlóan belátható, hogy
$$h'(a_1) = \frac{\partial_y \partial_x f(a)}{\partial_y^2 f(a)}$$

Minden második lépésben változik az x és y koordináta is. Az x koordináta akkor változik, ha a $\partial_y f = 0$ görbéről a $\partial_x f = 0$ görbére lépünk vízszintesen. Az y koordináta pedig akkor, ha fordítva, a $\partial_x f = 0$ görbéről ugrunk a $\partial_y f = 0$ görbére függőlegesen. Vegyük $\{X_k\}$ x koordinátája által adott sorozatot és hagyjuk el belőle párosadik elemeket, mert ezek megegyeznek az utánuk jövő elemmel. Legyen $\{x_k\} \subset \mathbb{R}$ az így kapott sorozat. Szerkesszük meg hasonlóan az $\{y_k\} \subset \mathbb{R}$ sorozatot, ekkor minden páratlanadik elemet kell kihagyni az $\{X_k\}$ y koordinátája által adott sorozatnak. $\{x_k\} \to a_1$ és $\{y_k\} \to a_2$, így létezik k_0, hogy minden $k \geq k_0$ indexre $(x_k \in (a_1 - \delta, a_1 + \delta)$ és $y_k \in (a_2 - \delta, a_2 + \delta)$. Ekkor a $\partial_x f = 0$ görbére a $(g(y_k), y_k)$ pontban lépünk rá, míg a $\partial_y f = 0$ görbére az $(x_k, h(x_k))$ pontban. Ez azt jelenti, hogy $x_{k+1} = g(y_k)$ és $y_k = h(x_k)$. Tehát x_{k+1} illetve y_{k+1} meghatározható csak x_k illetve y_k felhasználásával:

$$x_{k+1} = g(y_k) = g(h(x_k))$$

és

$$y_{k+1} = h(x_{k+1}) = h(g(y_k))$$

Viszont ez csak akkor igaz, ha $h(x_k) \in B(a_2, \delta)$ illetve $g(y_k) \in B(a_1, \delta)$, különben $g(h(x_k))$ és $h(g(y_k))$ nem értelmezhető.
h folytonos a_1-ben, g pedig a_2-ben, valamint $h(a_1) = a_2$ és $g(a_1) = a_2$, így létezik $\eta > 0$, hogy minden $x \in B(a_1, \eta)$, $y \in B(a_2, \eta)$ számokra $h(x) \in B(a_2, \delta)$ és $g(y) \in B(a_1, \delta)$. Ezek szerint ha $x_k \in B(a_1, \eta)$ és $y_k \in B(a_2, \eta)$, akkor x_{k+1} és y_{k+1} értelmezhető az előbbi formulával. Márpedig létezik k_1, hogy minden $k \geq k_1$ indexre $(x_k \in B(a_1, \eta)$ és $y_k \in$ $\in B(a_2 \eta)$, mert $\{x_k\} \to a_1$ és $\{y_k\} \to a_2$.

Legyen $\alpha = g \circ h : B(a_1, \eta) \to B(a_2, \varepsilon_2)$ és $\beta = h \circ g : B(a_2, \eta) \to B(a_1, \varepsilon_1)$. Ezzel a jelöléssel tehát
$$x_{k+1} = \alpha(k_m)$$
és
$$y_{k+1} = \beta(y_k)$$
Lássuk be, hogy az $\{x_k\}$ és $\{y_k\}$ sorozatok lineárisan konvergálnak a_1-hez illetve a_2-höz. g és h folytonosan deriválhatóak, így α és β is.
$$\alpha'(a_1) = g'(h(a_1))h'(a_1) = \frac{\partial_y \partial_x f(a) \partial_x \partial_y f(a)}{\partial_y^2 f(a) \partial_x^2 f(a)} < 1$$
,mert f'' pozitív definit a-ban.

Legyen $\lambda \in \mathbb{R}$ olyan, hogy $\alpha'(a_1) < \lambda < 1$. α' folytonos a_1-ben, így létezik $0 < \nu < \eta$, hogy minden $c \in B(a_1, \nu)$-re $\alpha'(c) = (g \circ h)'(c) \leq \lambda$.

Feltehető, hogy $x_k \in (a_1, a_1 + \nu)$. Az $x_k \in (a_1 - \nu, a_1)$ eset hasonlóan bizonyítható.

$$\alpha(a_1) = a_1$$

és

$$\alpha'(x_k) \leq \lambda$$

Így

$$\lambda(x_k - a_1) \geq \int_{a_1}^{x_k} \alpha'(s)ds = \alpha(x_k) - \alpha(a_1)$$
$$x_{k+1} - a_1 < \lambda(x_k - a_1)$$

Vagyis azt kaptuk, hogy az $\{x_k\}$ sorozat lineárisan konvergál a_1-hez λ paraméterrel.

Hasonlóan belátható, hogy az $\{y_k\}$ sorozat lineárisan konvergál a_2-höz ugyanazzal a λ paraméterrel.

Ekkor $X_k = (x_{\lceil \frac{k}{2} \rceil}, y_{\lfloor \frac{k}{2} \rfloor})$, így

$$||X_{k+2}-a||^2 = (x_{\lceil \frac{k}{2} \rceil+1}-a_1)^2+(y_{\lfloor \frac{k}{2} \rfloor+1}-a_2)^2 \leq \lambda^2(x_{\lceil \frac{k}{2} \rceil}-a_1)^2+\lambda^2(y_{\lfloor \frac{k}{2} \rfloor}-a_2)^2 = \lambda^2||X_k-a||^2$$

Így

$$||X_{k+2} - a|| \leq \lambda||X_k - a||$$

Azaz $\{X_k\}$ lineárisan konvergál az a ponthoz. ■

Látjuk, hogy két dimenzióban az implicit függvények csak egy változótól függnek és az $\{x_{k+1}\}$ vektort meghatározza $\{x_k\}$. Több változó esetében ez nincs így, ezért nem ilyen egyszerű becslést adni és ezt nem is fogjuk megtenni általánosan. Azt gondoljuk viszont, hogy a 3.7. tétel igaz több változóban is és ennek bizonyításában segítségünkre lehet az az eset, amikor a parciális deriváltak lineárisak.

Ekkor nyilván egy kritikus pontja lesz a függvénynek. Az egyszerűség kedvéért tegyük fel, hogy ez az origó és a függvény konstans tagja 0. Ekkor a függvény a következő alakot ölti az $x \in \mathbb{R}^n$ pontban:

$$f(x) = \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=i}^{n} a_{ij} x_i x_j,$$

ahol $a_{ij} \in \mathbb{R},\ a_{ij} \neq 0$. Most csak akkor definiáltuk a_{ij}-t, ha $i \leq j$. Legyen a továbbiakban $a_{ij} = a_{ji}$ minden $1 \leq i, j \leq n$ indexre.

