3. Kvázinewtonovské metódy Orenovho typu

3.1. Orenova trieda formúl a jej vlastnosti

Ako bolo uvedené v kapitole 2, v kvázinewtonovských formulách je smer volený ako $\mathbf{s}_k = -\mathbf{H}_k\mathbf{g}_k$, kde $\mathbf{H}_k > 0$ je k-ta aproximácia inverznej Hessovej matice minimalizovanej funkcie. V každej iterácii sa aproximácia zlepšuje pomocou korekcie

$$\mathbf{H}_{k+1} = \mathbf{H}_k + \Delta\mathbf{H}_k ,$$

pričom je zachovaná kvázinewtonovská podmienka $\mathbf{H}_{k+1}\mathbf{y}_k = \mathbf{p}_k$ a podmienka zachovania starej informácie (2.13). Oren odvodil formulu, ktorá zachováva kvázinewtonovskú podmienku aj podmienku (2.13), ale korekcia aproximácie inverznej Hessovej matice sa robí podľa vzťahu

$$\mathbf{H}_{k+1} = \gamma_k\mathbf{H}_k + \Delta\mathbf{H}_k ,$$

kde $\gamma_k > 0$ je Orenov parameter.

Takto zvolenou korekciou dostávame väčšiu voľnosť pri výbere novej matice $\mathbf{H}_{k+1}$. Zjednodušene povedané, ak $\gamma_{k+1} < 1$, tým kladieme menší dôraz na “informáciu“ $\mathbf{H}_k$ získanú v predchádzajúcich *k* iteráciach a dávame väčší dôraz na “informáciu“ $\Delta\mathbf{H}$ z *k+1* iterácie. Ak $\gamma_{k+1} > 1$, tak opačne.

V kapitole 2 boli uvedené niektoré veľmi dobré vlastnosti najčastejšie používanej DFP formuly. Žiaľ, môžeme sa tiež stretnúť aj s ťažkosťami pri práci s touto formulou. Ide o tieto dva fenomény:

- Konvergencia algoritmu sa rýchlo zhoršuje v závislosti od presnosti počítania optimálneho kroku.
- Algoritmus je veľmi citlivý na škálovanie účelovej funkcie.

(Existujú príklady (viď [5]), kedy iba vhodným prenásobením účelovej funkcie skalárom sa konvergencia tejto metódy vylepší. Na druhej strane nevhodné škálovanie môže spôsobiť, že matica **H** sa stane singulárnou. Neexistuje technika na vhodné škálovanie tejto formuly.)

Jeden z dôvodov na odvodenie novej triedy formúl bola snaha odstrániť spomínané nedostatky DFP formuly.

Veta 3.1.

Majme kvadratickú funkciu (2.8) [$\mathbf{G} > 0$, $\bar{\mathbf{x}}$ minimum]. Nech k+1 iterácia

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \lambda_k \mathbf{s}_k$$

je definovaná nasledovne $\mathbf{s}_k = -\mathbf{H}_k \mathbf{g}_k$, $\mathbf{H}_k > 0$ a λ_k je optimálny krok.

Potom platí

$$f(\mathbf{x}_{k+1}) - f(\bar{\mathbf{x}}) \leq \left[\frac{K(\mathbf{R}_k) - 1}{K(\mathbf{R}_k) + 1}\right]^2 (f(\mathbf{x}_k) - f(\bar{\mathbf{x}})), \qquad (1.a)$$

kde $K(\mathbf{R}_k)$ je číslo podmienenosti matice $\mathbf{R}_k = \mathbf{G}^{1/2}\mathbf{H}_k\mathbf{G}^{1/2}$.

Dôkaz (viď [2] str. 86 - 91).

Matice $\mathbf{G}$, $\mathbf{H}_k$ sú kladne definitné a $\mathbf{R}_k$ môžeme písať ako $\mathbf{R}_k = (\mathbf{G}^{1/2}\mathbf{H}_k^{1/2})(\mathbf{G}^{1/2}\mathbf{H}_k^{1/2})^T$. Z toho vyplýva, že matice $\mathbf{R}_k$ sú symetrické a kladne definitné, teda ich číslo podmienenosti je podiel najväčšieho a najmenšieho vlastného čísla. Je zrejmé, že $K(\mathbf{R}_k) \geq 1$ a rovnosť v tomto vzťahu nastane, ak $\mathbf{R}_k = \mathbf{I}$. Ak číslo podmienenosti $\mathbf{K}(\mathbf{R}_k)$ konverguje k jednotke, tak matica $\mathbf{R}_k = \mathbf{G}^{1/2}\mathbf{H}_k\mathbf{G}^{1/2}$ konverguje k jednotkovej matici.

Ak chceme zabezpečiť "dobrú" konvergenciu v každej iterácii, mali by sme sa snažiť aby koeficient

$$\left[\frac{K(\mathbf{R}_k) - 1}{K(\mathbf{R}_k) + 1}\right]^2 \qquad (1b)$$

bol čo najmenší. Tento koeficient môžeme chápať ako mieru priblíženia v jednom kroku.

Pre DFP formulu v prípade minimalizácie kvadratickej funkcie s $\mathbf{G} > 0$ platí, že vlastné čísla matice $\mathbf{R}_k$ monotónne konvergujú k jednotke. To však ešte nezaručuje pokles čísla podmienenosti matice $\mathbf{R}_k$. Boli nájdené prípady, keď vlastné čísla matice $\mathbf{R}_k$ sa priblížili k jednotke, ale číslo podmienenosti tejto matice sa zväčšilo. To znamená, že vzrástla aj hodnota koeficientu (1b) čím sa zhoršila konvergencia.

Táto skutočnosť spolu s už spomínanými nedostatkami DFP formuly boli hlavné príčiny, ktoré motivovali vznik Orenovej triedy. Táto trieda je invariantná na škálovanie účelovej funkcie a dokáže zabezpečiť pokles $K(\mathbf{R}_k)$ v každej iterácii.

V roku 1972 S. S. Oren uverejnil novú triedu kvázinewtonovských formúl, ktorú dostaneme z Broydenovej triedy (2.15) substitúciou matice $\mathbf{H}$ maticou $\gamma\mathbf{H}$. Maticu $\mathbf{H}_{k+1}$ konštruuje podľa vzťahu:

$$\mathbf{H}_{k+1} = \gamma\mathbf{H}_k + \Delta\mathbf{H}_k , \qquad (2)$$

kde
$$\Delta\mathbf{H}_k = \frac{\mathbf{p}_k\mathbf{p}_k^T}{\mathbf{p}_k^T\mathbf{y}_k} - \frac{\gamma_k\mathbf{H}_k\mathbf{y}_k\mathbf{y}_k^T\mathbf{H}_k}{\mathbf{y}_k^T\mathbf{H}_k\mathbf{y}_k} + \gamma_k\,\varphi_\kappa(\mathbf{y}_k^T\mathbf{H}_k\mathbf{y}_k)\mathbf{v}_k\mathbf{v}_k^T , \qquad (3a)$$

a
$$\mathbf{v}_k = \frac{\mathbf{p}_k}{\mathbf{p}_k^T\mathbf{y}_k} - \frac{\mathbf{H}_k\mathbf{y}_k}{\mathbf{y}_k^T\mathbf{H}_k\mathbf{y}_k} , \quad \varphi \geq 0 \text{ je Broydenov parameter} \qquad (3b)$$

a $\gamma > 0$ je Orenov parameter.

(Broydenova trieda je špeciálnym prípadom Orenovej pre hodnotu $\gamma = 1$.) Rovnakú formulu (2) (3) by sme dostali aj vtedy, keď by sme použili Broydenovu formulu na minimalizáciu účelovej funkcie prenásobenej konštantou $\gamma > 0$.

Algoritmus 2

Štart: $\mathbf{x}_0 \in R^n$, $\mathbf{g}_0 = \nabla f(\mathbf{x}_0)$, $\mathbf{H}_0 > 0$.

$\varepsilon > 0$ – konštanta pre kritérium presnosti.

Počítadlo iterácii $k = 0$.

Cyklus: $k = 0, 1, \ldots$

1. krok Test dosiahnutej presnosti

Ak $\| \nabla f(\mathbf{x}_k)\| < \varepsilon$, tak STOP.

2. krok Vypočítame spádový smer $\mathbf{s}_k = -\mathbf{H}_k\mathbf{g}_k$.

3. krok Vypočítame optimálny krok $\lambda_k > 0$.

4. krok Výpočet novej aproximácie $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \lambda_k\mathbf{s}_k$

a nového gradientu $\mathbf{g}_{k+1} = \nabla f(\mathbf{x}_{k+1})$.

5. krok Vypočítame vektory

$$\mathbf{p}_k = \mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k,$$
$$\mathbf{y}_k = \mathbf{g}_{k+1} - \mathbf{g}_k,$$

6. krok Zvolíme hodnoty parametrov $\gamma_k > 0$, $\varphi_k \geq 0$.

7. krok Skonštruujeme maticu $\mathbf{H}_{k+1}$ pomocou vzťahov (2), (3).

8. krok Zväčšíme k o jeden a vrátime sa na 1.krok

Výstup: Bod $\mathbf{x}_k$ – aproximácia bodu minima funkcie f(.)

Rozdiel od všeobecného algoritmu 1 je v upresňujúcom 6. kroku, kedy volíme hodnoty γ, φ.

Napriek tomu, že trieda formúl (2) (3) závisí od postupností dvoch parametrov $\{\gamma_k\}$, $\{\varphi_k\}$, zachováva si vlastnosť (2.12) t. j. $\mathbf{H}_{k+1}\mathbf{y}_k = \mathbf{p}_k$.

Reštrikcia parametrov $\gamma_k > 0$, $\varphi_k \geq 0$, je postačujúca pre generovanie kladne definitných matíc $\mathbf{H}_k$.

Lema 3.1.

Ak matica $\mathbf{H}_k$ je kladne definitná a krok $\lambda_k > 0$ optimálny, potom pre vektory $\mathbf{p}_k$ a $\mathbf{y}_k$, definované vzťahmi (2.7c), (2.7d) platí

$$\mathbf{p}_k^T \mathbf{y}_k > 0 .$$

Dôkaz: Podľa Lemy 2.1 je smer $\mathbf{s}_k = -\mathbf{H}_k\mathbf{g}_k$ spádový a $\mathbf{g}_k^T\mathbf{s}_k < 0$. Krok je optimálny, teda podľa (2.18) $\mathbf{g}_{k+1}^T\mathbf{s}_k = 0$. Zo vzťahu $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \lambda_k\mathbf{s}_k$ máme $\mathbf{p}_k = \lambda_k\mathbf{s}_k$ teda,

$$\mathbf{p}_k^T\mathbf{y}_k = \lambda_k \mathbf{y}_k^T\mathbf{s}_k \overset{2.7.d}{=} \lambda_k(\mathbf{g}_{k+1} - \mathbf{g}_k)^T\mathbf{s}_k = -\lambda_k\mathbf{g}_k^T\mathbf{s}_k > 0 . \qquad \blacksquare$$

Ak budeme používať iba matice a vektory z dvoch po sebe idúcich iterácii, tak pre jednoduchosť budeme ďalej používať nasledovnú symboliku: Index "k" nebudeme písať a index "k+1" nahradíme indexom "+".

Veta 3.2.

Nech $\mathbf{H} > 0$ a $\lambda > 0$ je optimálny krok. Potom pre $\mathbf{H}_+$ definovanú vzťahmi (2), (3) s hodnotami $\gamma > 0$, $\varphi \geq 0$ platí

$$\mathbf{H}_+ > 0.$$

Dôkaz: Nech $\mathbf{z} \in \mathbf{R}^n$ ($\mathbf{z} \neq 0$), potom podľa (3a)

$$\mathbf{z}^T\mathbf{H}_+\mathbf{z} = \gamma\,\mathbf{z}^T\mathbf{H}\,\mathbf{z} - \gamma\frac{(\mathbf{z}^T\mathbf{H}\mathbf{y})^2}{\mathbf{y}^T\mathbf{H}\mathbf{y}} + \gamma\,\varphi\,(\mathbf{y}^T\mathbf{H}\mathbf{y})(\mathbf{z}^T\mathbf{v})^2 + \frac{(\mathbf{z}^T\mathbf{p})^2}{\mathbf{p}^T\mathbf{y}} \tag{4}$$

Posledné dva členy na pravej strane sú jasne nezáporné.

Označme: $\mathbf{a} = \mathbf{H}^{1/2}\mathbf{z} \neq 0$, $\mathbf{b} = \mathbf{H}^{1/2}\mathbf{y} \neq 0$

Potom môžeme písať prvý člen pravej strany ako

$$\gamma\mathbf{a}^T\mathbf{a} \tag{5}$$

a druhý člen pravej strany ako

$$\frac{(\mathbf{a}^T\mathbf{b})^2}{\mathbf{b}^T\mathbf{b}} \tag{6}$$

Podľa Cauchyho nerovnosti

$$(\mathbf{a}^T\mathbf{a})(\mathbf{b}^T\mathbf{b}) \geq (\mathbf{a}^T\mathbf{b})^2 \tag{7}$$

Z toho vyplýva, že rozdiel prvých dvoch členov je nezáporný, a teda $\mathbf{z}^T\mathbf{H}_+\mathbf{z} \geq 0$.

Nakoniec treba ukázať, že $\mathbf{z}^T\mathbf{H}_+\mathbf{z} \neq 0$.V Cauchyho nerovnosti nastáva rovnosť (prvé dva členy pravej stany v (4) sú rovnaké), ak $\mathbf{a} = \alpha\mathbf{b}$ kde $\alpha \neq 0$. Potom $\mathbf{z} = \alpha\mathbf{y}$. Ak nastane takáto možnosť, nemôže byť súčastne aj $\mathbf{z}^T\mathbf{p} = 0$. Pretože ak $0 = \mathbf{z}^T\mathbf{p}$, tak $\mathbf{z}^T\mathbf{p} = \alpha\mathbf{y}^T\mathbf{p} = 0$ a to je spor, lebo podľa lemy 3.1 $\mathbf{p}^T\mathbf{y} > 0$.

Vidíme, že rozdiel prvých dvoch členov je nezáporný a pripočítaním dvoch nezáporných členov sa to nezmení. Pritom $\mathbf{z}^T\mathbf{H}_+\mathbf{z} \neq 0$, lebo rozdiel prvých dvoch členov alebo posledný člen sú kladné. ■

Z Vety 3.2 vyplýva, že ak budeme štartovať algoritmus s $\mathbf{H}_0 > 0$ a $\gamma_k > 0$, $\varphi_k \geq 0$, tak algoritmus 2 bude generovať postupnosť kladne definitných matíc $\{\mathbf{H}_k\}$.

Ako ďalej ukážeme, tento algoritmus má tie isté vlastnosti ako algoritmus s DFP formulou. Neplatí tu však vzťah $\mathbf{H}_n = \mathbf{G}^{-1}$ (ak $\mathbf{G}$ je nxn matica), ale modifikovaný vzťah (17).

Veta 3.3.

Algoritmus 2 aplikovaný na kvadratickú funkciu (2.8) [$\mathbf{G} > 0$] generuje $\mathbf{G}$– združené smery a pre k-tu iteráciu platia tieto vzťahy:

a) $$\mathbf{H}_k\mathbf{y}_i = \bar{\gamma}_{i,k-1}\mathbf{p}_i \quad \text{pre} \quad 0 \leq i < k, \tag{8.a}$$

$$\text{kde } \bar{\gamma}_{i,k} = \prod_{j=i+1}^{k} \gamma_j, \quad \bar{\gamma}_{i,i} = 1, \tag{8b}$$

b) $$\mathbf{g}_k^T\mathbf{p}_j = 0 \quad \text{pre} \quad 0 \leq j < k, \tag{9}$$

c) $$\mathbf{p}_i^T\mathbf{G}\mathbf{p}_j = 0 \quad \text{pre} \quad 0 \leq i < j \leq k. \tag{10}$$

<u>Dôkaz:</u> (Modifikovaný dôkaz z [1]) Najskôr uvediem niektoré pomocné vzťahy. Používame optimálny krok, teda

podľa (2.18) $$\mathbf{g}_{k+1}^T\mathbf{s}_k = 0. \tag{11}$$

Vieme, že $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \lambda_k\mathbf{s}_k$ a $\mathbf{s}_k = -\mathbf{H}_k\mathbf{g}_k$, teda podľa (2.7.c)

$$\mathbf{p}_k = \lambda_k\mathbf{s}_k = -\lambda_k\mathbf{H}_k\mathbf{g}_k \tag{12}$$

podľa (11), (12) $$\mathbf{g}_{k+1}^T\mathbf{p}_k = 0 \tag{13}$$

podľa (2.10a) $$\mathbf{G}\mathbf{p}_k = \mathbf{y}_k \tag{14}$$

podľa (2), (3) $$\mathbf{H}_{k+1}\mathbf{y}_k = \mathbf{p}_k \tag{15}$$

Indukciou budem dokazovať všetky vzťahy (8), (9), (10) súčastne.