3.8. Tétel Legyen $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ az előbb felírt függvény. Ekkor az elemi algoritmus által adott $\{X_k\} \subset \mathbb{R}^n$ sorozat lineárisan konvergál az origóhoz bármely kezdőpontból indítjuk.

Bizonyítás. Először nézzük meg f parciális deriváltjait és győződjünk meg róla, hogy valóban lineárisak.

$$\partial_j f(x) = \sum_{i=1}^{n} b_{ij} x_i,$$

ahol $b_{ij} = a_{ij}$, ha $i \neq j$ és $bjj = 2a_{jj}$. Így az algoritmus egy lépésében, ha az x pontba vagyunk és a j-edik irányba keresünk kritikus pontot, akkor az x_j koordináta a

$$-\sum_{i \neq j} \frac{b_{ij} x_i}{b_{jj}}$$

értékre változik, a többi pedig változatlan marad. Ez azt jelenti, hogy X_{k+1} koordinátái előállnak mint X_k koordinátáinak lineáris kombinációja. Tehát egy lineáris transzformáció viszi X_k-t X_{k+1}-be, amit reprezentálhatunk egy mátrixszal. Nyilván ez a mátrix csak attól függ, hogy melyik irányba lépünk, így minden irányhoz egy mátrix tartozik. Jelöljük a j-edik irányhoz tartozó mátrixot B_j-vel. Az előzőek fényében ez a mátrix úgy néz ki, hogy a j-edik sor kivételével minden sorba a főátlóban áll egy egyes, a többi helyen pedig 0, míg a j-edik sorban a főátlóban áll 0, az i-edik oszlopban pedig $-\frac{b_{ij}}{b_{jj}}$, ha $i \neq j$. Ezzel a jelöléssel, ha az x pontban voltunk és az első koordináta irányba lépünk először, akkor n lépés után a

$$B_n \cdot .. \cdot B_1 x = Cx$$

pontba jutunk. Tudjuk, hogy az algoritmus konvergens, bárhonnan is indítjuk és az origóba konvergál. Ennek következményeként

$$\lim_{p \to \infty} C^p x = 0 \qquad \forall x \in \mathbb{R}^n.$$

A koordináta vektorokat behelyettesítve kapjuk, hogy C^p az azonosan 0 mátrixhoz tart. Algebrából ismert, hogy $\lim_{p\to\infty} C^p = 0$ pontosan akkor teljesül, ha C spektrálsugara kisebb mint egy, azaz $\rho(C) < 1$ és $\rho(c) = \lim_{p\to\infty} ||C^p||^{\frac{1}{p}}$.
Tehát

$$\lim_{p \to \infty} ||C^p||^{\frac{1}{p}} < 1,$$

azaz létezik $\lambda < 1$ és $p_0 \in \mathbb{R}$, hogy minden $p \geq p_0$ esetén $||C^p||^{\frac{1}{p}} < \lambda$, azaz $||C^p|| < \lambda^p$. Így

$$||x_{pn}|| = ||C^p x_0|| \leq ||C^p|| ||x_0|| < \lambda^p ||x_0||$$

■

4. fejezet

Általánosítás

Az előző fejezetben láttuk, hogy ha ciklikusan sorba vesszük a koordináta irányokat és ezen irányokba keressük az egyenesen értelmezett egyváltozós függvény kritikus pontjait, akkor megfelelő körülmények mellett a stacionárius pontokhoz konvergál az elemi algoritmus. Ezt két tekintetben is lehet általánosítani. Az első, hogy nem a koordináta irányokat vesszük, hanem tetszőleges $p_k \in \mathbb{R}^n$ irányokat. A másik lehetőség pedig, hogy nem kritikus pontot keresünk, hanem olyan x pontot a p_k irányokban, ahol $\partial_{p_k} f(x)$ valami konstansszorosa $\partial_{p_k} f(x_k)$-nak.

Ezt az eljárást írja le J.M. Ortega és W.C. Rheinboldt az Iterative Solution of Nonlinear Equations in Several Variables [3] című könyvében a 14. fejezetben. Az ebben a részben bevezetett definíciók és leírt tételek megtalálhatóak itt.

A módszer formálisan leírva azt jelenti, hogy ha $\mu \in [0,1]$ és $\{p_k\}$ a választott irányok sorozata, akkor az $x_{k+1} = x_k - \alpha_k p_k$ rekurzióval kapjuk a sorozatot, ahol α_k a legkisebb abszolútértékű megoldása a $g'(x_k - \alpha p_k)p_k = \mu g'(x_k)p_k$ egyenletnek.

A $\mu = 0$ választás mellett a k. lépésben az x_k-hoz legközelebbi kritikus pontot keressük p_k irányban.
Ha $p_k = e_{((k-1) \ mod \ n)+1}$, akkor a koordináta irányokkal párhuzamos egyeneseken keressük az új pontot. Ha μ-t 0-nak választjuk, akkor az előző fejezetben tárgyalt algoritmust kapjuk vissza.
Legyen $p_k = \nabla g(x_k)$. Ekkor mindig a gradiens vektorral párhuzamos irányba lépünk. Ezt gradiens-módszernek nevezzük. Ezt a választást az indokolja, hogy egy f n-változós valós függvény a gradiens irányába növekszik leggyorsabban, azaz az iránymenti deriváltak közül a gradiens irányú a legnagyobb.

A továbbiakban tegyük fel azt is, hogy α_k nemnegatív, azaz csak az egyenes egyik felén keressük az egyenlet gyökeit, és azt, hogy $f'(x_k)p_k \geq 0$. Ez az egyenlőtlenség akkor teljesül,

ha $f'(x_k) = 0$ vagy ha a $f'(x_k)$ és p_k közti szög legfeljebb $\frac{\pi}{2}$.
Legyen $g(\alpha) = f(x_k - \alpha p_k)$. Ekkor $g'(0) = -f'(x_k)p_k \leq 0$. Így ha $f'(x_k)p_k$ nem 0, akkor g lokálisan csökken a 0-ban, azaz $\exists \delta > 0$, hogy minden $\alpha \in (0, \delta)$ helyen $f(x_k - \alpha p_k) =$ $= g(\alpha) < g(0) = f(x_k)$. Szemléletesen ez azt jelenti, hogy ha elindulunk a p_k-val ellentétes irányba, akkor lefelé fogunk menni.
A későbbiekben ezen feltételeknek lesz köszönhető, hogy az $\{f(x_k)\}$ sorozat monoton csökkenő lesz. Nyilván ekkor lokális maximum helyeket nem tud megtalálni az algoritmus. Ha lokális maximum helyet szeretnénk keresni, akkor itt is két triviális lehetőségünk van. Vagy a $-f$ függvényre futtatjuk le az előbb felírt algoritmust, vagy úgy változtatjuk, hogy az egyenes másik felén, azon amelyikbe p_k mutat, keressük x_{k+1}-et.