I. k = 1 a) (i = 0) $\mathbf{H}_1\mathbf{y}_0 \overset{15}{=} \mathbf{p}_0$ ($\gamma_{0,0} = 1$)

b) (j = 0) $\mathbf{g}_1^T\mathbf{p}_0 \overset{13}{=} 0$

c) (i =0, j = 1) $\mathbf{p}_0^T\mathbf{G}\mathbf{p}_1 \overset{14}{=} \mathbf{y}_0^T\mathbf{p}_1 \overset{12}{=} -\lambda_1\mathbf{y}_0^T\mathbf{H}_1\mathbf{g}_1 \overset{15}{=} -\lambda_1\mathbf{p}_0^T\mathbf{g}_1 \overset{13}{=} 0$

II. Indukčný predpoklad: Vzťahy (8), (9), (10) platia po k.

III. k → k+1

a) (i = k) $\mathbf{H}_{k+1}\mathbf{y}_k \overset{15}{=} \mathbf{p}_k$

(i < k)

$$\mathbf{v}_k^T\mathbf{y}_i \overset{3b}{=} \frac{\mathbf{p}_k^T\mathbf{y}_i}{\mathbf{p}_k^T\mathbf{y}_k} - \frac{\mathbf{y}_k^T\mathbf{H}_k\mathbf{y}_i}{\mathbf{y}_k^T\mathbf{H}_k\mathbf{y}_k} \overset{II.a}{=} \frac{\mathbf{p}_k^T\mathbf{y}_i}{\mathbf{p}_k^T\mathbf{y}_k} - \frac{\overline{\gamma}_{i,k-1}\mathbf{y}_k^T\mathbf{p}_i}{\mathbf{y}_k^T\mathbf{H}_k\mathbf{y}_k} =$$

$$\overset{14}{=} \frac{\mathbf{p}_k^T\mathbf{G}\mathbf{p}_i}{\mathbf{p}_k^T\mathbf{y}_k} - \frac{\overline{\gamma}_{i,k-1}\mathbf{p}_k^T\mathbf{G}\mathbf{p}_i}{\mathbf{y}_k^T\mathbf{H}_k\mathbf{y}_k} \overset{II.c}{=} 0 \tag{16}$$

$$\mathbf{H}_{k+1}\mathbf{y}_i \overset{3.a}{=} \left(\mathbf{H}_k\mathbf{y}_i - \frac{\mathbf{y}_k^T\mathbf{H}_k\mathbf{y}_i}{\mathbf{y}_k^T\mathbf{H}_k\mathbf{y}_k}\mathbf{H}_k\mathbf{y}_k + \varphi(\mathbf{y}_k^T\mathbf{H}_k\mathbf{y}_k)(\mathbf{v}_k^T\mathbf{y}_i)\mathbf{v}_k\right)\gamma_k + \frac{\mathbf{p}_k^T\mathbf{y}_i}{\mathbf{p}_k^T\mathbf{y}_k}\mathbf{p}_k =$$

$$\overset{16,\,II.a}{=} \left(\overline{\gamma}_{i,k-1}\mathbf{p}_i - \frac{\overline{\gamma}_{i,k-1}\mathbf{y}_k^T\mathbf{p}_i}{\mathbf{y}_k^T\mathbf{H}_k\mathbf{y}_k}\mathbf{H}_k\mathbf{y}_k\right)\gamma_k + \frac{\mathbf{p}_k^T\mathbf{y}_i}{\mathbf{p}_k^T\mathbf{y}_k}\mathbf{p}_k =$$

$$\overset{14}{=} \left(\overline{\gamma}_{i,k-1}\mathbf{p}_i - \frac{\overline{\gamma}_{i,k-1}\mathbf{p}_k^T\mathbf{G}\mathbf{p}_i}{\mathbf{y}_k^T\mathbf{H}_k\mathbf{y}_k}\mathbf{H}_k\mathbf{y}_k\right)\gamma_k + \frac{\mathbf{p}_k^T\mathbf{G}\mathbf{p}_i}{\mathbf{p}_k^T\mathbf{y}_k}\mathbf{p}_k =$$

$$\overset{II.c}{=} \overline{\gamma}_{i,k-1}\gamma_k\mathbf{p}_i = \overline{\gamma}_{i,k}\mathbf{p}_i$$

b) (j = k) $\mathbf{g}_{k+1}^T\mathbf{p}_k \overset{13}{=} 0$

(j < k) $\mathbf{g}_{k+1}^T\mathbf{p}_j = (\mathbf{g}_k + \mathbf{y}_k)^T\mathbf{p}_j \overset{II.b}{=} \mathbf{y}_k^T\mathbf{p}_j \overset{14}{=} \mathbf{p}_k^T\mathbf{G}\mathbf{p}_j \overset{II.c}{=} 0$

c) (i ≤ k)

$$\mathbf{p}_i^T\mathbf{G}\mathbf{p}_{k+1} \overset{14}{=} \mathbf{y}_i^T\mathbf{p}_{k+1} \overset{12}{=} -\lambda_{k+1}\mathbf{y}_i^T\mathbf{H}_{k+1}\mathbf{g}_{k+1} \overset{III.a}{=} -\lambda_{k+1}\overline{\gamma}_{i,k}\mathbf{p}_i^T\mathbf{g}_{k+1} \overset{III.b}{=} 0$$

■

Podľa vzťahu (9) je gradient $\mathbf{g}_k$ kolmý na všetky predchádzajúce smery $\mathbf{p}_j$. Vzťah (10) vyjadruje, že algoritmus 2 generuje $\mathbf{G}$-združené smery $\mathbf{p}_j$, teda je algoritmom združených smerov a konverguje k minimu za najviac n krokov.

Veta 3.4.

Pre kvadratickú funkciu (2.8), n-tá aproximácia inverznej Hessovej matice $\mathbf{H}_n$ skonštruovanej algoritmom 2 je

$$\mathbf{H}_n = \mathbf{P\Gamma P}^{-1}\mathbf{G}^{-1}\,, \tag{17}$$

kde $\mathbf{P}$ je matice, ktorej stĺpce tvoria vektory $\mathbf{p}_0, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \ldots, \mathbf{p}_{n-1}$.

Matica $\mathbf{\Gamma}$ je diagonálna tvaru:

$$\mathbf{\Gamma} = \begin{bmatrix} \bar\gamma_{0,n-1} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \bar\gamma_{1,n-1} & & \\ \vdots & & \ddots & \\ 0 & & & \bar\gamma_{n-1,n-1} \end{bmatrix}$$

Čísla $\bar\gamma_{i,k}$ sú definované vzťahom (8b). Tieto diagonálne prvky matice $\mathbf{\Gamma}$ sú navyše vlastnými číslami matice $\mathbf{R}_n = \mathbf{G}^{1/2}\mathbf{H}_n\mathbf{G}^{1/2}$.

Dôkaz: Z Vety 3.1. pre maticu $\mathbf{H}_n$ platí

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_n\mathbf{y}_0 &= \mathbf{H}_n\mathbf{G}\mathbf{p}_0 &&= \bar\gamma_{0,n-1}\mathbf{p}_0 \\ \mathbf{H}_n\mathbf{y}_1 &= \mathbf{H}_n\mathbf{G}\mathbf{p}_1 &&= \bar\gamma_{1,n-1}\mathbf{p}_1 \\ &\vdots \\ \mathbf{H}_n\mathbf{y}_{n-1} &= \mathbf{H}_n\mathbf{G}\mathbf{p}_{n-1} &&= \bar\gamma_{n-1,n-1}\mathbf{p}_{n-1} \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \qquad \mathbf{H}_n\mathbf{G}\mathbf{P} = \mathbf{P}\,\mathbf{\Gamma}$$

$\mathbf{P}$ je regulárna, pretože vektory $\mathbf{p}_0, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \ldots, \mathbf{p}_{n-1}$ sú $\mathbf{G}$– združené a z toho vyplýva nezávislé.

$$\mathbf{H}_n = \mathbf{P}\,\mathbf{\Gamma}\mathbf{P}^{-1}\mathbf{G}^{-1}$$

z čoho dostávame $\quad \mathbf{R}_n = (\mathbf{G}^{1/2}\mathbf{P})\,\mathbf{\Gamma}(\mathbf{P}\mathbf{G}^{1/2})^{-1}$

Matica $\mathbf{R}_n$ je podobná diagonálnej matici $\mathbf{\Gamma}$, teda majú rovnaké vlastné čísla. ■

V algoritme 2 $\mathbf{G}$-združenosť smerov je nezávislá od parametrov γ, φ. Preto možno očakávať, že vhodnou voľbou týchto parametrov môžeme dosiahnuť, aby tento algoritmus lepšie konvergoval v porovnaní s inými kvázinewtonovskými metódami, v ktorých tieto parametre nevystupujú.

V nasledujúcich častiach sa budeme snažiť nájsť také hodnoty parametrov γ, φ, aby Orenova formula (2), (3) generovala matice $\mathbf{H}_k$ čo najlepšie aproximujúce inverznú Hessovu maticu $\mathbf{G}^{-1}$.

3.2. Štruktúra vlastných čísel matice $\mathbf{R}_k$

Pre skúmanie kvality aproximácie inverznej Hessovej matice $\mathbf{G}^{-1}$ maticou $\mathbf{H}_k$ definovanou vzťahmi (2), (3) si musíme najskôr zvoliť vhodné kritérium.

Vo vzťahu (1.a) nám číslo podmienenosti matice $\mathbf{R}_k = \mathbf{G}^{1/2}\mathbf{H}_k\mathbf{G}^{1/2}$ ovplyvňuje kvalitu jednej iterácie. Zrejme, ak v (1) matica $\mathbf{R}_k = \mathbf{I}$, tak jej číslo podmienenosti je rovné jednej, a teda $f(\mathbf{x}_{k+1}) = f(\overline{\mathbf{x}})$ a $\mathbf{H}_k = \mathbf{G}^{-1}$.

Číslo podmienenosti matice $\mathbf{R}_k$ sa javí ako prirodzené kritérium kvality aproximácie matice $\mathbf{G}^{-1}$ maticou $\mathbf{H}_k$. V zmysle predchádzajúceho označenia budeme číslo podmienenosti matice $\mathbf{R}_k$ označovať $K(\mathbf{R}_k)$. Naším cieľom je nájsť taký spôsob voľby γ_k, φ_k, aby $K(\mathbf{R}_{k+1})$ bolo čo najmenšie.

Pre prácu s týmto kritériom, je dôležité aby sme poznali štruktúru vlastných čísel matice $\mathbf{R}_{k+1}$.

Aby sme mohli prehľadne vyjadriť vnútorné závislosti medzi jednotlivými veličinami formuly (2), (3), zavedieme nasledovné označenie:

$$\boldsymbol{H}(\mathbf{H}_k, \mathbf{p}_k, \mathbf{y}_k, \gamma_k, \varphi_k) = \left(\mathbf{H}_k - \frac{\mathbf{H}_k\mathbf{y}_k\mathbf{y}_k^T\mathbf{H}_k}{\mathbf{y}_k^T\mathbf{H}_k\mathbf{y}_k} + \varphi_k(\mathbf{y}_k^T\mathbf{H}_k\mathbf{y}_k)\,\mathbf{v}_k\mathbf{v}_k^T\right)\gamma_k + \frac{\mathbf{p}_k\mathbf{p}_k^T}{\mathbf{p}_k^T\mathbf{y}_k} \tag{18}$$

$$\mathbf{v}_k = \frac{\mathbf{p}_k}{\mathbf{p}_k^T\mathbf{y}_k} - \frac{\mathbf{H}_k\mathbf{y}_k}{\mathbf{y}_k^T\mathbf{H}_k\mathbf{y}_k} \tag{19}$$

Pri takomto označení formulu (2) (3) môžeme zapísať takto:

$$\mathbf{H}_{k+1} = \boldsymbol{H}(\mathbf{H}_k, \mathbf{p}_k, \mathbf{y}_k, \gamma_k, \varphi_k) \tag{20}$$

Kvôli prehľadnosti v ďalšom vynecháme index *k* a budeme písať len $\boldsymbol{H}(\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{y}, \gamma, \varphi)$. (Je potrebné upozorniť, že poradie parametrov je presne určené.)

Veta 3.5.

Nech maticový výraz $\boldsymbol{H}(\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{y}, \gamma, \varphi)$ je definovaný vzťahmi (18), (19). Potom, pre ľubovolnú regulárnu, symetrickú maticu $\mathbf{H}$, nenulové vektory $\mathbf{p},\mathbf{y} \in R^n$ a skaláre $\varphi, \gamma, \gamma \neq 0$ platí

a) $\boldsymbol{H}(\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{y}, \gamma, \varphi) = \boldsymbol{H}(\gamma\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{y}, 1, \varphi)$, (21)

b) $\boldsymbol{H}(\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{y}, \gamma, \varphi) = (1-\varphi)\,\boldsymbol{H}(\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{y}, \gamma, 0) + \varphi\boldsymbol{H}(\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{y}, \gamma, 1)$, (22)

c) $[\boldsymbol{H}(\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{y}, \gamma, 1)]^{-1} = \boldsymbol{H}(\mathbf{H}^{-1}, \mathbf{y}, \mathbf{p}, 1/\gamma, 0)$. (23)

Dôkaz: a) Ak v (19) namiesto **H** dosadíme γ**H**, tak **v** sa nezmení. Potom z (18) dostávame

$$\boldsymbol{H}\,(\gamma\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{y}, 1, \varphi) = \left(\gamma\mathbf{H} - \frac{\gamma^2\mathbf{H}\mathbf{y}\,\mathbf{y}^T\mathbf{H}}{\gamma\,\mathbf{y}^T\mathbf{H}\,\mathbf{y}} + \gamma\varphi\,(\mathbf{y}^T\mathbf{H}\mathbf{y})\,\mathbf{v}\,\mathbf{v}^T\right) + \frac{\mathbf{p}\,\mathbf{p}^T}{\mathbf{p}^T\mathbf{y}} =$$

$$= \left(\mathbf{H} - \frac{\mathbf{H}\,\mathbf{y}\,\mathbf{y}^T\mathbf{H}}{\mathbf{y}^T\mathbf{H}\,\mathbf{y}} + \varphi\,(\mathbf{y}^T\mathbf{H}\mathbf{y})\,\mathbf{v}\,\mathbf{v}^T\right)\gamma + \frac{\mathbf{p}\,\mathbf{p}^T}{\mathbf{p}^T\mathbf{y}}$$

b) Podľa (18)

$$\boldsymbol{H}\,(\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{y}, \gamma, 1) - \boldsymbol{H}\,(\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{y}, \gamma, 0) = \gamma(\mathbf{y}^T\mathbf{H}\mathbf{y})\,\mathbf{v}\mathbf{v}^T \tag{24}$$

$$\boldsymbol{H}\,(\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{y}, \gamma, \varphi) = \boldsymbol{H}\,(\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{y}, \gamma, 0) + \varphi\gamma\,(\mathbf{y}^T\mathbf{H}\mathbf{y})\,\mathbf{v}\mathbf{v}^T \tag{25}$$

z (24), (25) dostávame

$$\boldsymbol{H}\,(\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{y}, \gamma, \varphi) = \boldsymbol{H}\,(\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{y}, \gamma, 0) + \varphi[\boldsymbol{H}\,(\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{y}, \gamma, 1) - \boldsymbol{H}\,(\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{y}, \gamma, 0)]$$

$$= (1-\varphi)\,\boldsymbol{H}\,(\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{y}, \gamma, 0) + \varphi\,\boldsymbol{H}\,(\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{y}, \gamma, 1)$$

c) Rovnicu (23) dokážeme overením, že platí

$$[\boldsymbol{H}\,(\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{y}, \gamma, 1)][\boldsymbol{H}\,(\mathbf{H}^{-1}, \mathbf{y}, \mathbf{p}, 1/\gamma, 0)] = \mathbf{I}$$

■

Lema 3.2.

Nech formula $\mathbf{H}_+ = \boldsymbol{H}(\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{y}, \gamma, \varphi)$ je definovaná vzťahmi (18), (19). Predpokladajme, že $\mathbf{p}^T\mathbf{y} > 0$ a $\mathbf{y} = \mathbf{G}\mathbf{p}$, kde $\mathbf{G} > 0$. Ak definujeme $\mathbf{R} = \mathbf{G}^{1/2}\mathbf{H}\mathbf{G}^{1/2}$ a $\mathbf{z} = \mathbf{G}^{1/2}\mathbf{p}$, potom platí:

$$\mathbf{R}_+ = \mathbf{G}^{1/}2\mathbf{H}_+\,\mathbf{G}^{1/2} = \boldsymbol{H}\,(\mathbf{R}, \mathbf{z}, \mathbf{z}, \gamma, \varphi), \tag{26.a}$$

teda $\mathbf{G}^{1/2}[\boldsymbol{H}\,(\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{y}, \gamma, \varphi)]\,\mathbf{G}^{1/2} = \boldsymbol{H}\,(\mathbf{R}, \mathbf{z}, \mathbf{z}, \gamma, \varphi) =$

$$= \left(\mathbf{R} - \frac{\mathbf{R}\mathbf{z}\mathbf{z}^T\mathbf{R}}{\mathbf{z}^T\mathbf{R}\mathbf{z}} + \varphi(\mathbf{z}^T\mathbf{R}\mathbf{z})\,\mathbf{u}\mathbf{u}^T\right)\gamma + \frac{\mathbf{z}\mathbf{z}^T}{\mathbf{z}^T\mathbf{z}}, \tag{26.b}$$

kde
$$\mathbf{u} = \frac{\mathbf{z}}{\mathbf{z}^T\mathbf{z}} - \frac{\mathbf{R}\mathbf{z}}{\mathbf{z}^T\mathbf{R}\mathbf{z}}. \tag{27}$$

Dôkaz: Substitúciou $\mathbf{y} = \mathbf{G}\mathbf{p}$ zo vzťahu (19) dostávame

$$\mathbf{G}^{1/2}\mathbf{v} = \left(\frac{\mathbf{G}^{1/2}\mathbf{p}}{\mathbf{p}^T\mathbf{G}\mathbf{p}} - \frac{\mathbf{G}^{1/2}\mathbf{H}\mathbf{G}\mathbf{p}}{\mathbf{p}^T\mathbf{G}\mathbf{H}\mathbf{G}\mathbf{p}}\right) = \mathbf{u}. \tag{28}$$

Prenásobme (18) $\mathbf{G}^{1/2}$ z obidvoch strán. Vieme, že $\mathbf{y} = \mathbf{G}\mathbf{p}$.

$\mathbf{G}^{1/2}[\boldsymbol{H}\ (\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{y}, \gamma, \varphi)]\ \mathbf{G}^{1/2}\ =$

$$= \left(\mathbf{G}^{1/2}\mathbf{H}\mathbf{G}^{1/2} - \frac{\mathbf{G}^{1/2}\mathbf{H}\mathbf{G}\mathbf{p}\mathbf{p}^{\mathrm{T}}\mathbf{G}\mathbf{H}\mathbf{G}^{1/2}}{\mathbf{p}^{\mathrm{T}}\mathbf{G}\mathbf{H}\mathbf{G}\mathbf{p}} + \varphi\,(\mathbf{p}^{\mathrm{T}}\mathbf{G}\mathbf{H}\mathbf{G}\mathbf{p})\,\mathbf{G}^{1/2}\mathbf{v}\mathbf{v}^{\mathrm{T}}\mathbf{G}^{1/2} \right)\gamma + \frac{\mathbf{G}^{1/2}\mathbf{p}\mathbf{p}^{\mathrm{T}}\mathbf{G}^{1/2}}{\mathbf{p}^{\mathrm{T}}\mathbf{G}\mathbf{p}} \tag{29}$$

Prepísaním vzťahu (29) v terminológii **R** , **z** dostaneme vzťah (26).

■

Poznámka: Použijúc vzťahy (21)-(23) spolu s výsledkami Lemy 3.2 dostávame nasledujúce vzťahy pre maticu **R**:

a) $\boldsymbol{H}\ (\mathbf{R}, \mathbf{z}, \mathbf{z}, \gamma, \varphi) = \boldsymbol{H}\ (\gamma\mathbf{R}, \mathbf{z}, \mathbf{z}, 1, \varphi),$ (30)

b) $\boldsymbol{H}(\mathbf{R}, \mathbf{z}, \mathbf{z}, \gamma, \varphi) = (1-\varphi)\,\boldsymbol{H}(\mathbf{R}, \mathbf{z}, \mathbf{z}, \gamma, 0) + \boldsymbol{H}(\mathbf{R}, \mathbf{z}, \mathbf{z}, \gamma, 1),$ (31)

c) $[\boldsymbol{H}(\mathbf{R}, \mathbf{z}, \mathbf{z}, \gamma, 1)]^{-1} = \boldsymbol{H}(\mathbf{R}^{-1}, \mathbf{z}, \mathbf{z}, 1/\gamma, 0).$ (32)

Na skúmanie závislosti vlastných čísel matice $\mathbf{R}_+$ od vlastných čísel matice **R** potrebujeme poznať štruktúru vlastných čísel maticového výrazu $\boldsymbol{H}\ (\mathbf{R}, \mathbf{z}, \mathbf{z}, \gamma, \varphi)$.

Najskôr budeme uvažovať všeobecný prípad matíc **A** a **D**, kde

$$\mathbf{D} = \mathbf{A} - \frac{\mathbf{A}\mathbf{r}\mathbf{r}^{\mathrm{T}}\mathbf{A}}{\mathbf{r}^{\mathrm{T}}\mathbf{A}\mathbf{r}} + \frac{\mathbf{r}\mathbf{r}^{\mathrm{T}}}{\mathbf{r}^{\mathrm{T}}\mathbf{r}}\ , \quad 0 \neq \mathbf{r} \in \mathrm{R}^{n}. \tag{33}$$

Lema 3.3. (Loewner)

Nech symetrická matica **A** typu nxn má vlastné čísla

$$\lambda_1 \le \lambda_2 \le \ \dots\ \le \lambda_n.$$

Nech matica $\mathbf{A}^* = \mathbf{A} + \alpha.\mathbf{a}\mathbf{a}^{\mathrm{T}}$ ($\alpha > 0$ $\mathbf{a} \in \mathrm{R}^n$) má vlastné čísla

$$\mu_1 \le \mu_2 \le \ \dots\ \le \mu_n.$$

Potom

$$\lambda_1 \le \mu_1 \le \lambda_2 \le \mu_2 \le \dots \le \lambda_n \le \mu_n.$$

(Dôkaz neuvádzam .) ■

Veta 3.6.

Nech matica **A** > 0 má vlastné čísla

$$0 < \lambda_1 \le \lambda_2 \le \dots \le \lambda_n$$

a symetrická matica **D** definovaná vzťahom (33) má vlastné čísla

$$\mu_1 \le \mu_2 \le \dots \le \mu_n.$$

Potom platí:

a) ak $1 < \lambda_1$, tak $\mu_1 = 1$ a

$$1 < \lambda_{k-1} \le \mu_k \le \lambda_k \qquad \text{pre } k = 2, 3 \dots, n.$$

b) ak $\lambda_n < 1$, tak $\mu_n = 1$ a

$$\lambda_k \le \mu_k \le \lambda_{k+1} < 1 \qquad \text{pre } k = 1, 2, \dots, n\text{-}1.$$

c) ak $\lambda_j \le 1 \le \lambda_{j+1}$ pre nejaké $1 \le j < n$, tak aspoň jedno z vlastných čísel μ_j, μ_{j+1} je rovné jednej a.

$$\lambda_k \le \mu_k \le 1 \qquad \text{pre } k = 1, 2, \dots, j$$

$$1 \le \mu_k \le \lambda_k \qquad \text{pre } k = j+1, j+2, \dots, n.$$

<u>Dôkaz:</u> Najskôr uvažujme maticu

$$\mathbf{P} = \mathbf{A} - \frac{\mathbf{A}\,\mathbf{r}\,\mathbf{r}^T\mathbf{A}}{\mathbf{r}^T\mathbf{A}\,\mathbf{r}} \tag{34}$$

Vidíme, že $\mathbf{Pr} = 0$, teda **P** má jednu nulovú vlastnú hodnotu zodpovedajúcu vlastnému vektoru **r**. Označme vlastné čísla matice **P** ako

$$\eta_1 \le \eta_2 \le \dots \le \eta_n.$$

Potom podľa Lemy 3.3. dostávame

$$0 = \eta_1 < \lambda_1 \le \eta_2 \le \lambda_2 \le \dots \le \eta_n \le \lambda_n. \tag{35}$$

Ďalej

$$\mathbf{D} = \mathbf{P} + \frac{\mathbf{r}\,\mathbf{r}^T}{\mathbf{r}^T\mathbf{r}} \tag{36}$$

Nech $\mathbf{w}_k$ je vlastný vektor **P** zodpovedajúci vlastnej hodnote η_k pre k = 2, ... ,n a **r** je vlastný vektor **P** zodpovedajúci $\eta_1 = 0$. Keďže **P** je symetrická, jej vlastné vektory sú ortogonálne. Potom $\mathbf{r}^T\mathbf{w}_k = 0$ pre k = 2, 3, ... , n.

Teda

$$\mathbf{D}\,\mathbf{w}_k = \mathbf{P}\,\mathbf{w}_k = \eta_k\mathbf{w}_k \qquad \text{pre } k = 2, 3, \dots, n.$$

Z toho vyplýva, že $\eta_2, \dots, \eta_n$ sú aj vlastnými číslami matice **D**. Ďalej platí

$$\mathbf{D}\,\mathbf{r} = \mathbf{P}\,\mathbf{r} + \frac{(\mathbf{r}^T\mathbf{r})\,\mathbf{r}}{\mathbf{r}^T\mathbf{r}} = \mathbf{r}\,. \tag{37}$$

Podľa vzťahu (37) **D** má aj vlastnú hodnotu 1 zodpovedajúcu vlastnému vektoru **r**. Teraz máme úplnú množinu $\{\eta_2, \eta_3, \dots, \eta_n, 1\}$ vlastných čísel matice **D**.

Vidíme, že všetky vlastné čísla matice **D** sú kladné, teda **D** > 0. Ak chceme tieto vlastné čísla monotónne usporiadať do množiny { $\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_n$ }, máme tri možnosti:

a) Nech $1 < \lambda_1$. Keďže $\lambda_1 \le \eta_2$, z toho vyplýva, že 1 je najmenšie vlastné číslo matice **D**. Teda $\mu_1 = 1$ a $\mu_k = \eta_k$ pre $k = 2, 3, \dots, n$. Podľa (35) platí

$$1 = \mu_1 < \lambda_1 \le \mu_2 \le \lambda_2 \le \dots \le \mu_n \le \lambda_n . \tag{38.b}$$

b) Nech $\lambda_n < 1$. Keďže $\eta_n \le \lambda_n$, z toho vyplýva, že 1 je najväčšie vlastné číslo **D**. Teda $\mu_k = \eta_{k+1}$ pre $k = 1, 2, \dots, n-1$. Podľa (35) platí

$$\lambda_1 \le \mu_1 \le \lambda_2 \le \mu_2 \dots \le \lambda_n < \mu_n = 1. \tag{38.b}$$

c) Nech $\lambda_j \le 1 \le \lambda_{j+1}$ pre $1 \le j < n$. Interval $[\lambda_j, \lambda_{j+1}]$ obsahuje jednotku a η_{j+1}. Takže usporiadanie bude nasledovné $\mu_k = \eta_{k+1}$ pre $k \le j-1$, $\mu_j = \min[1, \eta_{j+1}]$. Vieme, že $\lambda_j \le 1$ a súčastne z (35) $\lambda_k \le \eta_{k+1}$ pre $k = 1, 2, \dots, n-1$.

Teda $\lambda_k \le \mu_k \le 1$ pre $k = 1, 2, \dots, j$.

Ďalej $\mu_{j+1} = \max[1, \eta_{j+1}]$ a $\mu_k = \eta_k$ pre $k \ge j + 2$. Tiež vieme, že $\lambda_{j+1} \ge 1$ a z (35) $\eta_k \le \lambda_k$ pre $k = 1, 2, \dots, n-1$.

Teda $1 \le \mu_k \le \lambda_k$ pre $k = j+1, j+2 \dots, n$. ■

Dôsledok Vety 3.6 c)

Ak interval $[\lambda_1, \lambda_n]$ obsahuje jednotku, tak je zaručené, že matica **D** bude mať menšie číslo podmienenosti ako matica **A**.

Dôkaz: Priamo z Vety3.6 c) . ■

Vzťah medzi vlastnými číslami matíc **A** a **D** z dôsledku Vety 3.6 využijeme pri konštrukcii takzvaného "samoškálovacieho" algoritmu, v ktorom sa bude automaticky voliť parameter γ zaručujúci pokles čísla podmienenosti matice **R**.

Zobrazenie $\boldsymbol{H}(\mathbf{R}, \mathbf{z}, \mathbf{z}, \gamma, \varphi)$ definované vzťahmi (26), (27) pre maticu $\mathbf{R} > 0$ a $0 \ne \mathbf{z} \in R^n$ označme stručne symbolom $\boldsymbol{R}(\gamma, \varphi)$, teda

$$\boldsymbol{R}(\gamma, \varphi) = \boldsymbol{H}(\mathbf{R}, \mathbf{z}, \mathbf{z}, \gamma, \varphi), \ \ \mathbf{R} > 0 \ \text{ a } \ 0 \ne \mathbf{z} \in R^n \tag{39}$$

Veta 3.7.

Nech vlastné čísla matice $\boldsymbol{R}(\gamma, \varphi)$ definovanej vzťahom (39) sú

$$\mu_1(\gamma, \varphi) \le \mu_2(\gamma, \varphi) \le \dots \le \mu_n(\gamma, \varphi).$$

Potom pre $\varphi \in [0, 1]$ a $\gamma > 0$ platí

$$\mu_k(\gamma, 0) \le \mu_k(\gamma, \varphi) \le \mu_k(\gamma, 1) \quad \text{pre } k = 1, 2, \dots, n. \tag{40}$$

Dôkaz: Podľa (26) pre ľubovolné dva skaláre φ_1 a φ_2 máme

$$\boldsymbol{R}(\gamma, \varphi_2) = \boldsymbol{R}(\gamma, \varphi_1) + \gamma(\varphi_2 - \varphi_1)\,(\mathbf{z}^T\mathbf{R}\mathbf{z})\,\mathbf{u}\mathbf{u}^T. \tag{41}$$

Predpokladajme, že $0 \le \varphi_1 \le \varphi_2 \le 1$ a $\gamma > 0$, potom podľa Lemy 3.3.

$$\mu_k(\gamma, \varphi_1) \le \mu_k(\gamma, \varphi_2) \le \mu_{k+1}(\gamma, \varphi_1) \quad \text{pre } k = 1, 2, \dots, n. \tag{42}$$

Zo vzťahu (42) pre $\forall\varphi \in [0, 1]$ platí

$$\mu_k(\gamma, 0) \le \mu_k(\gamma, \varphi) \le \mu_{k+1}(\gamma, 0) \quad \text{pre } k = 1, 2, \dots, n, \tag{43}$$

a $$\mu_k(\gamma, \varphi) \le \mu_k(\gamma, 1) \le \mu_{k+1}(\gamma, \varphi) \quad \text{pre } k = 1, 2, \dots, n. \tag{44}$$

Spojením (43) a (44) dostávame (40). ■

Veta 3.8.

Nech sú splnené predpoklady Vety 3.7. Nech $\lambda_1 \le \lambda_2 \le \dots \le \lambda_n$ sú vlastné čísla matice **R**. Potom pre $\varphi \in [0, 1]$ a $\gamma > 0$ platí:

a) Ak $1 < \gamma\lambda_1$ tak $\mu_1(\gamma, \varphi) = 1$ a

$$1 < \gamma\lambda_k \le \mu_{k+1}(\gamma, \varphi) \le \gamma\lambda_n \qquad \text{pre } k = 1, 2, \dots, n-1.$$

b) Ak $\gamma\lambda_n < 1$ tak $\mu_n(\gamma, \varphi) = 1$ a

$$\gamma\lambda_k \le \mu_k(\gamma, \varphi) \le \gamma\lambda_{k+1} < 1 \qquad \text{pre } k = 1, 2, \dots, n-1.$$

c) Ak $\gamma\lambda_j \le 1 \le \gamma\lambda_{j+1}$ pre nejaké $1 \le j < n$, tak aspoň jedno z vlastných čísel $\mu_j(\gamma, \varphi)$, $\mu_{j+1}(\gamma, \varphi)$ je rovné jednej a

$$\gamma\lambda_k \le \mu_k(\gamma, \varphi) \le 1 \qquad \text{pre } k = 1, 2, \dots, j$$

$$1 \le \mu_k(\gamma, \varphi) \le \gamma\lambda_k \qquad \text{pre } k = j+1, j+2, \dots, n.$$

Dôkaz: I. Pre $\boldsymbol{R}(1, 0)$.

Dôkaz vety pre tento prípad vyplýva z Vety 3.5., ak substituujeme $\mathbf{A} = \mathbf{R}$, $\mathbf{D} = \boldsymbol{R}(1, 0)$ a $\mathbf{r} = \mathbf{z}$.

II. Pre $\boldsymbol{R}(1, 1)$.

Zo vzťahu (32) dostávame

$$[\boldsymbol{R}(1, 1)]^{-1} = \boldsymbol{H}(R^{-1}, z, z, 1, 0). \tag{45}$$

Vlastné čísla matice $\mathbf{R}^{-1}$ sú $1/\lambda_n \le 1/\lambda_{n-1} \le \dots \le 1/\lambda_1$ a matice $[\boldsymbol{R}(1, 1)]^{-1}$ sú $1/\mu_n(1,1) \le 1/\mu_{n-1}(1, 1) \le \dots \le 1/\mu_1(\gamma, \varphi)$. Ak vo vete 3.5. substituujeme $\mathbf{A} = \mathbf{R}^{-1}$, $\mathbf{D} = [\boldsymbol{R}(1, 1)]^{-1}$, $\mathbf{r} = \mathbf{z}$, tak invertovaním vzťahov z tejto vety dostávame dôkaz pre tento prípad.

III. Pre $\boldsymbol{R}(\gamma, \varphi)$.

Zo vzťahu (30) platí

$$\boldsymbol{H}(\mathbf{R}, \mathbf{z}, \mathbf{z}, \gamma, \varphi) = \boldsymbol{H}(\gamma\mathbf{R}, \mathbf{z}, \mathbf{z}, 1, \varphi), \tag{46}$$

Vlastné čísla matice $\gamma\mathbf{R}$ sú $\gamma\lambda_1 \leq \gamma\lambda_2 \leq \ldots \leq \gamma\lambda_n$. Ak v I., II. Substituujeme $\gamma\lambda_k$ za λ_k pre $k = 1, 2, \ldots, n$, tak dokážeme tvrdenie pre ľubovolné $\gamma > 0$ a hodnoty $\varphi \in \{0, 1\}$. Z Vety 3.7. pre $\varphi \in [0, 1]$ a $\gamma > 0$ platí

$$\mu_k(\gamma, 0) \leq \mu_k(\gamma, \varphi) \leq \mu_k(\gamma, 1) \quad \text{pre } k = 1, 2, \ldots, n.$$

Preto všetky nerovnosti, ktoré sú splnené pre $\mu_k(\gamma, 0)$ aj $\mu_k(\gamma, 1)$, sú splnené aj pre $\mu_k(\gamma, \varphi)$. Tým je tvrdenie dokázané pre $\forall\, \varphi \in [0, 1]$. ■

Z predchádzajúcej vety vieme aký je vzťah medzi vlastnými číslami matice $\mathbf{R}$ a matice $\boldsymbol{R}(\gamma, \varphi)$, teda vzťah medzi vlastnými číslami matice $\mathbf{R}_k$ a matice $\mathbf{R}_{k+1}$. Vidíme tiež, že ak zvolíme $\gamma = 1$ a $\varphi \in [0, 1]$, tak vlastné čísla matice $\mathbf{R}$ sa posunú bližšie k jednotke v každej iterácii. Ak použijeme označenie z Vety 3.8., tak pre $\varphi \in [0, 1]$ platí

$$|\mu_k(1, \varphi) - 1| \leq |\lambda_k - 1| \qquad \text{pre } k = 1, 2, \ldots, n.$$

(Dôkaz vyplýva priamo z Vety 3.8.)

Voľbe parametra $\gamma_k = 1$ zodpovedá Broydenova trieda kvázinewtonovských formúl, ktorá bola skúmaná skôr ako Orenova trieda. Jej špeciálnym prípadom je aj DFP formula, ktorá zodpovedá $\gamma_k = 1$ a $\varphi_k = 0$. V týchto prípadoch platí, že vlastné čísla matice $\mathbf{R}_k$ sa v každej iterácii približia k jednotke. Táto vlastnosť však nie je postačujúca pre zaručenie poklesu čísla podmienenosti matice $\mathbf{R}_k$.

V prípade kvadratickej funkcie DFP formula v každej iterácii posunie jedno vlastné číslo matice $\mathbf{R}_k$ do jednotky a ostatné vlastné čísla matice $\mathbf{R}_{k+1}$ sa budú nachádzať medzi vlastnými číslami matice $\mathbf{R}_k$ ako to vyplýva z Loewnerovej lemy. Ak pri štarte $\mathbf{H}_0 = \mathbf{I}$, tak $\mathbf{R}_0 = \mathbf{G}$. Môže nastať prípad, keď matica $\mathbf{G}$ bude mať všetky vlastné čísla omnoho väčšie ako jedna, ale číslo podmienenosti bude mať relatívne malé. Po prvej iterácii bude najmenšie vlastné číslo matice $\mathbf{R}_1$ rovné jednej, čiže bude výrazne nižšie ako najmenšie vlastné číslo matice $\mathbf{R}_0$. Najväčšie vlastné číslo $\mathbf{R}_1$ bude medzi dvoma vlastnými číslami $\mathbf{R}_0$ s najvyššou hodnotou, teda sa nebude výrazne líšiť od najväčšieho vlastného čísla matice $\mathbf{R}_0$. V takomto prípade $K(\mathbf{R}_1)$ bude väčšie ako $K(\mathbf{G})$. Aj keď bude číslo podmienenosti $K(\mathbf{R}_k)$ v každom ďalšom kroku klesať, môže byť väčšie ako $K(\mathbf{G})$ až do n-1 iterácie.

Našim cieľom je zaručiť pokles čísla podmienenosti $K(\mathbf{R}_k)$ v každej iterácii. Zameriame sa teda na analýzu zmeny $K(\mathbf{R}_k)$ po jednej iterácii. Ako ďalší dôsledok Vety 3.8. môžeme sformulovať nasledovné tvrdenie.

Veta 3.9.