Először szükségünk lesz pár definícióra, amelyeket használni fogunk a tételeknél. A továbbiakban legyen $G \subset \mathbb{R}^n$ nyílt halmaz és $f : G \to \mathbb{R}$ függvény.

4.1. Definíció Azt mondjuk, hogy f változékony a $G_0 \subset G$ halmazon, ha nem konstans egy G_0-ban fekvő szakaszon sem, azaz nem létezik $x, y \in G_0$, hogy $(1-t)x + ty \in G_0$ és $f((1-t)x + ty) = f(x)$ minden $t \in [0,1]$ esetén.

4.2. Definíció Az $\{x_k\} \subset G_0 \subset G$ erősen csökkenő G_0-ban, ha

$$(1-t)x_k + tx_{k+1} \in G_0 \qquad \forall t \in [0,1]$$

és

$$f(x_k) \geq f((1-t)x_k + tx_{k+1}) \geq f(x_{k+1}) \qquad \forall t \in [0,1]$$

4.3. Definíció Legyen $x_0 \in G$ és legyen $L(f(x_0)) = \{f(x) \leq f(x_0)\} \subset G$ és $L^0(f(x_0))$ az $L(f(x_0))$ halmaz azon összefüggő része, amely tartalmazza az x_0 pontot.

Lemma Legyen $G \subset \mathbb{R}^n$ nyílt halmaz, $f : G \to \mathbb{R}$ folytonos G-n és folytonosan differenciálható az $L^0 = L^0(f(x_0))$ halmazon valamilyen $x_0 \in G$-re. Ekkor minden $x \in L^0$, $p \in \mathbb{R}^n$ estén, ha $f'(x)p > 0$, akkor létezik $\alpha^* > 0$, hogy $f(x) = f(x - \alpha^* p)$ és $[x, x - \alpha^* p] \subset L^0$.

4.4. Tétel Legyen f folytonosan differenciálható a G halmazon és tegyük fel, hogy $L^0 =$ $= L^0(f(x_0)) \subset G$ kompakt és $\mu \in [0,1)$ adott. Nézzük az

$$x_{k+1} = x_k - \alpha_k p_k, \quad k = 0,1,..,$$

formulával kapott $\{x_k\}$ sorozatot, ahol $p_k \neq 0$, $f'(x_k)p_k \geq 0$ és

$$\alpha_k = min\{\alpha \geq 0 : f'(x_k - \alpha p_k)p_k = \mu f'(x_k)p_k\}.$$

Ekkor $\{x_k\} \subset L^0$, $\{x_k\}$ erősen csökkenő L^0-ban és

$$\lim_{k\to\infty} \frac{f'(x_k)p_k}{||p_k||} = 0.$$

Bizonyítás. Csak azt bizonyítjuk, hogy $\{x_k\} \subset L^0$ és $\{x_k\}$ erősen csökkenő L^0-ban. A teljes bizonyítás elolvasható J.M. Ortega és W.C. Rheinboldt könyvében [3].

Indukcióval bizonyítunk. Tegyük fel, hogy $x_k \in L^0$. Ha $f'(x_k)p_k = 0$, akkor $\alpha_k = 0$ és így $x_{k+1} = x_k$. Ezért feltehető, hogy $f'(x_k)p_k > 0$. Ekkor az előző lemma szerint létezik $t_k > 0$, hogy $[x_k, x_k - t_k p_k] \subset L^0$ és $f(x_k) = f(x_k - t_k p_k)$, így a Lagrange középértéktétel miatt létezik $t^* \in (0.t_k)$, amelyre

$$f'(x_k - t^* p_k)p_k = 0.$$

f' folytonos, így a $f'(x_k - \alpha p_k)p_k = \mu f'(x_k)p_k$ egyenletnek létezik megoldása és $f'(x_k)p_k >$ > 0, így létezik legkisebb megoldás, $\alpha_k > 0$. Ezért x_{k+1} jól definiált és L^0-ban van.

Nyilván

$$f'(x_k - \alpha p_k)p_k > \mu f'(x_k)p_k \qquad \forall \alpha \in [0, \alpha_k),$$

így $f(x_k - \alpha p_k)$ monoton csökkenő az $[0, \alpha_k]$ intervallumban. Ezért

$$f(x_k) \geq f((1-t)x_k + t x_{k+1}) \geq f(x_{k+1}) \qquad \forall t \in [0,1],$$

így $\{x_k\}$ erősen csökkenő az L^0 halmazon. ■

4.5. Tétel Legyen f folytonos és változékony a $G_0 \subset G$ kompakt halmazon. Ekkor minden erősen csökkenő $\{x_k\} \subset G_0$ sorozatra teljesül, hogy $\lim_{k\to\infty} x_k - x_{k+1} = 0$

Bizonyítás. Indirekt tegyük fel, hogy létezik $\{x_{k_i}\}$ részsorozat hogy

$$||x_{k_i+1} - x_{k_i}|| \geq \varepsilon > 0 \qquad \forall i \geq 0.$$

G_0 kompakt, így feltehető, hogy $\lim_{i\to\infty} x_{k_i} = x^*$ és $\lim_{i\to\infty} x_{k_i+1} = x^{**}$. Ekkor a határátmenet miatt $||x^* - x^{**}|| \geq \varepsilon > 0$ és $x^*, x^{**} \in G_0$.
$f(x_k) \geq f(x_{k+1})$ és f alulról korlátos a G_0 halmazon, így

$$\lim_{k\to\infty} (f(x_k) - f(x_{k+1})) = 0,$$

amiből az $f(x^*) = f(x^{**})$ egyenlőség következik. $\{x_k\}$ erősen csökkenő és G_0 zárt így $(1-t)x^* + tx^{**} \in G_0$ minden $t \in [0,1]$ értékre. Végül a

$$f(x_{k_i}) \geq f((1-t)x_{k_i} + t x_{k_i+1}) \geq f(x_{k_i+1})$$

egyenlőségből határátmenettel kapjuk, hogy

$$f(x^*) = f((1-t)x^* + tx^{**}) = f(x^{**}) \qquad \forall t \in [0,1]$$

kihasználva, hogy f folytonos.
Tehát f konstans az x^*, x^{**} közötti szakaszon, ami ellentmond annak, hogy f változékony G_0-on. ■

4.6. Tétel Legyen f folytonosan differenciálható a $G_0 \subset G$ kompakt halmazon és tegyük fel, hogy Ω, a G_0-beli kritikus pontok halmaza, véges. Legyen $\{x_k\} \subset G_0$ pontsorozat olyan, hogy $\lim_{k\to\infty} x_k - x_{k+1} = 0$ és $\lim_{k\to\infty} f'(x_k) = 0$.
Ekkor $\lim_{k\to\infty} x_k = x^*$ és $f'(x^*) = 0$.