Nech $\boldsymbol{R}(\gamma, \varphi)$ je definované vzťahom (39). Nech $\mathbf{R}$, $\mu_k(\gamma, \varphi)$ a λ_k sú definované ako vo Vete 3.7 a 3.8, potom pre $\varphi \in [0, 1]$ a $\gamma > 0$ platí:

a) Ak $1 < \gamma\lambda_1$, tak $\gamma\lambda_{n-1} \le K(\boldsymbol{R}(\gamma, \varphi)) \le \gamma\lambda_n$.

b) Ak $\gamma\lambda_n < 1$, tak $1/\gamma\lambda_2 \le K(\boldsymbol{R}(\gamma, \varphi)) \le 1/\gamma\lambda_1$.

c) Ak $\gamma\lambda_1 \le 1 \le \gamma\lambda_n$, tak $K(\boldsymbol{R}(\gamma, \varphi)) \le K(\mathbf{R})$.

<u>Dôkaz:</u> Keďže matice $\mathbf{R}$ aj $\boldsymbol{R}(\gamma, \theta)$ sú kladne definitné, tak $K(\mathbf{R}) = \lambda_n / \lambda_1$ a

$K(\boldsymbol{R}(\gamma, \varphi)) = \mu_n(\gamma, \varphi) / \mu_1(\gamma, \varphi)$. Potom z Vety 3.8 častí a), b), c) vyplýva

a) $\mu_1(\gamma, \varphi) = 1$ a $\gamma\lambda_{n-1} \le \mu_n(\gamma, \varphi) \le \gamma\lambda_n$ čo implikuje časť a).

b) $\mu_n(\gamma, \varphi) = 1$ a $\gamma\lambda_1 \le \mu_1(\gamma, \varphi) \le \gamma\lambda_2$ čo implikuje časť b).

c) $\gamma\lambda_1 \le \mu_1(\gamma, \varphi) \le 1 \le \mu_n(\gamma, \varphi) \le \gamma\lambda_n$, teda

$\mu_n(\gamma, \varphi) / \mu_1(\gamma, \varphi) \le \lambda_1/\lambda_2$ z toho vyplýva čacť c). ■

Vidíme, že ak $\varphi \in [0, 1]$ a $\gamma \in [1/\lambda_n, 1/\lambda_1]$, tak číslo podmienenosti matice $\mathbf{R}_{k+1}$ nebude väčšie ako matice $\mathbf{R}_k$. (Aj keď neplatí, že $K(\mathbf{R}_{k+1})$ je ostro menšie ako $K(\mathbf{R}_k)$, budeme zjednodušene nazývať tento vzťah ako "pokles" čísla podmienenosti matice $\mathbf{R}_k$. Vždy však tento "pokles" budeme chápať v zmysle $K(\mathbf{R}_{k+1}) \le K(\mathbf{R}_k)$.)

V ďalšom ukážeme , že reštrikcia φ na interval [0, 1] je nevyhnutná.

Veta 3.10.

Uvažujme kvadratickú funkciu (2.8), $\mathbf{H} > 0$, matice $\mathbf{H}_+$ definované vzťahmi (2), (3). Nech γ je volené tak, aby bolo splnené

$$\lambda_1 \le 1/\gamma \le \lambda_n, \tag{47}$$

kde λ_1 a λ_n sú najmenšia a najväčšie vlastné číslo matice $\mathbf{R} = \mathbf{G}^{1/2}\mathbf{H}\mathbf{G}^{1/2}$.

Potom

$$K(\mathbf{R}_{k+1}) \le K(\mathbf{R}_k) \tag{48}$$

a $\mathbf{H}_{k+1} > 0$

vtedy a len vtedy, ak $\varphi \in [0, 1]$.

<u>Dôkaz:</u> Ak $\varphi \in [0, 1]$, tak dôkaz vyplýva z Vety 3.8. c)

Obrátené tvrdenie dokážeme pomocou kontrapríkladu, ktorý prvý uverejnil Fletcher.

Predpokladajme, že $\varphi \leq -\varepsilon$ alebo $\varphi \geq 1+\varepsilon$, kde $0 < \varepsilon << 1$.

Nech matica

$$\mathbf{R} = \begin{bmatrix} 1+\varepsilon & \varepsilon^{1/2} \\ \varepsilon^{1/2} & \varepsilon \end{bmatrix}.$$

Vlastné čísla matice **R** sú

$$\lambda_1 = \eta, \quad \lambda_2 = 1 + 2\varepsilon - \eta,$$

kde
$$\eta = \frac{1 + 2\varepsilon - \sqrt{1+4\varepsilon}}{2}. \tag{49}$$

<u>I. Nech $\gamma = 1$.</u>

Vidíme, že $\eta < 1 < 1 + 2\varepsilon - \eta$, teda γ spĺňa podmienku (47).

Vieme, že
$$\mathbf{R}_+ = \left(\mathbf{R} - \frac{\mathbf{Rzz}^T\mathbf{R}}{\mathbf{z}^T\mathbf{Rz}} + \varphi(\mathbf{z}^T\mathbf{Rz})\,\mathbf{uu}^T\right)\gamma + \frac{\mathbf{zz}^T}{\mathbf{z}^T\mathbf{z}},$$

kde
$$\mathbf{u} = \frac{\mathbf{z}}{\mathbf{z}^T\mathbf{z}} - \frac{\mathbf{Rz}}{\mathbf{z}^T\mathbf{Rz}}.$$

Nech vektor $\mathbf{z} = \mathbf{G}^{1/2}\mathbf{p} = (0, 1)^T$, potom

$$\mathbf{z}^T\mathbf{Rz} = \varepsilon, \quad \mathbf{z}^T\mathbf{z} = 1, \quad \mathbf{u} = \left(-\frac{1}{\sqrt{\varepsilon}}, 0\right)^T \quad \text{a}$$

$$\frac{\mathbf{Rzz}^T\mathbf{R}}{\mathbf{z}^T\mathbf{Rz}} = \begin{bmatrix} 1 & \sqrt{\varepsilon} \\ \sqrt{\varepsilon} & \varepsilon \end{bmatrix}, \qquad \mathbf{u}\mathbf{u}^T = \begin{bmatrix} \frac{1}{\varepsilon} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \qquad \mathbf{z}\mathbf{z}^T = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Odtiaľ
$$\mathbf{R}_+ = \boldsymbol{R}(1, \varphi) = \begin{bmatrix} \varepsilon + \varphi & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Táto matica je pre $\varphi \leq -\varepsilon$ singulárna alebo záporne definitná, čo je spor s $\mathbf{H}_{k+1} > 0$.

<u>II. Nech $\gamma = 1/\eta$.</u> Takto zvolené γ spĺňa (47) a podobným spôsobom ako v I. dostávame

$$\mathbf{R}_+ = \boldsymbol{R}(1/\eta, \varphi) = \begin{bmatrix} \frac{\varepsilon + \varphi}{\eta} & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Pre $\varphi \geq 1 + \varepsilon$ v tomto prípade platí

$$K(\mathbf{R}_+) = \frac{\varepsilon + \varphi}{\eta} \geq \frac{1 + 2\varepsilon}{\eta} > \frac{1 + 2\varepsilon - \eta}{\eta} = K(\mathbf{R}).$$

To je v spore s (48).

Teda pre ľubovolne malé $\varepsilon > 0$ máme $-\varepsilon \leq \varphi \leq 1 + \varepsilon$ ■

Už vieme, že na zaručenie poklesu čísla podmienenosti matice **R** v zmysle vzťahu (48) je potrebné voliť hodnoty parametrov tak, aby $\varphi \in [0, 1]$ a γ tak, aby bola splnená podmienka (47). Pre praktické využitie tejto teórie je však potrebné nájsť taký spôsob voľby hodnôt Orenovho parametra γ, aby sme nemuseli v každej iterácii počítať vlastné čísla matice **R**. V nasledujúcej časti ukážeme, ako môžeme určiť vhodné hodnoty γ len na základe znalostí matice **H** a vektorov **y**, **p**.

3.3. Konvexná trieda Orenovských parametrov

V tejto časti ukážeme platnosť podmienky (47) v prípade kvadratickej funkcie pre celú triedu parametrov γ.

Nech **H** je regulárna matica a **p**, **y** vektory z R^n také, že $\mathbf{p}^T\mathbf{y} \neq 0$. Zavedieme označenie

$$\gamma(\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{y}, \theta) = (1-\theta)\,\frac{\mathbf{p}^T\mathbf{y}}{\mathbf{y}^T\mathbf{H}\mathbf{y}} + \theta\,\frac{\mathbf{p}^T\mathbf{H}^{-1}\mathbf{p}}{\mathbf{p}^T\mathbf{y}}, \quad \text{kde } \theta \in [0, 1]. \qquad (50)$$

Veta 3.11.

Nech **p**, **y** sú také vektory z R^n, že $\mathbf{p}^T\mathbf{y} > 0$. Nech **H**, **G**, **R** sú kladne definitné matice, pre ktoré platí

$$\mathbf{y} = \mathbf{G}\mathbf{p}, \qquad (51)$$

$$\mathbf{R} = \mathbf{G}^{1/2}\mathbf{H}\mathbf{G}^{1/2}. \qquad (52)$$

Ak skalár $\gamma(\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{y}, \theta)$ je definovaný vzťahom (50) potom platí

$$\frac{1}{\lambda_n} \leq \gamma(\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{y}, \theta) \leq \frac{1}{\lambda_1}, \qquad (53)$$

kde λ_1, λ_n je najmenšie a najväčšie vlastné číslo matice **R**.

<u>Dôkaz:</u> Pre $\theta \in [0, 1]$ je $\gamma(\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{y}, \theta)$ konvexnou kombináciou $\gamma(\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{y}, 0)$ a $\gamma(\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{y}, 1)$, preto stačí (53) dokázať pre tieto extremálne hodnoty.

Označme

$$\mathbf{z} = \mathbf{G}^{1/2}\mathbf{p} \qquad (54)$$

a podľa (51)

$$\mathbf{z} = \mathbf{G}^{-1/2}\mathbf{y}. \qquad (55)$$

<u>I. Pre $\theta = 0$.</u>

Substitúciou (51), (52) a (54) do (50) dostávame

$$\gamma(\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{y}, 0) = \frac{\mathbf{p}^T\mathbf{y}}{\mathbf{y}^T\mathbf{H}\mathbf{y}} = \frac{\mathbf{p}^T\mathbf{G}\mathbf{p}}{\mathbf{p}^T\mathbf{G}\mathbf{H}\mathbf{G}\mathbf{p}} = \frac{\mathbf{z}^T\mathbf{z}}{\mathbf{z}^T\mathbf{R}\mathbf{z}} \qquad (56)$$

Pre najmenšie a najväčšie vlastné číslo **R** a $\mathbf{x} \in R^n$ platí (viď [2] str.35)

$$\lambda_1 = \min_{\|x\|=1} \mathbf{x}^T\mathbf{R}\mathbf{x} \quad \text{a} \quad \lambda_n = \max_{\|x\|=1} \mathbf{x}^T\mathbf{R}\mathbf{x}. \tag{57}$$

Teda platí

$$\lambda_1\mathbf{z}^T\mathbf{z} \leq \mathbf{z}^T\mathbf{R}\mathbf{z} \leq \lambda_n\mathbf{z}^T\mathbf{z}. \tag{58}$$

Z (56) a (58) dostávame

$$\frac{1}{\lambda_n} \leq \gamma(\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{y}, 0) \leq \frac{1}{\lambda_1} \tag{59}$$

<u>II. Pre $\theta = 1$.</u>

Substitúciou (51), (52) a (55) do (50) dostávame

$$\gamma(\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{y}, 1) = \frac{\mathbf{z}^T\mathbf{R}^{-1}\mathbf{z}}{\mathbf{z}^T\mathbf{z}} \tag{60}$$

Matica R^{-1} má najmenšie a najväčšie vlastné číslo rovné $1/\lambda_n$ respektíve $1/\lambda_1$, preto použitím (57) a (58) dostávame

$$\frac{1}{\lambda_n}\mathbf{z}^T\mathbf{z} \leq \mathbf{z}^T\mathbf{R}^{-1}\mathbf{z} \leq \frac{1}{\lambda_1}\mathbf{z}^T\mathbf{z}. \tag{61}$$

Odtiaľ
$$\frac{1}{\lambda_n} \leq \gamma(\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{y}, 1) \leq \frac{1}{\lambda_1}. \tag{62}$$

Tým je veta dokázaná. ■

Ak minimalizujeme kvadratickú funkciu a na generovanie smerov používame algoritmus 2, tak v k-tej iterácii sú splnené predpoklady Vety 3.11. Potom voľba $\gamma_k = \gamma_k(\mathbf{H}_k, \mathbf{p}_k, \mathbf{y}_k, \theta_k)$ zaručí, že v k-tej iterácii $K(\mathbf{R}_{k+1}) \leq K(\mathbf{R}_k)$.

Voľba takéhoto γ_k sa môže zdať nepraktická, pretože na výpočet $\gamma(\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{y}, \theta)$ pre $\theta \neq 0$ potrebujeme poznať $\mathbf{H}^{-1}$. Nasledujúcou vetou ukážeme, že $\gamma(\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{y}, 1)$ môžeme vypočítať aj bez znalosti inverzie **H**.

Veta 3.12.

Nech $\mathbf{p}, \mathbf{y}, \mathbf{g}, \mathbf{H}, \lambda$ sú ako v algoritme 2 a $\gamma(\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{y}, \theta)$ je definované vzťahom (50). Potom platí

$$\gamma(\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{y}, 1) = \frac{-\lambda\mathbf{g}^T\mathbf{p}}{\mathbf{y}^T\mathbf{p}} = \frac{\mathbf{g}^T\mathbf{p}}{\mathbf{g}^T\mathbf{H}\mathbf{y}}, \tag{63.a}$$

$$\gamma(\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{y}, 1) = \lambda. \qquad (\lambda \text{ - optimálny krok}) \tag{63.b}$$

Dôkaz: Pre $\theta = 1$ substitúciou $\mathbf{p} = -\lambda\mathbf{Hg}$ v (50) dostávame (63.a), teda

$$\gamma(\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{y}, 1) = \frac{\mathbf{p}^T\mathbf{H}^{-1}\mathbf{p}}{\mathbf{p}^T\mathbf{y}} = -\frac{\lambda\mathbf{g}^T\mathbf{p}}{\mathbf{p}^T\mathbf{y}} = \frac{\mathbf{g}^T\mathbf{p}}{\mathbf{g}^T\mathbf{Hy}} \,. \tag{64}$$

Keďže používame optimálny krok podľa (13) máme $\mathbf{p}^T\mathbf{g}_+ = 0$. Teda

$$\mathbf{p}^T\mathbf{y} = \mathbf{p}^T(\mathbf{g}_+ - \mathbf{g}) = -\mathbf{p}^T\mathbf{g} \,. \tag{65}$$

Dosadením (65) do (64) dostávame

$$\gamma(\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{y}, 1) = \lambda.$$

■

Zo vzťahu (63.a) vyplýva, že γ môžeme určiť pomocou už známych veličín. Ak využijeme znalosť optimálneho kroku tak na výpočet $\gamma(\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{y}, 1)$ môžeme použiť vzťah (63.b). Takýto postup by bol výpočtovo najmenej náročný, lebo optimálny krok máme vypočítaný vždy ešte pred voľbou γ. Avšak optimálny krok nemusí byť vypočítaný úplne presne, čo je spôsobené zaokrúhľovaním pri výpočte (Ak je počítaný napríklad zlatým rezom.).

Aby sme sa vyhli tejto nepresnosti pri voľbe γ je výhodnejšie voliť γ na základe vzťahu (63.a). Pre tento prípad môžeme vzťah (50) prepísať nasledovne:

$$\gamma(\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{y}, \theta) = (1-\theta)\frac{\mathbf{p}^T\mathbf{y}}{\mathbf{y}^T\mathbf{Hy}} + \theta\frac{\mathbf{g}^T\mathbf{p}}{\mathbf{g}^T\mathbf{Hy}} \,. \tag{66}$$

Vzťah (63.b) môžeme v prípade kvadratickej funkcie využiť na generovanie hodnôt optimálneho kroku.

Dôsledok Vety 3.12

Ak f je kvadratická funkcia (2.8), potom pre optimálny krok platí

$$\lambda_k = \frac{\mathbf{g}^T\mathbf{Hg}}{\mathbf{g}^T\mathbf{HGHg}} \,. \tag{67}$$

Dôkaz: Zo vzťahu (12) vieme, že $\mathbf{p} = -\lambda\mathbf{Hg}$. Navyše pre kvadratickú funkciu platí $\mathbf{y} = \mathbf{Gp}$. Dosadením týchto vzťahov do (64) a využitím (63.b) dostaneme vzťah (67).

■

(Výraz $\gamma(\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{y}, \theta)$ má aj vlastnosť "komplementarity". Ide o komplementaritu, ktorú môžeme vyjadriť v nasledujúcom tvare:

$$\gamma(\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{y}, 1) = [\gamma(\mathbf{H}^{-1}, \mathbf{y}, \mathbf{p}, 0)]^{-1}.$$

Bližšie bude táto vlastnosť rozoberaná v časti 3.7.)

3.4. Samoškálovací algoritmus

V predošlej časti sme našli spôsob vhodného generovania Orenovho parametra znižujúceho číslo podmienenosti matíc R_k. Ak v algoritme 2 uplatníme takúto voľbu Orenovho parametra, dostávame nasledovný *samoškálovací algoritmus*.

Algritmus 3

Štart: $\mathbf{x}_0 \in R^n$, $\mathbf{g}_0 = \nabla f(\mathbf{x}_0)$, $\mathbf{H}_0 > 0$.

$\varepsilon > 0$ – konštanta pre kritérium presnosti.

Počítadlo iterácii $k = 0$.

Cyklus: $k = 0, 1, ...$

1\. krok Test dosiahnutej presnosti

Ak $\|\nabla f(\mathbf{x}_k)\| < \varepsilon$, tak STOP.

2\. krok Vypočítame smer $\mathbf{s}_k = -\mathbf{H}_k\mathbf{g}_k$.

3\. krok Vypočítame optimálny krok $\lambda_k > 0$.

4\. krok Výpočet novej aproximácie $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \lambda_k\mathbf{s}_k$

a nového gradientu $\mathbf{g}_{k+1} = \nabla f(\mathbf{x}_{k+1})$.

5\. krok Vypočítame vektory

$\mathbf{p}_k = \mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k,$

$\mathbf{y}_k = \mathbf{g}_{k+1} - \mathbf{g}_k,$

$$\mathbf{v}_k = \frac{\mathbf{p}_k}{\mathbf{p}_k^T\mathbf{y}_k} - \frac{\mathbf{H}_k\mathbf{y}_k}{\mathbf{y}_k^T\mathbf{H}_k\mathbf{y}_k}, \quad (68)$$

6\. krok Zvolíme vhodné hodnoty skalárov $\varphi_k \in [0, 1]$ a $\theta \in [0, 1]$

a vypočítame

$$\gamma(\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{y}, \theta) = (1-\theta)\frac{\mathbf{p}^T\mathbf{y}}{\mathbf{y}^T\mathbf{H}\mathbf{y}} + \theta\,\frac{\mathbf{g}^T\mathbf{p}}{\mathbf{g}^T\mathbf{H}\mathbf{y}}, \quad (69)$$

7\. krok Skonštruujeme maticu $\mathbf{H}_{k+1}$ nasledovne:

$$\mathbf{H}_{k+1} = \gamma_k\mathbf{H}_k + \frac{\mathbf{p}_k\mathbf{p}_k^T}{\mathbf{p}_k^T\mathbf{y}_k} - \frac{\gamma_k\mathbf{H}_k\mathbf{y}_k\mathbf{y}_k^T\mathbf{H}_k}{\mathbf{y}_k^T\mathbf{H}_k\mathbf{y}_k} + \gamma_k\,\varphi_\kappa(\mathbf{y}_k^T\mathbf{H}_k\mathbf{y}_k)\mathbf{v}_k\mathbf{v}_k^T. \quad (70)$$

8\. krok Zväčšíme k o jeden a vrátime sa na 1.krok

Výstup: $\mathbf{x}_k$ - aproximácia bodu minima $f(\mathbf{x})$

Veľmi dobrou vlastnosťou algoritmu 3 je jeho invariantnosť na škálvanie účelovej funkcie. O tejto vlastnosti pojednáva nasledujúca veta.

Veta 3.13.

Nech $\{\mathbf{H}_k\}$, $\{\mathbf{x}_k\}$ sú postupnosti matíc a vektorov generované algoritmom 3 aplikovaným na konvexnú funkciu $f(\mathbf{x}) \in C^2$. Nech $\alpha > 0$, $\beta > 0$, $\delta > 0$, $\hat{f} = \alpha.f(\beta.\hat{\mathbf{x}})$, $\hat{\mathbf{H}}_0 = \delta.\mathbf{H}_0$, $\mathbf{x}_0 = \beta.\hat{\mathbf{x}}_0$ a $\{\hat{\mathbf{H}}_k\}$, $\{\hat{\mathbf{x}}_k\}$ sú zodpovedajúce postupnosti pre funkciu $\hat{f}$. Nech postupnosti $\{\varphi_k\}$, $\{\theta_k\}$ sú rovnaké pre obidve minimalizované funkcie f a $\hat{f}$. Potom pre $k > 0$ platí

$$\hat{\mathbf{H}}_k = \frac{\mathbf{H}_k}{\alpha\beta^2} \quad \text{a} \quad \hat{\mathbf{x}}_k = \frac{\mathbf{x}_k}{\beta}.$$

<u>Dôkaz:</u> Pre $\forall\ \hat{\mathbf{x}}_k, \mathbf{x}_k \in R^n$ také, že $\mathbf{x}_k = \beta\hat{\mathbf{x}}_k$ platí

$$\hat{\mathbf{g}}_k = \nabla_{\hat{\mathbf{x}}}\left[\alpha\, f(\beta\hat{\mathbf{x}}_k)\right] = \alpha\beta\nabla_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}_k) = \alpha\beta\,\mathbf{g}_k. \tag{71}$$

Ak $\mathbf{x}_0 = \beta\hat{\mathbf{x}}_0$ a $\hat{\mathbf{H}}_0 = \delta\mathbf{H}_0$, tak pre prvé smery platí

$$\hat{\mathbf{s}}_0 = -\hat{\mathbf{H}}_0\hat{\mathbf{g}}_0 = -\delta\alpha\beta\,\mathbf{H}_0\mathbf{g}_0 = (\delta\,\alpha\,\beta)\mathbf{s}_0.$$

Prvé vektory smerov sa líšia iba veľkosťou. Aby sme našli $\mathbf{x}_1$, $\hat{\mathbf{x}}_1$ budeme hľadať bod minima $f(.)$ respektíve $\hat{f}(\,.)$ v rovnakom smere. Odtiaľ dostávame $\mathbf{x}_1 = \beta\hat{\mathbf{x}}_1$, preto $\hat{\mathbf{p}}_0 = \frac{\mathbf{p}_0}{\beta}$. Podľa (71) platí $\hat{\mathbf{y}}_0 = \alpha\beta\mathbf{y}_0$. Dosadením týchto vzťahov do (68), (69), (70) dostávame:

$$\hat{\gamma}_0 = \frac{1}{\delta\alpha\beta^2}\gamma_0, \quad \hat{\mathbf{v}}_0 = \frac{1}{\alpha\beta}\mathbf{v}_0 \quad \text{a} \quad \hat{\mathbf{H}}_1 = \frac{\mathbf{H}_1}{\alpha\beta^2}.$$

Indukciou dostávame platnosť vzťahov pre $\forall\ k > 0$. ■

3.5. Optimálna hodnota Orenovho parametra

V kapitole 3.3 sme odvodili konvexnú triedu parametrov γ_k, ktoré zaručujú, že matice $\mathbf{R}_k$ pre $\varphi_k \in [0, 1]$ majú vlastnosť (48), teda $K(\mathbf{R}_{k+1}) \le K(\mathbf{R}_k)$. Táto trieda však aj naďalej dáva širokú škálu možností voľby Orenovho parametra γ_k. Pokúsme sa zistiť ako rôzne hodnoty parametra γ_k ovplyvňujú konvergenciu algoritmu 3. Ako kritérium priblíženia budeme aj naďalej používať pokles čísla podmienenosti matice $\mathbf{R}_k$. Našim cieľom v tejto časti bude zistiť vplyv rôznych $\gamma_k \in [1/\lambda_n, 1/\lambda_1]$ na pokles

$K(\mathbf{R}_{k+1})$ <u>pri fixnom $\varphi_k \in [0, 1]$</u>. (λ_1, λ_n sú najmenšie a najväčšie vlastné číslo matice $\mathbf{R}_k$.)

Pripomeňme si už zavedené označenie:

$$\boldsymbol{R}(\gamma,\varphi) = \boldsymbol{H}(\mathbf{R}, \mathbf{z}, \mathbf{z}, \gamma, \varphi) =$$

$$= \left(\mathbf{R} - \frac{\mathbf{Rzz}^T\mathbf{R}}{\mathbf{z}^T\mathbf{Rz}} + \varphi(\mathbf{z}^T\mathbf{Rz})\,\mathbf{uu}^T\right)\gamma + \frac{\mathbf{zz}^T}{\mathbf{z}^T\mathbf{z}}, \tag{72}$$

kde
$$\mathbf{u} = \frac{\mathbf{z}}{\mathbf{z}^T\mathbf{z}} - \frac{\mathbf{Rz}}{\mathbf{z}^T\mathbf{Rz}} \tag{73}$$

a $\mathbf{R} = \mathbf{G}^{1/2}\mathbf{H}\mathbf{G}^{1/2}$.

Definícia 3.1. Nech $\varphi \in [0, 1]$ je pevne zvolená hodnota.

Hodnotu γ^* Orenovho parametra nazývame *optimálnou*, ak pre zobrazenie (72) platí:

$$K(\boldsymbol{R}(\gamma^*,\varphi)) = \min_{\gamma>0} K(\boldsymbol{R}(\gamma,\varphi)) \tag{74}$$

Veta 3.14.

Nech vlastné čísla matice $\mathbf{R} > 0$ sú

$$0 < \lambda_1 \le \lambda_2 \le \ldots \le \lambda_n.$$

a vlastné čísla matice

$$\mathbf{M} = \mathbf{R} - \frac{\mathbf{Rzz}^T\mathbf{R}}{\mathbf{z}^T\mathbf{Rz}} + \varphi(\mathbf{z}^T\mathbf{Rz})\mathbf{uu}^T, \tag{75}$$

(kde $\mathbf{u}$ je definované vzťahom (73).) sú

$$\eta_1 \le \eta_2 \le \ldots \le \eta_n.$$

Potom vlastné čísla matice $\boldsymbol{R}(\gamma,\varphi)$ sú $\{\gamma\eta_2, \gamma\eta_3, \ldots, \gamma\eta_n, 1\}$ a pre ľubovolné $\varphi \in [0, 1]$ a $\gamma > 0$ platí

$$\lambda_1 \le \eta_2 \le \lambda_2 \le \ldots \le \eta_n \le \lambda_n. \tag{76}$$

<u>Dôkaz:</u> Pre maticu $\mathbf{M}$ platí $\mathbf{M}z = 0$. Z toho vyplýva, že $\mathbf{M}$ má vlastné číslo $\eta_1 = 0$. Toto vlastné číslo prislúcha k vlastnému vektoru $\mathbf{z}$. Nech $\mathbf{w}_k$ sú vlastné vektory prislúchajúce k vlastným čislam η_k pre $k = 2, 3, \ldots, n$. Vieme, že matica $\mathbf{M}$ je symetrická, teda jej vlastné vektory sú ortogonálne. Platí

$$\mathbf{z}^T\mathbf{w}_k = 0 \text{ pre } k = 2, 3, \ldots, n. \tag{77}$$

Maticu $\boldsymbol{R}(\gamma,\varphi)$ môžeme zapísať v tvare

$$\boldsymbol{R}(\gamma,\varphi) = \gamma\mathbf{M} + \frac{\mathbf{z}\,\mathbf{z}^T}{\mathbf{z}^T\mathbf{z}}. \tag{78}$$

a jej vlastné čísla sú $\{\gamma\eta_2, \gamma\eta_3, \dots, \gamma\eta_n,\}$, pretože platí

$$\boldsymbol{R}(\gamma,\varphi).\mathbf{w}_k = \gamma\mathbf{M}\mathbf{w}_k = \gamma\,\eta_k \qquad \text{pre } k = 2, 3, \dots, n.$$

Matica $\boldsymbol{R}(\gamma,\varphi)$ má aj vlastné číslo rovné jednej, lebo

$$\boldsymbol{R}(\gamma,\varphi)\mathbf{z} = \gamma\mathbf{M}\mathbf{z} + \frac{(\mathbf{z}^T\mathbf{z})\mathbf{z}}{\mathbf{z}^T\mathbf{z}} = \mathbf{z}.$$

Dostali sme úplnú množinu $\{\gamma\eta_2, \gamma\eta_3, \dots, \gamma\eta_n, 1\}$ vlastných čísel matice $\boldsymbol{R}(\gamma,\varphi)$.

Označme vlastné čísla matice $\boldsymbol{R}(\gamma, \varphi)$ ako

$$\mu_1(\gamma, \varphi) \le \mu_2(\gamma, \varphi) \le \dots \le \mu_n(\gamma, \varphi).$$

Dôkaz vzťahu (76) vyplýva z jednotlivých častí Vety 3.8. Vo všetkých troch spomínaných prípadov najskôr určíme, ktoré $\mu_k(\gamma, \varphi)$ je rovné jednej. Následne určíme vzťah medzi zvyšnými $\mu_k(\gamma, \varphi)$ a $\gamma\eta_k$. Z nerovností v jednotlivých častiach Vety 3.8 dostaneme vzťah (76).

Nech napríklad $\gamma > 1/\lambda_1$.

Z Vety 3.8 a) dostaneme, že

$$\mu_1(\gamma, \varphi) = 1 \quad \text{a} \quad 1 < \gamma\lambda_k \le \mu_{k+1}(\gamma, \varphi) \le \gamma\lambda_n \qquad \text{pre } k = 1, 2, \dots, n\text{-}1.$$

Keďže $\mu_1(\gamma, \varphi) = 1$, tak $\quad \mu_k(\gamma, \varphi) = \gamma\eta_k \qquad$ pre $k = 2, 3, \dots, n$.

Z nerovnosti medzi $\gamma\lambda_k$ a $\mu_k(\gamma, \varphi)$ dostávame vzťah (76).

Analogicky v ostatných prípadoch. ■

Dôsledok Vety 3.14.

Nech sú splnené predpoklady Vety 3.14 a $\gamma > 0$, potom pre pevne zvolené $\varphi \in [0, 1]$ platí:

a) Najväčšie vlastné číslo matice $\boldsymbol{R}(\gamma,\varphi)$ je $\max[1, \gamma\eta_n]$ a najmenšie vlastné číslo matice $\boldsymbol{R}(\gamma,\varphi)$ je $\min[1, \gamma\eta_2]$.

b) Číslo podmienenosti $K(\boldsymbol{R}(\gamma,\varphi)) \ge \dfrac{\eta_n}{\eta_2}$

a rovnosť nastáva, ak $\quad \eta_2 \le 1/\gamma \le \eta_n$. (79)

c) Ak platí vzťah (79), tak γ je optimálna hodnota Orenovho parametra.

d) Ak $\gamma \in [1/\lambda_{n-1}, 1/\lambda_2]$, tak γ je optimálna hodnota Orenovho parametra.

Dôkaz: a) Priamo z vety 3.14.

b) Z časti a) máme $K(\boldsymbol{R}(\gamma,\varphi)) = \left\{\dfrac{\max[1,\ \gamma\eta_n]}{\min[1,\ \gamma\eta_2]}\right\} \geq \dfrac{\eta_n}{\eta_2}$

c) Ak platí (79), tak $K(\boldsymbol{R}(\gamma,\varphi)) = \dfrac{\eta_n}{\eta_2}$, a teda podľa b) a Definície 3.1

je γ optimálna hodnota Orenovho parametera.

d) Z Vety 3.14 vyplýva, že $\eta_2 \leq \lambda_2 \leq \ldots \leq \lambda_{n-1} \leq \eta_n$. Preto, ak $\gamma \in [1/\lambda_{n-1},\ 1/\lambda_2]$, tak určite $\eta_2 \leq 1/\gamma \leq \eta_n$ a podľa c) je γ optimálna hodnota Orenovho parametra.

■

Veta 3.15.

Nech sú splnené predpoklady vety 3.14. Označme

$$K^* = K(\boldsymbol{R}(\gamma^*,\varphi)) = \min_{\gamma>0} K(\boldsymbol{R}(\gamma,\varphi)). \tag{80}$$

Potom pre ľubovolné $\gamma \in [1/\lambda_n,\ 1/\lambda_1]$ a $\varphi \in [0,\ 1]$ platí

$$K(\boldsymbol{R}(\gamma,\varphi)) / K^* \leq \max\left[\frac{\lambda_n}{\lambda_{n-1}},\ \frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right]. \tag{81}$$

Dôkaz: Z Dôsledku Vety 3.14 vieme, že $K^* = \dfrac{\eta_n}{\eta_2}$ a

$$K(\boldsymbol{R}(\gamma,\varphi)) = \left\{\frac{\max[1,\ \gamma\eta_n]}{\min[1,\ \gamma\eta_2]}\right\} = \max\left[\frac{\eta_n}{\eta_2},\ \frac{1}{\gamma\eta_2},\ \gamma\eta_n\right].$$

Odtiaľ

$$K(\boldsymbol{R}(\gamma,\varphi)) / K^* = \max\left[1,\ \frac{1}{\gamma\eta_n},\ \gamma\eta_2\right] \quad \text{a} \quad \lambda_1 \leq 1/\gamma \leq \lambda_n, \quad \text{teda}$$

$$K(\boldsymbol{R}(\gamma,\varphi)) / K^* \leq \max\left[1,\ \frac{\lambda_n}{\eta_n},\ \frac{\eta_2}{\lambda_1}\right]. \tag{82}$$

Z Vety 3.14 máme $0 < \eta_2 \leq \lambda_2 \leq \ldots \leq \lambda_{n-1} \leq \eta_n$. Dosadením do vzťahu (82) dostaneme (81).

■

Dostali sme odhad hornej hranice podielu $K(\boldsymbol{R}(\gamma,\varphi))$ a K^*. Vidíme, že ak vzdialenosti medzi vlastnými číslami matice **R** budú malé, tak $K(\boldsymbol{R}(\gamma,\varphi)) \approx K^*$. Na druhej strane môžu nastať prípady, kedy vzdialenosť medzi vlastnými číslami **R** bude veľká. Vtedy by bolo vhodné zvoliť γ ako optimálnu hodnotu Orenovho parametra, pretože by sme dosiahli výrazné zlepšenie.

Teoreticky sme síce ukázali, ktoré hodnoty γ sú optimálne, ale neexistuje praktický postup na voľbu tohoto parametra tak, aby bolo zaručené $\gamma \in [1/\eta_n, 1/\eta_2]$ respektíve $\gamma \in [1/\lambda_{n-1}, 1/\lambda_2]$.

3.6. Optimálna podmienenosť matíc $\mathbf{H}_k$

V predchádzajúcich častiach sme našli spôsob voľby hodnoty γ_k Orenovho parametra tak, aby pre kvadratickú funkciu (2.8) bol zaručený pokles čísla podmienenosti matice $\mathbf{R}_k = \mathbf{G}^{1/2}\mathbf{H}_k\mathbf{G}^{1/2}$, čím v zmysle vzťahu (1) dochádza k zlepšeniu konvergencie. Na základe takejto voľby hodnôt γ_k sme zostrojili samoškálovací algoritmus (algoritmus 3).

Z definície matice $\mathbf{R}_k = \mathbf{G}^{1/2}\mathbf{H}_k\mathbf{G}^{1/2}$ respektíve $\mathbf{H}_k = \mathbf{G}^{-1/2}\mathbf{R}_k\mathbf{G}^{-1/2}$ môžeme usudzovať, že zároveň s poklesom čísla podmienenosti matice $\mathbf{R}_k$ klesá aj číslo podmienenosti $\mathbf{H}_k$. Malé číslo podmienenosti matíc $\mathbf{H}_k$ je žiadúce z numerického hľadiska, pretože sa tým redukujú chyby spôsobené zaokrúhľovaním, a tým je zaručená lepšia numerická stabilita algoritmu .

V tejto časti sa pokúsime pre hodnoty parametra γ_k, ktoré zaručujú pokles $K(\mathbf{R}_k)$, nájsť také hodnoty Broydenovho parametra φ_k, aby číslo podmienenosti matice $\mathbf{H}_{k+1}$ bolo čo najmenšie.

Najskôr ukážeme vzťah medzi číslom podmienenosti matice $\mathbf{H}_{k+1}$ a matice $\mathbf{H}_k$. (Zároveň odvodíme hornú hranicu pre $K(\mathbf{H}_{k+1})$).