Bizonyítás. Legyen A az $\{x_k\}$ sorozat torlódási pontjainak a halmaza. f' folytonos, így minden A-beli pont kritikus pont is, azaz $A \subset \Omega$. Tehát A is véges.
Tegyük fel, hogy $A = \{z_1, .., z_m\}$.
Ha $m = 1$, akkor $\{x_k\}$ egy kompakt halmazon belül van és egyetlen torlódási pontja van, így a torlódási pont egyben határértéke is. Tehát a sorozat egy kritikus ponthoz konvergál.
Ha $m > 1$, akkor legyen

$$\delta = min\{||z_i - z_j|| : \ i \neq j, \ i, j = 1, .., m\} > 0$$

Válasszunk $k_0 \geq 0$-t úgy, hogy $x_k \in \bigcup_{i=1}^{m} B(z_i, \frac{\delta}{4})$ és $||x_k - x_{k+1}|| \leq \frac{\delta}{4}$ minden $k \geq k_0$-ra. Ezt megtehetjük, mert a $G_0 \setminus (\bigcup_{i=1}^{m} B(z_i, \frac{\delta}{4}))$ halmazban csak véges sok $\{x_k\}$-beli pont van. Feltehető, hogy létezik $k_1 \geq k_0$, hogy $x_{k_1} \in B(z_1, \frac{\delta}{4})$. Ennek következtében

$$||z_i - x_{k_1+1}|| \geq ||z_i - z_1|| - (||z_1 - x_{k_1}|| + ||x_{k_1} - x_{k_1+1}||) \geq \delta - \frac{2\delta}{4} = \frac{\delta}{2}, \quad i \geq 2.$$

Így $x_{k_1+1} \in B(z_1, \frac{\delta}{4})$. Innen indukcióval látszik, hogy $x_k \in B(z_1, \frac{\delta}{4})$ minden $k \geq k_1$-re. Ez viszont ellentmond annak, hogy $z_2, .., z_m$ torlódási pontjai $\{x_k\}$-nak. Így $m = 1$. ■

Legyen $f : G \to \mathbb{R}$ függvény folytonosan deriválható G-n és legyen $x_0 \in G$ olyan, hogy $L^0 = L^0(f(x_0))$ kompakt halmaz. Tegyük fel továbbá, hogy f változékony L^0-on és f-nek véges sok kritikus pontja van itt. Valamint legyen $\mu \in [0,1)$ tetszőleges. Ekkor ha a 4.4. tétel szerint választjuk α_k értékeket, akkor egy $\{x_k\}$ erősen csökkenő sorozatot kapunk, amelyre teljesül, hogy $\lim_{k\to\infty} \frac{f'(x_k)p_k}{||p_k||} = 0$. f folytonosan differenciálható és változékony L^0-on valamint $\{x_k\}$ erősen csökkenő, így a 4.5. tétel miatt teljesül, hogy $\lim_{k\to\infty} x_k - x_{k+1} = 0$. Ha azt is tudnánk, hogy $\lim_{k\to\infty} f'(x_k) = 0$, akkor bizonyítani tudnánk, hogy $\{x_k\}$ egy kritikus ponthoz konvergál. Tehát a továbbiakban a $\lim_{k\to\infty} \frac{f'(x_k)p_k}{||p_k||} =$ $= 0$ és $\lim_{k\to\infty} f'(x_k) = 0$ kapcsolatát kell vizsgálni.

Először vegyük az $\mathbb{R}^n$-beli egységnyi hosszú vektorok egy olyan véges halmazát, amelyek generálják $\mathbb{R}^n$-t. A p_k vektorokat kapjuk úgy, hogy ciklikusan végig megyünk ezen a halmazon és ha $f'(x_k)p_k < 0$, akkor p_k ellentettjét vegyük. Ekkor

$$\lim_{k\to\infty} \frac{f'(x_k)p_k}{||p_k||} = \lim_{k\to\infty} f'(x_k)p_k = 0$$

Ebből pedig következik, hogy

$$\lim_{k\to\infty} f'(x_k) = 0.$$

Viszont ekkor még be kell látni, hogy a $\{p_k\}$ sorozat kielégíti a 4.4. tétel feltételeit. A p_k vektor előjele függ x_k-tól, azaz együtt definiáljuk x_k-val, így először a $\{p_k\}$ sorozat létezését kell bizonyítani. Ehhez azt kell igazolnunk, hogy $\{x_k\}$ létezik és jól definiált. Ezt indukcióval könnyen megtehetjük. Tegyük fel, hogy $x_0, x_1, .., x_k$ jól definiált és L^0-ban fekszenek. Vegyük a p_k vektort. A 4.4. tétel bitonyításának első része mutatja, hogy x_{k+1} jól definiált és $x_{k+1} \in L^0$. Ekkor az indukció miatt az egész $\{x_k\}$ sorozat jól definiált és L^0-ban van.
A $p_k \neq 0$ és $f'(x_k)p_k \geq 0$ kifejezések nyilván teljesülnek.

Ha a véges sok egységvektor nem generálja $\mathbb{R}^n$-t akkor nem biztos, hogy kritikus ponthoz konvergál az algoritmus. Viszont az teljesül, hogy a limeszpontban a gradiens merőleges a kifeszített altérre.

Vizsgáljuk a gradiens módszert, azaz legyen $p_k = \nabla f(x_k)$. Ekkor $\frac{f'(x_k)p_k}{||p_k||} = ||f'(x_k)||$, amiből $\lim_{k\to\infty} f'(x_k) = 0$ következik.
Hasonlóan mint az előbb, itt is bizonyítható $\{p_k\}$ létezése.