Pre jednoduchosť zápisu formúl použijeme nasledovné označenie:

$$\pi = \mathbf{p}^T\mathbf{y}\,, \tag{82.a}$$

$$\chi = \mathbf{y}^T\mathbf{H}\mathbf{y}, \tag{82.b}$$

$$\beta = \mathbf{p}^T\mathbf{H}^{-1}\mathbf{p}. \tag{82.c}$$

V tomto označení má trieda formúl (70) tvar

$$\mathbf{H}_+ = \gamma\mathbf{H} + \frac{\pi + \gamma\varphi\chi}{\pi^2}\mathbf{p}\mathbf{p}^T + \frac{\gamma(\varphi - 1)}{\chi}\mathbf{H}\mathbf{y}\mathbf{y}^T\mathbf{H} - \frac{\gamma\varphi}{\pi}(\mathbf{p}\mathbf{y}^T\mathbf{H} + \mathbf{H}\mathbf{y}\mathbf{p}^T)\,, \tag{83}$$

kde v zmysle algoritmu 3 $\varphi \in [0, 1]$, $\gamma \in \left[\frac{\pi}{\chi}, \frac{\beta}{\pi}\right]$.

Veta 3.16.

Nech $\mathbf{H} > 0$ a matica $\mathbf{H}_+$ je definovaná vzťahom (83). Nech $\mathbf{p}$, $\mathbf{y}$ sú také vektory z R^n, že $\mathbf{p}^T\mathbf{y} = \pi > 0$.

Položme
$$\mu = \gamma \frac{\pi^2 + \varphi(\beta\chi - \pi^2)}{\pi\chi}, \tag{84}$$

$$\rho = \frac{\beta + \mu\chi}{2\pi} \tag{85}$$

Potom platí:

$$K(\mathbf{H}_+) \le K(\mathbf{H}) \frac{\max[\rho + \sqrt{\rho^2 - \mu}, \gamma]}{\min[\rho - \sqrt{\rho^2 - \mu}, \gamma]}, \tag{86}$$

pričom rovnosť nastáva, ak $\mathbf{H} = \mathbf{I}$ alebo $\mathbf{Hy} = \mathbf{p}$ a $\gamma \in \left[\frac{\pi}{\chi}, \frac{\beta}{\pi}\right]$.

Dôkaz: Pre $\forall \mathbf{x} \in R^n$ zo vzťahu (83) máme

$$\mathbf{x}^T\mathbf{H}_+\mathbf{x} = (\mathbf{x}^T\mathbf{H}\mathbf{x})\, \eta(\gamma, \varphi, \mathbf{x}), \tag{87}$$

kde

$$\eta(\gamma, \varphi, \mathbf{x}) = \left(\gamma + \frac{\pi + \gamma\varphi\chi}{\pi^2} \frac{(\mathbf{p}^T\mathbf{x})^2}{\mathbf{x}^T\mathbf{H}\mathbf{x}} + \frac{\gamma(\varphi - 1)}{\chi} \frac{(\mathbf{x}^T\mathbf{H}\mathbf{y})^2}{\mathbf{x}^T\mathbf{H}\mathbf{x}} - 2\frac{\gamma\varphi}{\pi} \frac{(\mathbf{x}^T\mathbf{p})(\mathbf{x}^T\mathbf{H}\mathbf{y})}{\mathbf{x}^T\mathbf{H}\mathbf{x}}\right). \tag{88}$$

Definujme
$$\Phi(\gamma, \varphi) = \frac{\max\limits_{\mathbf{x}} \eta(\gamma, \varphi, \mathbf{x})}{\min\limits_{\mathbf{x}} \eta(\gamma, \varphi, \mathbf{x})}. \tag{89}$$

Keďže $\mathbf{H}_+$ aj $\mathbf{H}$ sú kladne definitné, tak podľa (57) platí

$$K(\mathbf{H}_+) = \frac{\|\mathbf{H}_+\|}{\|\mathbf{H}_+^{-1}\|} = \frac{\max\limits_{\mathbf{x}} \dfrac{(\mathbf{x}^T\mathbf{H}\mathbf{x})\,\eta(\gamma, \varphi, \mathbf{x})}{\mathbf{x}^T\mathbf{x}}}{\min\limits_{\mathbf{x}} \dfrac{(\mathbf{x}^T\mathbf{H}\mathbf{x})\,\eta(\gamma, \varphi, \mathbf{x})}{\mathbf{x}^T\mathbf{x}}} \le \frac{\max\limits_{\mathbf{x}} \dfrac{(\mathbf{x}^T\mathbf{H}\mathbf{x})}{\mathbf{x}^T\mathbf{x}}}{\min\limits_{\mathbf{x}} \dfrac{(\mathbf{x}^T\mathbf{H}\mathbf{x})}{\mathbf{x}^T\mathbf{x}}}\, \Phi(\gamma, \varphi) =$$
$$= K(\mathbf{H})\, \Phi(\gamma, \varphi). \tag{90}$$

V pokračovaní dôkazu sa budeme snažiť vyjadriť $\Phi(\gamma, \varphi)$.

Pre prehľadnejší zápis vzťahov použijeme označenie:

$$\mathbf{a} = \frac{\mathbf{H}^{1/2}\mathbf{x}}{(\mathbf{x}^T\mathbf{H}\mathbf{x})^{1/2}}, \tag{91.a}$$

$$\mathbf{b} = \mathbf{H}^{-1/2}\mathbf{p}, \tag{91.b}$$

$$\mathbf{c} = \mathbf{H}^{1/2}\mathbf{y}. \tag{91.c}$$

Substitúciou vzťahov (91) do (89) dostávame

$$\beta = \| \mathbf{b} \|, \tag{92.a}$$

$$\chi = \| \mathbf{c} \|, \tag{92.b}$$

$$\pi = \mathbf{b}^T\mathbf{c} \tag{92.c}$$

$$\| \mathbf{a} \| = 1. \tag{92.d}$$

Dosadením (92) do (88) máme

$\eta(\gamma, \varphi, \mathbf{x}) =$

$$= \gamma + \frac{\pi + \gamma\varphi\chi}{\pi^2} (\mathbf{b}^T\mathbf{a})^2 + \frac{\gamma(\varphi - 1)}{\chi} (\mathbf{a}^T\mathbf{c})^2 - 2\frac{\gamma\varphi}{\pi} (\mathbf{a}^T\mathbf{b})(\mathbf{a}^T\mathbf{c}) \equiv \psi(\gamma, \varphi, \mathbf{a}) \tag{93}$$

Odtiaľ

$$\Phi(\gamma, \varphi) = \frac{\max\limits_{\| \mathbf{a} \|=1} \psi(\gamma, \varphi, \mathbf{x})}{\min\limits_{\| \mathbf{a} \|=1} \psi(\gamma, \varphi, \mathbf{x})}. \tag{94}$$

Počítajme teraz viazané extrémy $\psi(\gamma, \varphi, \mathbf{a})$. Zostrojíme Lagrangeovu funkciu

$$L(\mathbf{a}, \alpha) = \psi(\gamma, \varphi, \mathbf{a}) + \alpha(\mathbf{a}^T\mathbf{a} - 1).$$

Nutná podmienka extrému je

$$\nabla_a \psi(\gamma, \varphi, \mathbf{a}) + 2\alpha\mathbf{a} = 0 . \tag{95}$$

Teda

$$\frac{\pi + \gamma\varphi\chi}{\pi^2} (\mathbf{b}^T\mathbf{a})\mathbf{b} + \frac{\gamma(\varphi - 1)}{\chi} (\mathbf{a}^T\mathbf{c})\mathbf{c} - \frac{\gamma\varphi}{\pi} (\mathbf{a}^T\mathbf{b})\mathbf{c} - \frac{\gamma\varphi}{\pi} (\mathbf{a}^T\mathbf{c})\mathbf{b} + \alpha\mathbf{a} = 0 \tag{96}$$

Prenásobením tejto rovnice postupne $\mathbf{b}^T$, $\mathbf{c}^T$, $\mathbf{a}^T$ a využitím (92.d) dostávame rovnice

$$\left(\frac{(\pi + \gamma\varphi\chi)\beta}{\pi^2} - \gamma\varphi\right)(\mathbf{b}^T\mathbf{a}) + \left(\frac{\gamma\pi(\varphi - 1)}{\chi} - \frac{\gamma\varphi\beta}{\pi}\right)(\mathbf{a}^T\mathbf{c}) + \alpha(\mathbf{a}^T\mathbf{b}) = 0, \tag{97}$$

$$(\mathbf{a}^T\mathbf{b}) - \gamma(\mathbf{a}^T\mathbf{c}) + \alpha(\mathbf{a}^T\mathbf{c}) = 0, \tag{98}$$

$$\frac{\pi + \gamma\varphi\chi}{\pi^2} (\mathbf{b}^T\mathbf{a})^2 + \frac{\gamma(\varphi - 1)}{\chi} (\mathbf{a}^T\mathbf{c})^2 - 2\frac{\gamma\varphi}{\pi} (\mathbf{a}^T\mathbf{b})(\mathbf{c}^T\mathbf{a}) + \alpha = 0. \tag{99}$$

Rovnice (97) – (99) sú taktiež nutnými podmienkami pre extrém $\psi(\gamma, \varphi, \mathbf{a})$. Substitúciou (99) do (93) dostaneme pre stacionárny bod $\mathbf{a}_0$ a zodpovedajúci Lagrangeov multiplkátor α_0

$$\psi(\gamma, \varphi, \mathbf{a}_0) = \gamma - \alpha_0. \tag{100}$$

Vidíme, že nám pre nájdenie extrémov stačí vyriešiť (97) – (99) iba pre α.

I. Ak $\mathbf{a}^T\mathbf{c} = 0$, tak z (98) aj $\mathbf{a}^T\mathbf{b} = 0$ a z (99) aj $\alpha = 0$. (Prvé riešenie pre α.)

II. Ak $\mathbf{a}^T\mathbf{c} \neq 0$, tak definujme $\sigma = \dfrac{\mathbf{a}^T\mathbf{b}}{\mathbf{a}^T\mathbf{c}}$.

Potom z (98)
$$\alpha = \gamma - \sigma \tag{101}$$

Predelením rovnice (97) skalárom $\mathbf{a}^T\mathbf{c}$ a využitím (101) dostaneme

$$\sigma^2 - \frac{\pi\beta + \gamma\varphi(\beta\chi - \pi^2) + \gamma\pi^2}{\pi^2}\sigma + \frac{\gamma\pi^2 + \gamma\varphi(\beta\chi - \pi^2)}{\chi\pi} = 0. \tag{102}$$

Použitím (84), (85) môžeme (102) písať v tvare

$$\sigma^2 - 2\rho\sigma + \mu = 0. \tag{103}$$

Riešeniami tejto kvadratickej funkcie sú

$$\sigma_{1,2} = \rho \pm \sqrt{\rho^2 - \mu}\ . \tag{104}$$

Ukážeme, že tieto riešenia sú reálne, teda $\rho^2 - \mu \geq 0$. Táto nerovnosť je určite splnená pre $\mu \leq 0$. Z Cauchyho nerovnosti máme $\beta\chi \geq \pi^2$, teda pre $\mu > 0$ platí

$$\rho^2 - \mu = \left(\frac{\beta + \mu\chi}{2\pi}\right)^2 - \mu = \left(\frac{\beta - \mu\chi}{2\pi}\right)^2 + \mu\left(\frac{\beta\chi}{\pi^2} - 1\right) \geq 0.$$

Vypočítali sme dva reálne korene σ_1 a σ_2. Ak dosadíme tieto hodnoty do (101), tak dostávame ďalšie dve hodnoty α_0, ktoré spĺňajú nutné podmienky extrému (97) – (99).

Z Weierstrassovej vety vieme, že $\psi(\gamma, \varphi, \mathbf{a})$ nadobúda svoje minimum aj maximum na množine $\|\mathbf{a}\| = 1$. My sme dostali tri hodnoty $\psi(\gamma, \varphi, \mathbf{a}_0) \in \{\gamma, \sigma_1, \sigma_2\}$ zodpovedajúce trom hodnotám $\alpha_0 \in \{0, \gamma - \sigma_1, \gamma - \sigma_2\}$. Vieme, že $\mathbf{H}_+$ aj $\mathbf{H}$ sú kladne definitné, teda zo vzťahov (87) a (93) aj $\psi(\gamma, \varphi, \mathbf{a}) > 0$. Potom zo vzťahov (100), (101) vyplýva, že $\sigma > 0$ a následne zo (104) vyplýva, že aj $\rho > 0$.

Teda pre extrémy $\psi(\gamma, \varphi, \mathbf{a})$ platí

$$\max_{\|\mathbf{a}\|=1} \psi(\gamma, \varphi, \mathbf{a}) = \max[\rho + \sqrt{\rho^2 - \mu}, \gamma], \tag{105.a}$$

$$\min_{\|\mathbf{a}\|=1} \psi(\gamma, \varphi, \mathbf{a}) = \min[\rho - \sqrt{\rho^2 - \mu}, \gamma]. \tag{105.b}$$

Zo vzťahov (90), (94), (105), dostávame (86).

Ak matica $\mathbf{H} = \mathbf{I}$, tak vo vzťahu (90) nastáva rovnosť, a teda aj v (86) bude rovnosť.

Ak $\mathbf{H}\mathbf{y} = \mathbf{p}$, tak $\pi = \chi = \beta$. Z toho vyplýva, že $\gamma = 1$ a aj $\mu = 1$ a $\rho = 1$. Dosadením do (83) dostávame $\mathbf{H}_+ = \mathbf{H}$, teda $K(\mathbf{H}_+) = K(\mathbf{H})$.

■

Z Vety 3.2 vieme, že hodnoty parametrov $\gamma > 0$, $\varphi \geq 0$ sú postačujúcimi podmienkami pre generovanie postupnosti kladne definitných matíc $\mathbf{H}_k$ z kladne definitnej matice $\mathbf{H}_0$. Nasledujúca veta pojednáva o nutných a postačujúcich podmienkach kladnej definitnosti matíc $\mathbf{H}_k$.(Je zaradená v tejto časti, lebo je založená na dôkaze Vety 3.16.)

Veta 3.17.

Nech $\mathbf{H} > 0$ a matica $\mathbf{H}_+$ je definovaná vzťahom (83) . Potom je $\mathbf{H}_+ > 0$ vtedy a len vtedy, ak $\pi > 0, \gamma > 0$ a

$$\varphi\,(\,\beta\chi \ - \ \pi^2) \ > \ -\pi^2. \tag{106}$$

Dôkaz: Použijeme označenie z Vety 3.15 a jej dôkazu.

Zo vzťahu (87) vyplýva, že $\mathbf{H}_+ > 0$ vtedy a len vtedy, ak $\eta(\gamma, \varphi, \mathbf{x}) > 0$ pre $\forall\ \mathbf{x} \in R^n$, respektíve $\psi(\gamma, \varphi, \mathbf{a}) > 0$ pre $\forall\ \mathbf{a} \in R^n$ také, že $\|\ \mathbf{a}\ \| = 1$. Zo vzťahu (105.b) toto platí vtedy a len vtedy, ak $\gamma > 0$, $\rho > 0$ aj $\mu > 0$ (ρ, μ sú definované vzťahmi (85) a (84)) . Matica $\mathbf{H} > 0$, teda aj $\beta > 0$ a $\chi > 0$. Z toho máme, že ak $\mu > 0$, tak $\rho > 0$ vtedy a len vtedy, ak $\pi > 0$. Naopak ak $\pi > 0$, tak zo vzťahu (84) $\mu > 0$ aj $\rho > 0$ vtedy a len vtedy, ak je splnená nerovnosť (106).

Poznámka: Pre algoritmus 3 platí, že $\gamma > 0$ a podľa Lemy 3.1 aj $\pi > 0$. Teda pre tento algoritmus je nutnou aj postačujúcou podmienkou kladnej definitnosti matice $\mathbf{H}_+$ nerovnosť (106). ■

Tvrdenie z Vety 3.16 spresňuje nasledujúca veta.

Veta 3.18.

Nech $\mathbf{H} > 0$ a matica $\mathbf{H}_+$ je definovaná vzťahom (83). Nech $\gamma \in \left[\frac{\pi}{\chi}, \frac{\beta}{\pi}\right]$, $\varphi\,(\,\beta\chi \ - \ \pi^2) \ > \ -\pi^2$ a $\mathbf{p}$, $\mathbf{y}$ sú také vektory z R^n, že $\mathbf{p}^T\mathbf{y} = \pi > 0$. Nech ρ, μ sú definované vzťahmi (85) a (84).

Položme $$\varepsilon = \frac{\rho}{\sqrt{\mu}}. \tag{107}$$

Potom platí $$K(\mathbf{H}_+) \leq K(\mathbf{H})\ (\varepsilon + \sqrt{\varepsilon^2 - 1}\,)^2. \tag{108}$$

Dôkaz: Z Vety 3.17. vieme, že $\mathbf{H}_+ > 0$ a z Cauchyho nerovnosti máme $\beta\chi \geq \pi^2$. Pomocou vzťahov (84) a (85) dostávame

$$\rho + \sqrt{\rho^2 - \mu} = \frac{1}{2}\left\{\frac{\beta + \mu\chi}{\pi} + \left[\left(\frac{\beta - \mu\chi}{\pi}\right)^2 + 4\mu\left(\frac{\beta\chi}{\pi} - 1\right)\right]^{1/2}\right\} \geq$$

$$\geq \frac{1}{2}\left\{\frac{\beta + \mu\chi}{\pi} + \left|\frac{\beta - \mu\chi}{\pi}\right|\right\} \geq \frac{\beta}{\pi} \geq \gamma . \tag{109}$$

$$\rho - \sqrt{\rho^2 - \mu} = \rho - \left[\rho^2 - \frac{2\pi\rho - \beta}{\chi}\right]^{1/2} = \rho - \left[\left(\rho - \frac{\pi}{\chi}\right)^2 + \frac{(\beta\chi - \pi^2)}{\chi^2}\right]^{1/2} \leq$$

$$\leq \rho - \left|\rho - \frac{\pi}{\chi}\right| \leq \frac{\pi}{\chi} \leq \gamma . \tag{110}$$

Z Vety 3.16 a vzťahov (109), (110) vyplýva

$$K(\mathbf{H}_+) \leq K(\mathbf{H}) \frac{\rho + \sqrt{\rho^2 - \mu}}{\rho - \sqrt{\rho^2 - \mu}} . \tag{111}$$

Rozšírením zlomku na pravej strane výrazom $\rho + \sqrt{\rho^2 - \mu}$ a použitím (107) dostávame (108). ■

Našim cieľom je zvoliť hodnoty parametrov γ, φ tak, aby $K(\mathbf{H}_+)$ bolo čo najmenšie. Keďže nepoznáme funkčnú závislosť čísla podmienenosti $K(\mathbf{H}_+)$ od parametrov γ, φ, tak nemôžeme priamo minimalizovať číslo $K(\mathbf{H}_+)$. Preto sa budeme snažiť minimalizovať aspoň horné ohraničenie $K(\mathbf{H}_+)$, ktoré máme určené vzťahom (108). Tento vzťah môžeme formálne zapísať nasledovne

$$K(\mathbf{H}_+) \leq K(\mathbf{H})\Phi(\gamma, \varphi) , \tag{112}$$

kde
$$\Phi(\gamma, \varphi) = (\varepsilon + \sqrt{\varepsilon^2 - 1})^2 \tag{113}$$

a ε je definovane vzťahom (107).