4.7. Definíció Egy $\sigma : [0, \infty) \to [0, \infty)$ függvény F-függvény, ha minden $\{t_k\} \subset [0, \infty)$ sorozatra

$$\lim_{k\to\infty} \sigma(t_k) = 0 \ \Rightarrow \ \lim_{k\to\infty} t_k = 0.$$

4.8. Definíció Legyen $f : G \to \mathbb{R}$ differenciálható G-n és $\{x_k\} \subset G$. Ekkor azt mondjuk, hogy egy $\{p_k\}$ nem 0 vektorokból álló sorozat gradient-related $\{x_k\}$-hoz, ha létezik σ F-függvény, hogy

$$|\frac{f'(x_k)p_k}{||p_k||}| \geq \sigma(||f'(x_k)||), \quad k = 0{,}1, ..$$

4.9. Állítás Legyen $f : G \to \mathbb{R}$ differenciálható G-n és $\{x_k\} \subset G$. Ha $\{p_k\}$ gradient related $\{x_k\}$-hoz és $\lim_{k\to\infty} \frac{f'(x_k)p_k}{||p_k||} = 0$, akkor

$$\lim_{k\to\infty} f'(x_k) = 0.$$

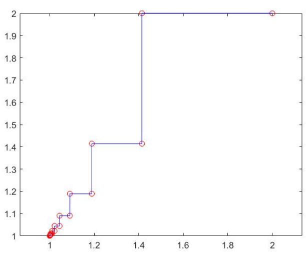
Bizonyítás. $\{p_k\}$ gradient related, így $\lim_{k\to\infty} \frac{f'(x_k)p_k}{||p_k||} = 0$, ból következik, hogy létezik $\sigma : [0, \infty) \to [0, \infty)$ F-függvény, amelyre $\lim_{k\to\infty} \sigma(||f'(x_k)||) = 0$, ahonnan $\lim_{k\to\infty} f'(x_k) = = 0$. ■

Végül mondjunk ki egy tételt a konvergencia sebességre. A bizonyítás most is benne van J.M. Ortega és W.C. Rheinboldt könyvében és azon múlik, hogy létezik $\gamma > 0$ és k_0, hogy $f(x_k) - f(x_{k+1}) \geq \gamma||\nabla f(x_k)||^2$ minden $k \geq k_0$-ra.

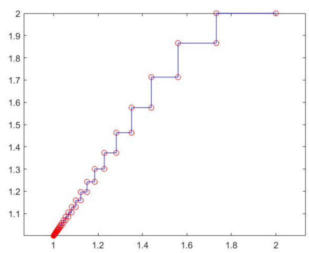
4.10. Tétel Legyen $f : G \to \mathbb{R}$ függvény folytonosan deriválható G-n és legyen $x_0 \in G$ olyan, hogy $L^0 = L^0(f(x_0))$ kompakt halmaz. Továbbá tegyük fel, hogy x^* az egyedüli kritikus pont az L^0 halmazban és f kétszer folytonosan deriválható x^* egy környezetében és $f''(x^*)$ nem szinguláris. Legyen $\{p_k\}$ nem 0 vektorok egy olyan halmaza, melyre $f'(x_k)p_k \geq$ $\geq c||f'(x_k)||\ ||p_k||,\ k = 0{,}1, ..$ és válasszuk az $\{x_k\}$ sorozatot a 4.4. tétel szerint. Ekkor $\{x_k\}$ konvergál x^*-hoz és teljesül, hogy

$$\limsup_{k\to\infty} ||x_k - x^*||^{\frac{1}{k}} < 1.$$

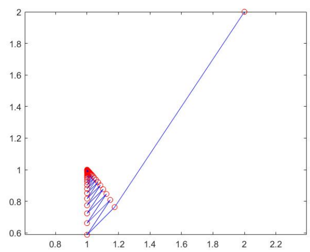
Vegyük az $f(x, y) = \frac{x^3}{3} - xy + \frac{y^2}{2}$ függvényt és futtassuk le rá az algoritmust különböző p_k vektorok és μ esetén.



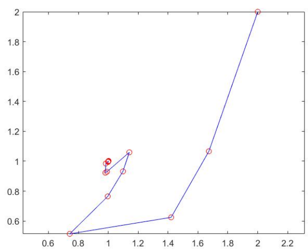
(a) $p_k = \pm e_k,\ \mu = 0$



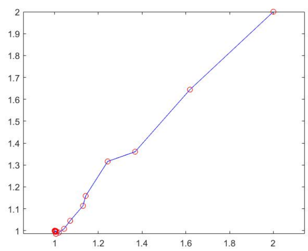
(b) $p_k = \pm e_k,\ \mu = 0.5$



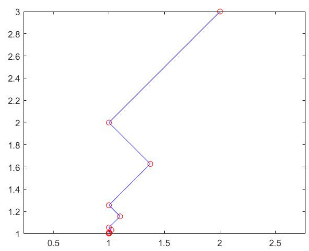
(c) p_k a $\pm(1{,}1)$ és $\pm(2{,}3)$ vektorok felváltva, $\mu = 0$



(d) p_k random, $\mu = 0$



(e) p_k random, $\mu = 0.3$



(f) $p_k = \nabla f(x_k)$, $\mu = 0$

4.1. ábra

Az $(a), (b)$ és (c) grafikonok azt a fentebb már tárgyalt esetet mutatják, amikor a $\{p_k\}$ vektorok egy véges halmazból kerülnek ki.
A (d) és (e) grafikonokon a random $\{p_k\}$ választást úgy kell érteni, hogy az egységkörön választottunk egyenletes eloszlásból egy vektort minden lépésben és addig próbálkoztunk, amíg a feltételeket kielégítő vektort nem kaptunk.
Érdekesség, hogy az utolsó ábrán, ami a gradiens módszert ábrázolja, a kiválasztott irányok merőlegesek egymásra csakúgy, mint az elemi algoritmus esetében. Viszont ha belegondolunk, akkor látjuk, hogy ennek így kell lennie. Tegyük fel, hogy elég közel vagyunk a kritikus ponthoz, ami minimumhely, így minden lépésben szigorú lokális minimumot találunk a gradiens irányával párhuzamos egyenesen. Ez azt jelenti, hogy k-adik lépésben az x_{k-1} ponton átmenő, $p_k = \nabla f(x_{k-1})$ irányvektorú egyenesen keressük az x_{k-1}-hez legközelebbi lokális minimumhelyet, amely x_k lesz. Ekkor az $f(x_k)$-hoz tartozó szinthalmazt

érinti az egyenes, mert x_k szigorú lokális minimum rajta. Tudjuk, hogy a gradiens merőleges a szinthalmazra azaz merőleges az egyenesre. $p_{k+1} = \nabla f(x_k)$, ami pedig pont azt jelenti, hogy p_{k+1} merőleges a p_k vektorra.

5. fejezet

Példák

Ebben a fejezetben pár olyan példát mutatunk, amelyek egy többváltozós függvény szélsőértékeinek megkeresére vezethetőek vissza. A problémák egyszerűek, mégis olyan függvényekhez jutunk, amelyek szélsőértékeit nem tudjuk papíron, kézzel megkeresni. Vagy túl bonyolultak a parciális deriváltak, vagy túl sok változó van. Az első fejezetben tárgyalt elemi algoritmust fogjuk alkalmazni.

5.1. Komplex polinom gyökeinek megkeresése

Vegyük az $f(z) = z^n + a_{n-1}z^{n-1} + ... + a_1 z + a_0$ n-edfokú, komplex együtthatós polinomot. Vizsgáljuk az $|f(z)|^2$ kifejezést. Ha z-t $z = x + yi$ alakban írjuk fel, ahol $x, y \in \mathbb{R}$, akkor $|f(z)|^2$ egy $\mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ kétváltozós polinomként fogható fel, ami a zérushelyeken 0-át vesz fel, míg minden más esetben pozitív. Így $|f(z)|^2$ folytonosan differenciálható és lokális minimumhelyei között szerepelnek f zérushelyei.
Megjegyezzük, hogy tetszőleges egész, $\mathbb{C} \to \mathbb{C}$ holomorf, függvény esetén működik az előbb leírt módszer, sőt tetszőleges $g : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ függvény gyökeit kereshetjük így. Ez a technika akkor hatékony, ha sok kezdőpontból indulva g-nek valamelyik gyökét találjuk meg. Ez akkor teljesül, ha $|g|^2$-nek a g gyökein kívül nem sok kritikus pontja van.

A következő tétel a Rouché-tétel egyik következménye és abban nyújt segítséget, hogy hol keressük a gyököket.

5.1. Tétel Legyen $f(z) = z^n + a_{n-1}z^{n-1} + ... + a_1 z + a_0$, ahol $a_i \in \mathbf{C}$. Ekkor f-nek minden gyöke a $|z| = 1 + max(|a_i|)$ egyenletű körön belül van.

Ezen megfontolásokkal felvértezve nézzünk egy példát. Vegyük az $f(x) = x^3 + 2x^2 - x + i$ polinomot és keressük a gyökeit. Az előző tételből tudjuk, hogy f minden gyöke a

$|z| < 1 + max(a_i) = 3$ körön belül van. Így pár találomra választott kezdőpontból futtatva az algoritmust a $h(x, y) = |f(x + yi)|^2$ függvényre megkaphatjuk f gyökeit.

$$f(x + iy) = (x^3 - 3xy^2 + 2x^2 - 2y^2 - x) + (3x^2y - y^3 + 2xy - y + 1)i$$

így

$$h(x, y) = (x^3 - 3xy^2 + 2x^2 - 2y^2 - x)^2 + (3x^2y - y^3 + 4xy - y + 1)^2$$

Aminek a parciális deriváltjai:

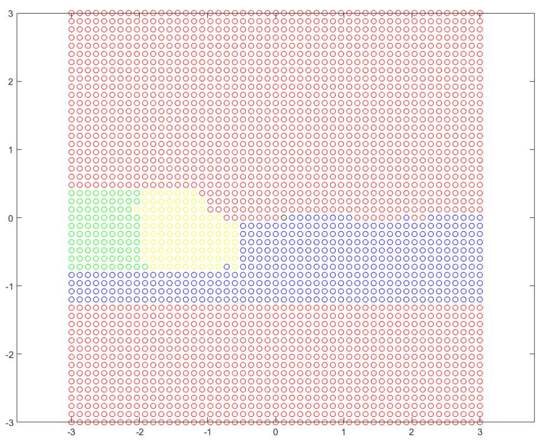
$$\partial_x h(x, y) = 6x^5+20x^4+12x^3y^2+8x^3+24x^2y^2-12x^2+6xy^4+16xy^2+12xy+2x+4y^4+8y-4y^2$$

$$\partial_y h(x, y) = 6y^5+12x^2y^3+16xy^3+24y^3-6y^2+6x^4y+16x^3y+16x^2y+2y-8xy+6x^2+8x-2$$

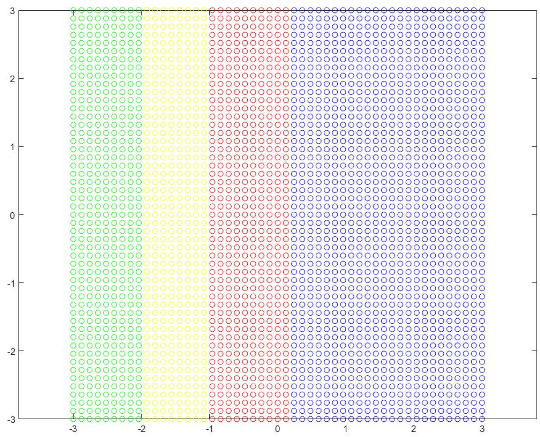
Látjuk, hogy már egy egyszerű, harmadfokú polinom esetén is bonyolult formulákat kapunk a parciális deriváltakra, a $\nabla f(x, y) = 0$ egyenletrendszert gépiesen, trükk nélkül nagyon hosszadalmas lenne megoldani. Magasabb fokú polinomoknál pedig még tovább nehezedik a helyzet, ezért indokolt numerikus módszert alkalmazni.

Indítsuk el az algoritmust pár kezdőpontból. Ekkor a következő 4 pontot kapjuk eredményül: -0.2303+0.4976i, 0.6602-0.3542i, -2.4300-0.1434i és -1.5486. A -1.5486 valós, így ez nem lehet gyöke az egyenletnek, a többi pontról behelyettesítéssel győződhetünk meg, hogy valóban gyökök.

Végül nézzük meg, hogy a $H = [-3{,}3] \times [-3{,}3]$ halmazbeli pontokból indulva mely pontokat kapjuk eredményül. Helyezzünk el H-n egyenletesen 51×51 darab kezdőpontot. Ha egy pont piros az azt jelenti, hogy az algoritmus a -0.2303+0.4976i pontot találta meg onnan indulva, ha kék, akkor a 0.6602-0.3542i pontot, ha zöld, akkor a -2.4300-0.1434i pontot és ha sárga akkor a -1.5486-ot.