Definícia 3.2. Nech $\mathbf{H} > 0$ a $\mathbf{p}$, $\mathbf{y}$ sú také vektory z R^n, že $\mathbf{p}^T\mathbf{y} > 0$. Hovoríme, že matica $\mathbf{H}_+ = \boldsymbol{H}(\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{y}, \gamma, \varphi)$ je *optimálne podmienená*, ak hodnoty γ, φ minimalizujú $\Phi(\gamma, \varphi)$ definované vzťahom (113).

Veta 3.19.

Nech sú splnené predpoklady Vety 3.18. Potom $\mathbf{H}_+$ je optimálne podmienená vtedy a len vtedy, ak

$$\beta.\chi = \pi^2$$

alebo
$$\varphi = \frac{\pi(\beta - \gamma\pi)}{\gamma(\beta\chi - \pi^2)} \equiv \varphi^*. \tag{114}$$

Ak $\mathbf{H}_+$ je optimálne podmienená, tak platí

$$K(\mathbf{H}_+) \le K(\mathbf{H})\,(\omega + \sqrt{\omega^2 - 1})^2, \tag{115}$$

kde
$$\omega = \sqrt{\frac{\beta\chi}{\pi^2}}. \tag{116}$$

<u>Dôkaz:</u> I. Nech $\beta.\chi = \pi^2$.

Z Cauchyho nerovnosti vieme, že $\beta\chi = \pi^2$ vtedy a len vtedy, ak $\mathbf{p} = \alpha\mathbf{Hy}$, kde $\alpha \in R$. Potom dostávame: $\beta = \alpha\pi$, $\chi = \pi/\alpha$, $\gamma = \alpha$ a $\Phi(\gamma, \varphi) = 1$ pre $\forall\ \gamma, \varphi$. Tým sme dokázali, že $\mathbf{H}_+$ je optimálne podmienená. (Nezáleží na hodnotách parametrov γ, φ.)

Zo vzťahu (116) máme $\omega = 1$, teda je potrebné ešte dokázať, že $K(\mathbf{H}_+) \le K(\mathbf{H})$. Dosadením do vzťahu (83) príslušné hodnoty β, χ, γ dostávame $\mathbf{H}_+ = \alpha\mathbf{H}$. Z toho vyplýva, že $K(\mathbf{H}_+) = K(\mathbf{H})$.

III. Nech $\beta.\chi > \pi^2$.

Ak hodnota γ je pevne zvolená, tak pre stacionárny bod $\Phi(\gamma, \varphi) = \Phi(\varphi)$ platí

$$\frac{d\Phi}{d\varphi} = \frac{d\Phi}{d\varepsilon}\cdot\frac{d\varepsilon}{d\mu}\cdot\frac{d\mu}{d\varphi}. \tag{117}$$

Zo vzťahu (113)
$$\frac{d\Phi}{d\varepsilon} = 2\Phi^{1/2}\left(1 + \frac{\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon^2 - 1}}\right) > 0. \tag{118}$$

Zo vzťahov (85) a (107)
$$\varepsilon = \frac{\rho}{\sqrt{\mu}} = \frac{\beta + \mu\chi}{2\pi\sqrt{\mu}} \tag{119}$$

a odtiaľ
$$\frac{d\varepsilon}{d\mu} = \frac{\mu\chi - \beta}{4\pi\mu^{3/2}}. \tag{120}$$

Zo vzťahu (84)
$$\frac{d\mu}{d\varphi} = \gamma\,\frac{\beta\chi - \pi^2}{\pi\chi} > 0. \tag{121}$$

Pre stacionárny bod musí platiť $\dfrac{d\Phi}{d\varphi} = 0$, preto

$$\frac{d\varepsilon}{d\mu} = 0. \tag{122}$$

Zo vzťahu (120) dostávame $\mu = \beta/\chi$. Substitúciou do (84) dostaneme vzťah (114).

Pre overenie, či ide naozaj o minimum počítajme druhú deriváciu v stacionárnom bode

$$\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} = \frac{d^2\Phi}{d\varepsilon^2}\cdot\left(\frac{d\varepsilon}{d\mu}\right)^2\left(\frac{d\mu}{d\varphi}\right)^2 + \frac{d\Phi}{d\varepsilon}\left[\frac{d^2\varepsilon}{d\mu^2}\left(\frac{d\mu}{d\varphi}\right)^2 + \frac{d^2\mu}{d\varphi^2}\,\frac{d\varepsilon}{d\mu}\right]. \tag{123}$$

Podľa (122)

$$\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} = \frac{d\Phi}{d\varepsilon}\,\frac{d^2\varepsilon}{d\mu^2}\left(\frac{d\mu}{d\varphi}\right)^2 \tag{124}$$

a

$$\frac{d^2\varepsilon}{d\mu^2} = \frac{d}{d\mu}\left(\frac{\mu\chi-\beta}{4\pi\,\mu^{3/2}}\right) = \frac{1}{8\pi}\left(\frac{3\beta-\mu\chi}{\mu^{5/2}}\right). \tag{125}$$

Dosadením $\mu = \beta/\chi$ do (125) dostávame

$$\frac{d^2\varepsilon}{d\mu^2} > 0\,. \tag{126}$$

Zo vzťahov (118), (124) a (126) máme $\dfrac{d^2\Phi}{d\varphi^2} > 0$, teda (114) je bodom minima.

Substitúciou $\mu = \beta/\chi$ do (119) dostaneme $\varepsilon = \omega$ a zo vzťahu (113)

$$\Phi(\gamma, \varphi^*) = (\omega + \sqrt{\omega^2 - 1}\,)^2 = \min_{\gamma,\varphi} \Phi(\gamma, \varphi)\,. \tag{127}$$

Vzťah (115) dostaneme zo vzťahov (112) a (127).

■

Dôsledok Vety 3.19.

Nech φ^* je definované podľa vzťahu (114). Potom platí

$$0 \le \varphi^* \le 1 \quad\Leftrightarrow\quad \pi/\chi \le \gamma \le \beta/\pi$$

a

$$\varphi^* = 0 \quad\Leftrightarrow\quad \gamma = \beta/\pi,$$

$$\varphi^* = 1 \quad\Leftrightarrow\quad \gamma = \pi/\chi.$$

Pritom parameter γ nadobúda všetky hodnoty z intervalu $[\pi/\chi, \beta/\pi]$ a parameter φ^* nadobúda všetky hodnoty z intervalu [0, 1].

<u>Dôkaz:</u> Priamo zo vzťahu (114) a Cauchyho nerovnosti. ■

V zmysle vzťahov (18), (19) z časti 3.2 sme Orenovu triedu formúl označili ako $\mathbf{H}_+ = \boldsymbol{H}(\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{y}, \gamma, \varphi)$. Podľa Vety 3.19 sú formuly z tejto triedy optimálne podmienené, ak pre pevne zvolenú hodnotu parametra $\gamma \in [\pi/\chi, \beta/\pi]$ je parameter φ taký, že spĺňa rovnosť (114). Hodnota parametra φ je jednoznačne určená hodnotou parametra γ. Tým dostávame jednoparametrickú triedu optimálne podmienených Orenových formúl, ktorú formálne označíme

$$\mathbf{H}_+ = \boldsymbol{H}^*(\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{y}, \gamma) = \boldsymbol{H}(\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{y}, \gamma, \varphi^*), \tag{128}$$

kde $\gamma \in [\pi/\chi, \beta/\pi]$ a φ^* je definované vzťahom (114).

Substitúciou parametra φ^* definovaného vzťahom (114) do vzťahu (83) dostávame

$$\mathbf{H}_+ = \gamma\mathbf{H} + \frac{1}{(\beta\chi - \pi^2)}\left[\frac{2\beta\chi - \gamma\pi\chi - \pi^2}{\pi}\mathbf{p}\mathbf{p}^T + \frac{\beta(\pi - \gamma\chi)}{\chi}\mathbf{H}\mathbf{y}\mathbf{y}^T\mathbf{H} - \right.$$
$$\left. - (\beta - \chi\pi)(\mathbf{p}\mathbf{y}^T\mathbf{H} + \mathbf{H}\mathbf{y}\mathbf{p}^T)\right], \tag{129}$$

kde $\gamma \in [\pi/\chi, \beta/\pi]$.

Podľa dôsledku Vety 3.19 pre $\gamma \in [\pi/\chi, \beta/\pi]$ je φ^* z intervalu [0, 1]. Z toho vyplýva, že trieda formúl $\boldsymbol{H}^*(\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{y}, \gamma)$ je podmnožinou triedy formúl $\boldsymbol{H}(\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{y}, \gamma, \varphi)$, kde $\gamma \in [\pi/\chi, \beta/\pi]$ a φ je ľubovolná hodnota z [0, 1], teda má všetky vlastnosti tejto triedy formúl. To znamená, že generuje matice $\mathbf{H}_+$ invariantné na škálovanie účelovej funkcie pričom $K(\mathbf{R}_+) \le K(\mathbf{R})$. Navyše sú tieto matice $\mathbf{H}_+$ optimálne podmienené.

V nasledujúcej vete ukážeme, že v prípade kvadratickej funkcie možno číslo podmienenosti matíc $\mathbf{H}_k$ (k = 1, 2, ... , n) ohraničiť spoločnou konštantou.

Veta 3.20.

Nech f je kvadratická funkcia (2.8) s Hessovou maticou $\mathbf{G} > 0$. Nech postupnosť matíc $\{\mathbf{H}_k\}$ je generovaná algoritmom 3. Potom pre číslo podmienenosti matíc $\mathbf{H}_k$ platí

$$K(\mathbf{H}_k) \le K(\mathbf{R}_0).K(\mathbf{G}), \tag{130}$$

kde $\mathbf{R}_0 = \mathbf{G}^{1/2}\mathbf{H}_0\mathbf{G}^{1/2}$.

Ak matice $\mathbf{H}_k$ sú navyše optimálne podmienené, tak

$$K(\mathbf{H}_{k+1}) \le K(\mathbf{H}_k).K(\mathbf{R}_0). \tag{131}$$

Dôkaz: Vieme, že pre matice $\mathbf{R}_k = \mathbf{G}^{1/2}\mathbf{H}_k\mathbf{G}^{1/2}$, kde matice $\mathbf{H}_k$ sú generované algoritmom 3 platí

$$K(\mathbf{R}_{k+1}) \le K(\mathbf{R}_k) \le K(\mathbf{R}_0). \tag{132}$$

Z definície $\mathbf{R}_k$ máme $\mathbf{H}_k = \mathbf{G}^{-1/2}\mathbf{R}_k\mathbf{G}^{-1/2}$.

Teda $K(\mathbf{H}_k) \le K(\mathbf{R}_k).K(\mathbf{G}^{-1/2}).K(\mathbf{G}^{-1/2}) = K(\mathbf{R}_k).K(\mathbf{G}) \le K(\mathbf{R}_0).\, K(\mathbf{G})$.

Tým je dokázaný vzťah (130).

Ak sú matice $\mathbf{H}_k$ optimálne podmienené, tak podľa Vety 3.19

$$K(\mathbf{H}_{k+1}) \le K(\mathbf{H}_k)\,(\omega + \sqrt{\omega^2 - 1})^2, \tag{133}$$

kde
$$\omega^2 = \frac{\beta\chi}{\pi^2} = \frac{(\mathbf{p}^T\mathbf{H}^{-1}\mathbf{p})(\mathbf{y}^T\mathbf{H}\mathbf{y})}{(\mathbf{p}^T\mathbf{y})^2}. \tag{134}$$

Pre kvadratickú funkciu platí $\mathbf{y} = \mathbf{G}\mathbf{p}$, a teda $\mathbf{y}^T\mathbf{H}\mathbf{y} = \mathbf{p}^T\mathbf{G}\mathbf{H}\mathbf{G}\mathbf{p}$.

Označme $\mathbf{z} = \mathbf{G}^{1/2}\mathbf{p}$ potom

$$\omega^2 = \frac{(\mathbf{z}^T\mathbf{R}_k^{-1}\mathbf{z})(\mathbf{z}^T\mathbf{R}_k\mathbf{z})}{\mathbf{z}^T\mathbf{z}}.$$

Z Kantorovičovej nerovnosti (viď [1]) dostávame

$$\omega^2 \le \frac{(1 + K(\mathbf{R}_k))^2}{4K(\mathbf{R}_k)}. \tag{135}$$

Substitúciou (135) do (133) a podľa (132) máme

$$K(\mathbf{H}_{k+1}) \le K(\mathbf{H}_k).K(\mathbf{R}_k) \le K(\mathbf{H}_k).K(\mathbf{R}_0).$$ ■

Predchádzajúca veta hovorí o tom, že ak na minimalizáciu kvadratickej funkcie s $\mathbf{G} > 0$ použijeme vzťah (129) a štartovaciu maticu $\mathbf{H}_0 = \mathbf{I}$, tak číslo podmienenosti $K(\mathbf{H})$ nikdy nepresiahne $[K(\mathbf{G})]^2$. Pritom miera zhoršenia v jednom kroku nie je väčšia ako $K(\mathbf{G})$.

Význam tejto vlastnosti môžeme ukázať na nasledujúcom príklade.

Nech Hessova matica kvadratickej funkcie je $\mathbf{G} = \alpha\mathbf{I}$ a $\mathbf{H}_0 = \mathbf{I}$. Pre algoritmus 3 platí vzťah (130), teda $K(\mathbf{H}_k)$ bude rovné jednej pre všetky k. Ak by sme na minimalizáciu použili formulu z Broydenovej triedy, ľahko môžeme overiť, že $\mathbf{H}_1$ bude mať n-1 vlastných čísel rovných jednej a jedno vlastné číslo rovné α. Číslo podmienenosti $K(\mathbf{H}_1)$ bude rovné α až do n-tej iterácie. Ak by rozmer úlohy bol veľký a $\alpha \gg 1$, tak takéto správanie algoritmu je nežiadúce z hľadiska numerickej stability.

3.7. Vlastnosť komplementarity Orenovej triedy formúl

Kvázinewtonovské formuly sú odvodené na základe kvázinewtonovskej podmienky $\mathbf{y} = \mathbf{G}\,\mathbf{p}$
respektíve $\mathbf{p} = \mathbf{G}^{-1}\mathbf{y}$,
ktorá sa premietne do požiadavky na $\mathbf{H}_{k+1}$ (k+1 aproximácia inverznej Hessovej matice) nasledovne

$$\mathbf{H}_{+}\mathbf{y} = \mathbf{p}. \tag{136}$$

Nech matice $\mathbf{B}_k$ aproximujú Hessovu maticu $\mathbf{G}$ ($\mathbf{B}_k \approx \mathbf{G}$). V zmysle kvázinewtonovskej podmienky pre k+1 aproximáciu musí platiť

$$\mathbf{B}_{+}\mathbf{p} = \mathbf{y}. \tag{137}$$

Orenovu formulu sme pomocou vzťahov (18), (19) označili ako

$$\mathbf{H}_{+} = \boldsymbol{H}(\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{y}, \gamma, \varphi), \tag{138}$$

pre zafixované hodnoty parametrov γ, φ.
Táto formula spĺňa kvázinewtonovskú podmienku v tvare (136).

Definujme

$$\mathbf{B} \equiv \mathbf{H}^{-1}$$

a

$$\mathbf{B}_{+} = \boldsymbol{H}(\mathbf{B}, \mathbf{y}, \mathbf{p}, \gamma^c, \varphi^c), \tag{139}$$

kde γ^c, φ^c sú fixné hodnoty parametrov.

Matica $\mathbf{B}_{+}$ je symetrická a ľahko sa presvedčíme, že spĺňa kvázinewtonovskú podmienku (137), teda (139) je tiež kvázinewtonovská formula.

Definícia 3.3. Hovoríme, že formula $\mathbf{B}_{+} = \boldsymbol{H}(\mathbf{B}, \mathbf{y}, \mathbf{p}, \gamma^c, \varphi^c)$ je *komplementárna* k formule $\mathbf{H}_{+} = \boldsymbol{H}(\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{y}, \gamma, \varphi)$, ak platí

$$\mathbf{B}_{+} = \mathbf{H}_{+}^{-1}.$$

(Treba upozorniť, že poradie parametrov vo formulách je podstatné.)

Vidíme, že pomocou dvojice komplementárnych formúl môžeme generovať postupnosti matíc $\{\mathbf{B}_k\}$ a $\{\mathbf{H}_k\}$, pre ktoré platí $\mathbf{B}_k = \mathbf{H}_k^{-1}$.

V časti 3.2 sme sa už stretli s celou triedou komplementárnych formúl, aj keď sme si to vtedy tak nešpecifikovali. Z Vety 3.5 časti c) vieme, že pre $\gamma \neq 0$ platí

$$\boldsymbol{H}(\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{y}, \gamma, 1) = [\boldsymbol{H}(\mathbf{H}^{-1}, \mathbf{y}, \mathbf{p}, 1/\gamma, 0)]^{-1}. \tag{140}$$

Teda podľa definície 3.3 je trieda formúl $\mathbf{B}_+ = \boldsymbol{H}(\mathbf{H}^{-1}, \mathbf{y}, \mathbf{p}, 1/\gamma, 0)$ komplementárna k triede formúl $\mathbf{H}_+ = \boldsymbol{H}(\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{y}, \gamma, 1)$.

(Pre fixnú hodnotu $\varphi = 1$ a pre ľubovolné fixné $\gamma \neq 0$ z formuly $\mathbf{H}_+ = \boldsymbol{H}(\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{y}, \gamma, \varphi)$ sme našli komplementárnu formulu $\mathbf{B}_+ = \boldsymbol{H}(\mathbf{B}, \mathbf{y}, \mathbf{p}, \gamma^c, \varphi^c)$, kde $\varphi^c = 0$ a $\gamma^c = 1/\gamma$.)

Teraz sa pokúsime rozšíriť platnosť vzťahu (140) tým, že pre ľubovolné $\varphi \in R$ nájdeme φ^c z komplementárnej triedy.

Veta 3.21.

Nech $\mathbf{H}$ je regulárna matica typu nxn a $\mathbf{p}, \mathbf{y}$ sú nenulové vektory z R^n.

Nech $\gamma, \varphi \in R$ sú také, že $\gamma \neq 0$ a $\varphi \neq \dfrac{\pi^2}{\beta\chi - \pi^2}$. Potom pre

$$\varphi^c = \frac{\pi^2(1-\varphi)}{\pi^2(1-\varphi) + \varphi\beta\chi} \tag{141}$$

platí: $\boldsymbol{H}(\mathbf{H}^{-1}, \mathbf{y}, \mathbf{p}, 1/\gamma, \varphi^c)$ je komplementárna k $\boldsymbol{H}(\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{y}, \gamma, \varphi)$, teda

$$\boldsymbol{H}(\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{y}, \gamma, \varphi) = [\boldsymbol{H}(\mathbf{H}^{-1}, \mathbf{y}, \mathbf{p}, 1/\gamma, \varphi^c)]^{-1}. \tag{142}$$

Dôkaz: Najskôr transformujme pravú stranu v (83) tak, že

$$\mathbf{H} \to \mathbf{H}^{-1}, \ \mathbf{p} \to \mathbf{y}, \ \mathbf{y} \to \mathbf{p}, \gamma \to 1/\gamma, \ \varphi \to \varphi^c.$$

Potom vynásobením tohto výrazu pôvodnou pravou stranou v (83) sa po úpravách presvedčíme, že dostaneme jednotkovú maticu.

■

Dôsledok Vety 3.21.

Nech sú splnené predpoklady Vety 3.21 a φ^c je definované vzťahom (141). Potom formula $\boldsymbol{H}(1/\gamma.\mathbf{H}^{-1}, \mathbf{y}, \mathbf{p}, 1, \varphi^c)$ je komplementárna k formule $\boldsymbol{H}(\gamma\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{y}, 1, \varphi)$ aj k formule $\boldsymbol{H}(\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{y}, \gamma, \varphi)$.

Dôkaz: Podľa vzťahu (21) Vety 3.5 platí

$$\boldsymbol{H}(\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{y}, \gamma, \varphi) = \boldsymbol{H}(\gamma\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{y}, 1, \varphi).$$

Podľa Vety 3.21 komplementárnou formulou k formule $\boldsymbol{H}(\gamma\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{y}, 1, \varphi)$ je formula $\boldsymbol{H}((\gamma\mathbf{H})^{-1}, \mathbf{y}, \mathbf{p}, 1, \varphi^c)$, ktorá je totožná s formulou $\boldsymbol{H}(1/\gamma.\mathbf{H}^{-1}, \mathbf{y}, \mathbf{p}, 1, \varphi^c)$. ■

Z dôsledku Vety 3.21 vyplýva, že pri skúmaní komplementarity Orenovej triedy formúl je postačujúce sa zamerať na Broydenovu triedu a vzťahy platné pre Orenovu triedu dostaneme zo vzťahov, ktoré platia pre Broydenovu triedu formálnou substitúciou matice **H** maticou γ**H**.

Poznámka: Iný spôsob dôkazu Vety 3.21 spočíva priamo v odvodení vzťahu (141). V krátkosti uvedieme hlavné kroky tohto odvodenia. (V zmysle predchádzajúcich úvah bude toto odvodenie pre Broydenovu triedu.)

$\boldsymbol{H}(\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{y}, 1, \varphi) =$

$$= \mathbf{H} + \frac{\mathbf{p}^T\mathbf{y} + \varphi\mathbf{y}^T\mathbf{H}\mathbf{y}}{(\mathbf{p}^T\mathbf{y})^2}\mathbf{p}\mathbf{p}^T + \frac{(\varphi - 1)}{\mathbf{y}^T\mathbf{H}\mathbf{y}}\mathbf{H}\mathbf{y}\mathbf{y}^T\mathbf{H} - \frac{\varphi}{\mathbf{p}^T\mathbf{y}}(\mathbf{p}\mathbf{y}^T\mathbf{H} + \mathbf{H}\mathbf{y}\mathbf{p}^T) =$$

$$= \mathbf{H} - \frac{1}{\mathbf{p}^T\mathbf{y}}\left\{[\mathbf{p},\ \mathbf{H}\mathbf{y}]\begin{bmatrix} -1 - \dfrac{\varphi\mathbf{y}^T\mathbf{H}\mathbf{y}}{\mathbf{p}^T\mathbf{y}} & \varphi \\ \varphi & -\dfrac{(\varphi - 1)\mathbf{p}^T\mathbf{y}}{\mathbf{y}^T\mathbf{H}\mathbf{y}} \end{bmatrix}\begin{bmatrix}\mathbf{p}^T \\ \mathbf{y}^T\mathbf{H}\end{bmatrix}\right\}$$

Využitím Woodburyho lemy (viď [1]) tento výraz zinvertujeme. Porovnaním koeficientov vo výraze, ktorý dostaneme s výrazom $\boldsymbol{H}(\mathbf{H}^{-1}, \mathbf{y}, \mathbf{p}, 1/\gamma, \varphi^c)$ dostaneme vzťah (141).

Poznámka: Zo vzťahu (141) je zrejmé, že ak $\varphi \in [0, 1]$, tak aj $\varphi^c \in [0, 1]$ a ak $\gamma \in [\pi/\chi, \beta/\pi]$, tak pre $\gamma^c = 1/\gamma$ z komplementárnej úlohy platí $\gamma^c \in [\pi/\beta, \chi/\pi]$.

Definícia 3.4. Hovoríme, že formula $\boldsymbol{H}(\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{y}, \gamma, \hat{\varphi})$ je *samokomplementárna*, ak

platí $\boldsymbol{H}(\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{y}, \gamma, \hat{\varphi}) = [\boldsymbol{H}(\mathbf{H}^{-1}, \mathbf{y}, \mathbf{p}, 1/\gamma, \varphi^c)]^{-1}$,

kde φ^c dostaneme z $\hat{\varphi}$ transformáciou

$$\mathbf{H} \to \mathbf{H}^{-1},\ \mathbf{p} \to \mathbf{y},\ \mathbf{y} \to \mathbf{p}. \tag{143}$$

(Ak je $\hat{\varphi}$ konštanta, tak $\varphi^c = \hat{\varphi}$.)

Poznámka: Podľa dôsledku Vety 3.21 bude formula $\boldsymbol{H}(\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{y}, \gamma, \hat{\varphi})$ samokomplementárna, ak $\boldsymbol{H}(\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{y}, 1, \hat{\varphi}) = [\boldsymbol{H}(\mathbf{H}^{-1}, \mathbf{y}, \mathbf{p}, 1, \varphi^c)]^{-1}$ a $\hat{\varphi}$, φ^c sú ako v definícii 3.4. To znamená, že komplementárna formula k samokomplementárnej formule má rovnaký tvar ako pôvodná formula s tým, že namiesto matice **H** je matica $\mathbf{H}^{-1}$ a vektory **p** a **y** sú navzájom vymenené.

Ak $\hat{\varphi}$ je konštantné a $\boldsymbol{H}$ (**H**, **p**, **y**, 1, $\hat{\varphi}$) je samokomplementárna, tak k nej komplementárna formula bude tvaru $\boldsymbol{H}(\mathbf{H}^{-1}, \mathbf{y}, \mathbf{p}, 1, \hat{\varphi})$

Veta 3.22.

Nech $\mathbf{H} > 0$ je matica typu nxn a vektory $\mathbf{p}, \mathbf{y} \in R^n$ také, že $\mathbf{p}^T\mathbf{y} > 0$.

Nech
$$\hat{\varphi} = \frac{1}{1+\omega}, \tag{144}$$

kde
$$\omega = \sqrt{\frac{\beta\chi}{\pi^2}}. \tag{145}$$

Potom
$$\boldsymbol{H}(\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{y}, \gamma, \hat{\varphi}) = [\boldsymbol{H}(\mathbf{H}^{-1}, \mathbf{y}, \mathbf{p}, 1/\gamma, \hat{\varphi})]^{-1}, \tag{146}$$

teda formula $\mathbf{H}_+ = \boldsymbol{H}(\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{y}, \gamma, \hat{\varphi})$ je samokomplementárna.

Pričom ak
$$\gamma^* = \sqrt{\frac{\beta}{\chi}}, \tag{147}$$

tak $\boldsymbol{H}(\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{y}, \gamma, \hat{\varphi})$ je optimálne podmienená.

<u>Dôkaz:</u> Ak dosadíme vzťahy (144) a (145) do vzťahu (141), tak dostávame

$$\varphi^c = \hat{\varphi}\ .$$

Teda podľa Vety 3.21 dostávame vzťah (146).

Keďže $\varphi^c = \hat{\varphi}$, tak podľa definície 3.4 je $\mathbf{H}_+ = \boldsymbol{H}(\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{y}, \gamma, \hat{\varphi})$ samokomplementárna.

Ak pre γ^* platí (147), tak platí rovnosť (114) a podľa Vety 3.19 je $\boldsymbol{H}(\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{y}, \gamma, \hat{\varphi})$ optimálne podmienená.

■

Veta 3.23.

Nech $\boldsymbol{H}(\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{y}, \gamma, \varphi^*)$ je optimálne podmienená (φ^* je definované vzťahom (114). Potom $\boldsymbol{H}(\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{y}, \gamma, \varphi^*)$ je samokomplementárna, teda platí

$$\boldsymbol{H}(\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{y}, \gamma, \varphi^*) = [\boldsymbol{H}(\mathbf{H}^{-1}, \mathbf{y}, \mathbf{p}, 1/\gamma, \varphi^c)]^{-1}, \tag{148}$$

kde φ^c dostaneme z φ^* transformáciou (143).

<u>Dôkaz:</u> Ak do vzťahu (141) dosadíme $\varphi = \varphi^*$ definované podľa (114), tak dostávame

$$\varphi^c = \frac{\gamma\pi\left(\chi - \dfrac{\pi}{\gamma}\right)}{\beta\chi - \pi^2}\ . \tag{149.a}$$

Podľa Vety 3.21 platí

$$\boldsymbol{H}\,(\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{y}, \gamma, \varphi^*) \;=\; [\boldsymbol{H}\,(\mathbf{H}^{-1}, \mathbf{y}, \mathbf{p}, 1/\gamma, \varphi^c)]^{-1},$$

kde φ^c je definované vzťahom (149.a).

Ak použijeme transformáciu (143), tak $\beta \to \chi$ a $\chi \to \beta$. Touto transformáciou zo vzťahu (114) dostávame

$$\varphi^* \;\to\; \varphi^*_{\text{transf.}} \;=\; \frac{\gamma\,\pi\left(\chi - \dfrac{\pi}{\gamma}\right)}{\beta\,\chi - \pi^2} \;=\; \varphi^c. \tag{149.b}$$

Keďže φ^* transformované podľa (143) je rovné φ^c , tak podľa definície 3.4 $\boldsymbol{H}\,(\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{y}, \gamma, \varphi^*)$ je samokomplementárna. ■

Z Vety 3.21 vidíme, že formulu na generovanie $\mathbf{B}_+$ dostaneme z formuly pre $\mathbf{H}_+$ transformáciou $\mathbf{H} \to \mathbf{H}^{-1}$, $\mathbf{p} \to \mathbf{y}$, $\mathbf{y} \to \mathbf{p}$, $\gamma \to 1/\gamma$, $\varphi \to \varphi^c$ vo výraze $\boldsymbol{H}\,(\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{y}, \gamma, \varphi)$. Obidve tieto formuly majú rovnakú formu vyjadrenú zobrazením $\boldsymbol{H}(.)$. Z toho vyplýva, že formuly na generovanie matíc $\mathbf{B}_+$ majú vlastnosti tohto zobrazenia. Teda nutné a postačujúce podmienky získané pre generovanie optimálne podmienených matíc $\mathbf{H}_+$ môžeme rovnako použiť (po transformácii) ako podmienky pre generovanie optimálne podmienených matíc $\mathbf{B}_+$.

Trieda optimálne podmienených matíc $\mathbf{H}_+$ je $\boldsymbol{H}^*(\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{y}, \gamma, \varphi^*)$, kde φ^* je definované podľa (114) a $\gamma \in [\pi/\chi, \beta/\pi]$. Z toho vyplýva, že trieda optimálne podmienených matíc $\mathbf{B}_+$ je $\boldsymbol{H}^*(\mathbf{H}^{-1}, \mathbf{y}, \mathbf{p}, 1/\gamma, \varphi^*_{\text{transf}})$, kde $\varphi^*_{\text{transf.}}$ je definované podľa vzťahu (149.b) a $\gamma \in [\pi/\beta, \chi/\pi]$. Horná hranica pre číslo podmienenosti matice $\mathbf{B}_+$, kde $\mathbf{B}_+$ je z triedy formúl $\boldsymbol{H}^*(\mathbf{H}^{-1}, \mathbf{y}, \mathbf{p}, 1/\gamma, \varphi^*_{\text{transf}})$, je rovnaká ako vo Vete 3.18 pre maticu $\mathbf{H}_+$. Tento fakt potvrdzuje Veta 3.21, v ktorej sme dokázali, že pre ľubovolné γ je matica $\boldsymbol{H}^*(\mathbf{H}^{-1}, \mathbf{y}, \mathbf{p}, 1/\gamma, \varphi^*_{\text{transf}})$ inverzná k matici $\boldsymbol{H}^*(\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{y}, \gamma, \varphi^*)$.

Pre fixné γ je číslo podmienenosti matice $\boldsymbol{H}^*(\mathbf{H}^{-1}, \mathbf{y}, \mathbf{p}, 1/\gamma, \varphi^*_{\text{transf}})$ automaticky minimalizované minimalizovaním čísla podmienenosti matice $\boldsymbol{H}^*(\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{y}, \gamma, \varphi^*)$.

Špeciálnu formulu z triedy optimálne podmienených formúl dostaneme, ak v (129) za hodnotu γ zvolíme $\gamma^* = \left(\dfrac{\beta}{\chi}\right)^{1/2}$. Odtiaľ máme

$\boldsymbol{H}^*(\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{y},) =$

$$= \left(\frac{\beta}{\chi}\right)^{1/2} \mathbf{H} + \frac{1}{\pi(1+\omega)}\left[(1+2\omega)\mathbf{pp}^T - \frac{\beta}{\chi}\mathbf{Hyy}^T\mathbf{H} - \left(\frac{\beta}{\chi}\right)^{1/2}(\mathbf{py}^T\mathbf{H} + \mathbf{Hyp}^T)\right], \tag{150}$$

kde π, χ, β sú definované vzťahmi (82) , ω vzťahom (145) a $\gamma \in [\pi/\chi, \beta/\pi]$.

Špeciálnou vlastnosťou tejto formuly je to, že jej inverziu získame jednoducho substitúciou $\mathbf{H} \to \mathbf{H}^{-1}$, $\mathbf{p} \to \mathbf{y}$, $\mathbf{y} \to \mathbf{p}$. (π ani ω sa nezmenia a $\chi \to \beta$, $\beta \to \chi$).

3.8. Stratégie voľby parametrov

V predchádzajúcich častiach tejto kapitoly sme na základe vlastností kvadratickej funkcie odvodili podmienky, ktoré musia spĺňať parametre γ_k, φ_k, aby konvergencia metódy a jej numerická stabilita boli čo najlepšie. Dostali sme

$$\gamma_k \in [1/\lambda_n, 1/\lambda_1] \tag{151}$$

a

$$\varphi_k = \frac{\pi(\beta - \gamma\pi)}{\gamma(\beta\chi - \pi^2)}, \tag{152}$$

kde λ_1, λ_n sú najmenšie a najväčšie vlastné číslo matice $\mathbf{R}_k = \mathbf{G}^{1/2}\mathbf{H}_k\mathbf{G}^{1/2}$ a π, χ, β sú definované podľa (82).

Tieto podmienky však stále neurčujú spomínané parametre jednoznačne. V tejto časti navrhneme dve stratégie voľby hodnôt γ, φ a rozoberieme aj vlastnosti takto získaných formúl.

Pre zachovanie platnosti podmienok (151), (152) nie je nevyhnutné škálovanie algoritmu v každej iterácii. Ak sa chceme vyhnúť nepotrebnému škálovaniu a chceme aby výkyvy v hodnotách γ_k boli čo najmenšie, tak je vhodné voliť γ_k čo možno najbližšie k jednotke. V tom prípade dostaneme nasledovnú stratégiu (Stratégiu 1) pre k-tu iteráciu:

Stratégia 1

Ak $\dfrac{\beta}{\pi} < 1$,	tak	$\gamma = \dfrac{\beta}{\pi}$ a $\varphi = 0$.	
Ak $\dfrac{\pi}{\chi} > 1$,	tak	$\gamma = \dfrac{\pi}{\chi}$ a $\varphi = 1$.	
Ak $\dfrac{\pi}{\chi} \le 1 \le \dfrac{\beta}{\pi}$,	tak	$\gamma = 1$ a $\varphi = \dfrac{\pi(\beta - \pi)}{(\beta\chi - \pi^2)}$.	

Z časti 3.1 vieme, že v prípade kvadratickej funkcie bude mať matica $\mathbf{R}_k$ aspoň jedno vlastné číslo rovné jednej pre k > 0. Preto v tejto stratégii bude $\gamma_k = 1$ pre všetky k > 0. Potom podľa Vety 3.4 matica $\mathbf{H}_n$ je ekvivalentná inverznej Hessovej matici, teda

$$\mathbf{H}_n = \mathbf{G}^{-1}. \tag{153}$$

Táto stratégia v prípade kvadratickej funkcie je identická stratégii, kedy použijeme formulu z Broydenovej triedy na funkciu, ktorú na začiatku preškálujeme tak, aby jednotka bola v intervale medzi najväčším a najmenším vlastným číslom matice R_0.

Stratégia 1 generuje rôzne postupnosti parametrov $\{\gamma_k\}$, $\{\varphi_k\}$ pri použití formuly $\mathbf{H}_+ = \boldsymbol{H}(\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{y}, \gamma, \varphi)$ a komplementárnej formuly $\mathbf{B}_+ = \boldsymbol{H}(\mathbf{H}^{-1}, \mathbf{y}, \mathbf{p}, 1/\gamma, \varphi)$. Ak na generovanie postupnosti matíc $\{\mathbf{H}_k\}$použijeme formulu (150), tak získané postupnosti parametrov $\{\gamma_k\}$, $\{\varphi_k\}$ môžeme použiť aj na generovanie postupnosti matíc $\{\mathbf{H}_k^{-1}\}$. Tomuto prípadu zodpovedá nasledujúca stratégia:

Stratégia 2

$$\gamma = \sqrt{\frac{\beta}{\chi}}, \qquad \varphi = \frac{\pi}{\pi + \sqrt{\beta\chi}}.$$

Pri takejto voľbe hodnôt parametrov γ_k, φ_k platí, že $\varphi_k \le 1/2$.

Keďže γ_k sa mení v každej iterácii, neplatí v tejto stratégii vzťah (153).