5.1. ábra



5.2. ábra

A két ábra jelentősen különbözik egymástól. Ez azért van mert számít, hogy melyik irányba indulunk el az első lépésnél. Az is észrevehető, hogy van olyan pont, ami más színű a két ábrán. Ez azt jelenti, egy pontból több kritikus pontot is megtalálhatunk. Hogy melyikben ér véget az algoritmus, az attól függ, hogy melyik irányba léptünk először.
Az $y = c_2$ vízszintes illetve $x = c_1$ függőleges egyeneseken legfeljebb eggyel kevesebb színváltás lehet, mint ahány gyöke van a $g(x) = \partial_x f(x, c_2)$ illetve $h(y) = \partial_y f(c_1, y)$ függvényeknek. Ez annak köszünhető, hogy az első lépés után mindig a legközelebbi gyökbe lépünk.
Ennek ellentmond az első ábrán az $y = 0$ egyenes. Itt 5 gyök van és 5 színátmenet. A magyarázat az, hogy a MATLAB fzero függvényét használom gyökkeresésre, amely néha nem a legközelebbi gyököt találja meg.

5.2. Szabadon mozgó töltések egyensúlyi állapota

Vegyünk n db pozitív Q töltésű részecskét, amelyek szabadon mozoghatnak az egységnégyzetben. Célunk az egyensúlyi helyzetek megtalálása, azaz az olyan helyzeteké, ahol ha magára hagyjuk a rendszert, akkor mozdulatlan marad.
Fizikailag ezt úgy képzelhetjük el, hogy az egységnégyzet határán egy nagyon masszív, áttörhetetlen fal van, ami által a vele érintkező részecskékre kifejtett kényszererő a sarkokban a négyzet belsejébe, a többi pontban pedig a falra merőlegesen mutat befelé. A rendszer akkor van egyensúlyban, ha minden részecskére ható eredő erő 0, azaz a négyzet belsejében lévő részecskékre a többi részecske által kifejtett erők eredője 0, míg a falon lévőknél merőleges a falra.
Az i-edik pont koordinátái legyenek x_i illetve x_{i+n}. Ekkor a kölcsönhatási energia a kö-

vetkező alakot ölti:

$$f(x_1,...,x_{2n}) = \sum_{1\le i<j\le n} k\frac{Q^2}{r_{ij}} = \sum_{1\le i<j\le n} k\frac{Q^2}{\sqrt{(x_i-x_j)^2+(x_{i+n}-x_{j+n})^2}}$$

Most azt fogjuk megmutatni, hogy a kölcsönhatási energia kritikus pontjai adják az egyensúlyi helyzeteket.

Ehhez először nézzük f gradiensét. ∇f i-edik koordinátája az x helyen a következő:

$$(\nabla f)_i(x) = \sum_{i\neq j} k\frac{Q^2}{((x_i-x_j)^2+(x_{i+n}-x_{j+n})^2)^{\frac{3}{2}}}(x_i-x_j),$$

ahol $i > n$ esetén az $i+n$ indexet modulo $2n$ kell érteni.
Ez a kifejezés épp azt mondja meg, hogy az i-edik részecskére mekkora a többi részecske által kifejtett eredő erő egyik komponense. A másik komponens pedig a $(\nabla f)_{i+n}(x)$ érték lesz. Így az i-edik részecskére a többi részecske által kifejtett eredő erő épp $(\partial_i f(x), \partial_{i+n} f(x))$.

Fizikai meggondolásból adódik, hogy f-nek nincs lokális maximuma, ha nem engedjük meg, hogy 2 részecske a tér ugyanazon pontjában legyen. Indirekt tegyük fel, hogy van, mondjuk az x pontban. Ekkor x a részecskéknek egy olyan elhelyezkedését írja le, ahol a kölcsönhatási energia lokálisan maximális. Vegyük azt az x' elhelyezkedést, amit úgy kapunk, hogy egy nagyon kicsit összezsugorítjuk a részecskék közötti távolságokat úgy, hogy a távolságok páronkénti aránya ugyanaz maradjon. A kölcsönhatási energia képletéből látszik, hogy ekkor f nő. A zsugorítás mértékét tetszőlegesre választhatjuk, így x' tetszőlegesen közel lehet x-hez, ami ellentmond annak, hogy x lokális maximum.

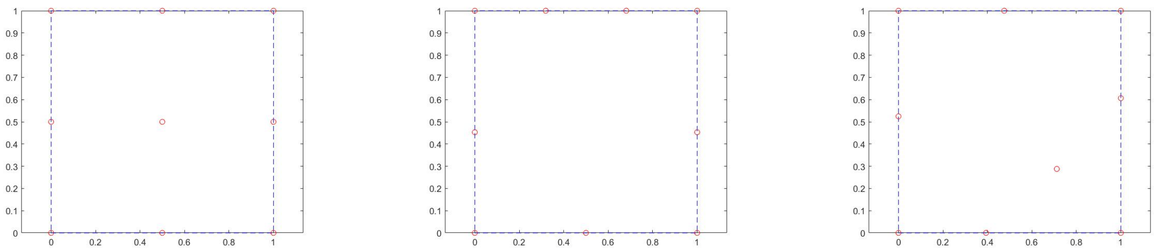
Először vizsgáljuk meg, hogy milyen értelmezési tartományon akrjuk f-et vizsgálni. Minden részecske az egységkörben van pontosan akkor ha minden i-re $0 \le x_i \le 1$. Tehát legyen $G = [0,1]^{2n}$ kompakt halmaz és keressük f lokális szélsőértékeit G-n.

Ha f-nek kritikus pontja van az $a \in intG$ pontban, akkor $\partial_i f(a) = 0$ minden i-re. Így a részecskékre ható eredő erő 0, azaz egyensúlyi helyzetben vannak a részecskék.
Ha f-nek G határán van lokális minimuma, akkor a Lagrange multiplikátor tételt alkalmazhatjuk. G határán akkor vagyunk, ha legalább az egyik koordináta 0 vagy 1. Ez azt jelenti, hogy G határa előáll mint 4^n db, azaz véges sok, zárt halmaz uniója. Itt az egyes halmazok azokat az eseteket jelölik, ahol pár koordinátát lerögzítünk 0 vagy 1-ként. Vegyünk találomra $k+l$ db koordinátát. Az első k db-ot rögzítsük 0-ként, a többit pedig 1-ként. Legyenek a koordináta irányok sorba $v_1,..,v_{k+l}$. Legyen $g_i(x) = x_{v_i} = 0$, $(i = 1..k)$ és $g_j(x) = x_{v_j} = 1$, $(j = k+1,,k+l)$. A Lagrange multiplikátor szerint ha f-nek feltételes szélsőértéke van a-ban, akkor létezik $\lambda_1,..,\lambda_{k+l} \in \mathbb{R}$, hogy $\nabla f(a) = \lambda_1 \nabla g_1(a) + .. +$ $+ \lambda_{k+l} g_{k+l}(a)$. Ez azt jelenti, hogy azokra a részecskékre, amelyek a falon vannak, a többi részecske által kifejtett erő merőleges a falra és amelyek nincsenek a falon, az azokra ható

erő eredője 0.
Ha az összes lehetséges módon rögzítjük a koordinátákat, azaz mind a 4^n esetet végig néz-zük, akkor megkapjuk az összes határon lévő szélsőértékhelyet. Tehát azt kaptuk, hogy ha a kölcsönhatási energiának szélsőértéke van, akkor minden részecskékre a rá ható erők eredője 0.

Az első fejezetben tárgyalt algoritmus nem alkalmas H kompakt halmazon lokális szélsőértékhely keresésére, a határon lévő pontokat nem találja meg. Módosítsuk úgy, hogy egy lépésben ne egyváltozós értelemben vett kritikus pontot keressen az egyenes H-ba eső szakaszán, hanem lokális minimumot. Ha a H halmaz zárt szakaszok Descartes szorzataként áll elő, akkor belátható, hogy ha konvergens az algoritmus, és a limeszpont H egy belső pontja, akkor az kritikus pont, míg határpont esetén kritikus pont vagy lokális minimum mindkét rajta átmenő koordináta irányokkal párhuzamos egyenes H-ba eső szakszán. Ezt hasonló módon bizonyíthajuk, mint ahogy azt az első elemi algoritmusnál tettük.

Vegyünk 9 pontot és keressük az egyensúlyi helyzetüket. Helyezzük el random őket az egységnégyzetben majd indítsuk el az algoritmust.



5.3. ábra. 9 pont esetén 3 egyensúlyi helyzet

6. fejezet

A matlab program kódja

6.1. forráskód. Kritikus pont kereső elemi algoritmus

```
function crp=critpoint(n,f,x0)
crp=x0;
% Deriváljuk f-et és tároljuk el a parciális deriváltjait.
%--------------------------
syms x [1 n]
A=jacobian(f);
Df=matlabFunction(A,'Vars',{x});
%--------------------------
k=0; % Lépések száma
s=0; % Az utolsó hány lépés volt sikertelen
pr=0; % Próbálkozások száma
lepes=ones(1,n) % Utolsára mekkorát léptünk az egyes irányokba
while pr<1000 && norm(Df(crp))>eps*0.01 && s<n && max(lepes)>eps
    j=mod(pr,n)+1;
    p=zeros(1,n);
    p(j)=1;
    g=@(t) (Df(crp-t*p)*p');
    pr=pr+1;
    u=fzero(g,0);
    if ~isnan(u) % Ha találunk kritikuspontot, lépjünk oda.
        lepes(j)=abs(u)
        crp=crp-u*p;
        k=k+1;
        if abs(u)>eps*0.01 % Ha kritikus pontban vagyunk, nem tudtunk arrébb lépni.
            s=s+1;
        else
            s=0;
        end
    else
        s=s+1;
```

```
        end
    end
    if s==n
        disp(['Ebből a pontból egyik irányban sem találtunk kritikus pontot: (',num2str(crp(1)),',',num2
        crp=NaN
    elseif pr==1000
        disp('Nem konvergens az algoritmus')
        crp=NaN;
    end
```

6.2. forráskód. Kritikus pont kereső általánosított algoritmus

```
function m=altalanos3(n,f,x0,mu)
crp=x0;
% Deriváljuk f-et és tároljuk el a parciális deriváltjait.
%--------------------------
syms x [1 n]
A=jacobian(f);
Df=matlabFunction(A,'Vars',{x});
%--------------------------
k=0; % A lépések száma
lepes=eps+1; % Az utolsó lépés hossza
s=0; % Akkor lesz 1, ha egy pontból nem tudunk tovább lépni.
while k<1000 && norm(Df(crp))>eps*0.01 && lepes>eps && s==0
    p=Df(crp);
    g=@(t) (Df(crp-t*p)*p'-mu*Df(crp)*p');
    u=fzero(g,0);
    if u<0
        opts1=  optimset('display','off');
        u=lsqnonlin(g,0,0,[],opts1);
        if g(u)>eps
            v=fzero(g,u);
            if v>0
                u=v;
            end
        end
    end
    if ~isnan(u)
        crp=crp-u*p;
        lepes=norm(u*p);
        k=k+1;
    else
        s=1;
    end
end
if s==1 || (u==0 && norm(Df(crp))>0.0001)
```

```
    disp(['Ebből a pontból nem tudunk tovább lépni: (',num2str(crp(1)),',',num2str(crp(2)),')'])
    crp=NaN;
elseif k==1000
    disp('Nem konvergens az algoritmus')
    crp=NaN;
end
```

Ez a kód a gradiens módszert mutatja be, ahol a p_k vektorokat a gradiens vektoroknak választjuk.

Minden lépésben először az fzero paranccsal próbálunk megoldását keresni az egyenletnek. Ezzel az a probléma, hogy csak akkor tudjuk beállítani az intervallumot, ahol a gyököt keressük, ha az intervallum 2 végpontjában a függvény különböző előjelű.

Ha negatív gyököt kaptunk, akkor az lsqnonlin függvényt használjuk. Ez a paraméterként kapott függvény normanégyzetét minimalizálja. Mivel egyváltozós függvényre használjuk, a függvény négyzetét minimalizálja. Tehát ez alkalmas arra, hogy a gyököket megadja. Viszont lehetséges, hogy a parciális derivált egy lokális minimuma közelebb van a 0-hoz mint a legközelebbi gyök és ekkor azt találja meg az lsqnonlin parancs. Ezért ha nem a 0 értéket veszi fel itt a parciális derivált, akkor még egyszer használjuk az fzero parancsot ebből a pontból indítva. Ha megint negatív gyököt kapunk, akkor maradunk az lsqnonlin által adott pontban.

Irodalomjegyzék

[1] Kiss Emil: Bevezetés az algebrába. 118-125, Typotex kiadó, 2007

[2] Laczkovich Miklós, T.Sós Vera: Valós analízis II, 2013

[3] J.M. Ortega, W.C. Rheinboldt: Iterative Solution of Nonlinear Equations in Several Variables. Academic Press, 1970.

[4] `https://en.wikipedia.org/wiki/Coordinate_descent`, 2020.05.22.

[5] Stoyan Gisbert, Takó Galina: Numerikus módszerek 1., Typotex kiadó, 2005