4. Orenova trieda formúl hodnosti jedna

4.1. SR1 formula

Ku kvázinewtonovským formulám s korekčnou maticou hodnosti jedna patrí takzvaná SR1 formula ktorá má tvar:

$$\mathbf{H}_{+} = \mathbf{H} + \frac{\bar{\mathbf{r}}\,\bar{\mathbf{r}}^{T}}{\bar{\mathbf{r}}^{T}\mathbf{y}}, \tag{1}$$

kde $\bar{\mathbf{r}} = \mathbf{p} - \mathbf{H}\,\mathbf{y}$. (2)

(Odvodenie viď [1].)

SR1 formula sa vyznačuje niektorými veľmi dobrými vlastnosťami:

- Je sama k sebe komplementárna.
- Ak je korektne definovaná, tak v prípade kvadratickej funkcie konverguje za n+1 krokov bez ohľadu na dĺžku kroku.(Okrem posledného, ten musí byť rovný jednej.)
- V jednej iterácii vyžaduje vyhodnotenie podstatne menej operácii ako iné formuly.

(Dôkaz týchto tvrdení viď[1].)

Aj keď tieto vlastnosti sú naozaj atraktívne, metóda SR1 sa v praxi neujala. Jej nedostatkom je:

- Pre $\mathbf{p} = \mathbf{H}\mathbf{y}$ nie je korektne definovaná.
- Aj v prípade, že $\mathbf{H} > 0$, matica $\mathbf{H}_{+}$ môže byť singulárna alebo záporne definitná.

Jednou z možností ako eliminovať spomenuté nedostatky, je zavedenie voľného parametra do tejto triedy. Potom vhodnou voľbou hodnôt tohto parametra zaručiť korektné definovanie tejto formuly a jej kladnú definitnosť.

4.2. SR1 metóda Orenovho typu

Ak na formulu (1) použijeme transformáciu $\mathbf{H} \rightarrow \gamma\mathbf{H}$, kde $\gamma \in$ R dostaneme nasledovnú triedu formúl

$$\mathbf{H}_{+} = \gamma\mathbf{H} + \frac{\mathbf{r}\,\mathbf{r}^{T}}{\mathbf{r}^{T}\mathbf{y}}, \tag{3}$$

kde $\mathbf{r} = \mathbf{p} - \gamma\mathbf{H}\,\mathbf{y}$. (4)

Túto triedu budeme nazývať *SR1 so zavedeným Orenovým parametrom* respektíve *SR1 Orenovho typu.*

Označme rovnako ako v kapitole 3

$$\pi = \mathbf{p}^{T}\mathbf{y}\,, \tag{5.a}$$

$$\chi = \mathbf{y}^{T}\mathbf{H}\mathbf{y}, \tag{5.b}$$

$$\beta = \mathbf{p}^{T}\mathbf{H}^{-1}\mathbf{p}. \tag{5.c}$$

V ďalších úvahách budeme predpokladať, že vektory **p** a **Hy** sú lineárne nezávislé,

teda $\mathbf{p} \neq \alpha.\mathbf{H}\,\mathbf{y}$ pre $\forall\ 0 \neq \alpha \in \mathbf{R}$.

Tým je zabezpečené, že $\mathbf{p} \neq \gamma\mathbf{H}\,\mathbf{y}$ a formula (3) je korektne definovaná.

Z tohto predpokladu a Cauchyho nerovnosti tiež platí

$$\beta\,\chi > \pi^{2}.$$

(Ak $\mathbf{p} = \alpha.\mathbf{H}\,\mathbf{y}$, tak celá Orenova trieda formúl stráca opodstatnenie, lebo $\mathbf{H}_{+} = \alpha\mathbf{H}$.)

Veta 4.1.

a) Formula (3) patrí do triedy Orenovských formúl.

b) Formula (3) je samokomplementárna.

Dôkaz:

a) Ak do Orenovej triedy formúl (3.83) dosadíme

$$\varphi = \frac{\pi}{\pi - \gamma\chi}, \tag{6}$$

tak dostávame vzťah (3).

b) Pre formuly z Orenovej triedy podľa Vety 3.21 platí

$$\boldsymbol{H}(\mathbf{H}, \mathbf{p}, \mathbf{y}, \gamma, \varphi) = [\boldsymbol{H}(\mathbf{H}^{-1}, \mathbf{y}, \mathbf{p}, 1/\gamma, \varphi^c)]^{-1}, \tag{7}$$

ak

$$\varphi^c = \frac{\pi^2(1-\varphi)}{\pi^2(1-\varphi) + \varphi\beta\chi}. \tag{8}$$

Dosadením φ zo vzťahu (6) do vzťahu (8) dostaneme

$$\varphi^c = \frac{\gamma\pi}{\pi\gamma - \beta}.$$

Použitím transformácie

$$\mathbf{H} \to \mathbf{H}^{-1}, \ \mathbf{p} \to \mathbf{y}, \ \mathbf{y} \to \mathbf{p}, \gamma \to 1/\gamma, \quad (\chi \to \beta, \ \beta \to \chi)$$

dostaneme $\varphi^c \to \varphi$, teda podľa definície 3.4 je veta dokázaná ■

4.3. Podmienky pre kladnú definitnosť formuly SR1 Orenovho typu

Niektoré nutné podmienky kladnej definitnosti matice $\mathbf{H}_+$ definovanej vzťahom (3) môžeme odvodiť priamo z tohto vzťahu.

Veta 4.2.

Nech $\mathbf{H} > 0$ je matica typu nxn. Ak matica $\mathbf{H}_+ > 0$, tak

$$\gamma > 0 \quad \text{a} \quad \pi = \mathbf{p}^T\mathbf{y} > 0.$$

<u>Dôkaz:</u> Ak by $\gamma < 0$, tak matica $\gamma\,\mathbf{H} < 0$ (Všetky vlastné čísla tejto matice sú záporné.). Korekčná matica hodnosti jedna zmení maximálne jedno vlastné číslo na kladné. Teda pre n > 1 $\mathbf{H}_+$ nie je kladne definitná, čo je spor s predpokladom.

Trieda formúl (3) spĺňa kvázinewtonovskú podmienku, teda platí $\mathbf{H}_+\mathbf{y} = \mathbf{p}$. Odtiaľ dostávame $\pi = \mathbf{p}^T\mathbf{y} = \mathbf{y}^T\mathbf{H}_+\mathbf{y} > 0$. ■

Odvodili sme nutné podmienky pre $\mathbf{H}_+ > 0$. O postačujúcich podmienkach pojednáva nasledujúca veta.

Veta 4.3.

Nech $\mathbf{H} > 0$. Nech $\mathbf{H}_+$ je definovaná vzťahom (3). Potom $\mathbf{H}_+ > 0$ vtedy a len vtedy, ak

$$\gamma \in (0, \pi/\chi) \quad \text{alebo} \quad \gamma \in (\beta/\pi, \infty). \tag{9}$$

Dôkaz: Keďže $\mathbf{H}_+$ má nanajvýš jedno nekladné vlastné číslo, tak nutnou aj postačujúcou podmienkou pre $\mathbf{H}_+ > 0$ je, aby det $(\mathbf{H}_+) > 0$. Použijúc označenie (5) počítajme

$$\det(\mathbf{H}_+) = \det\left(\gamma\mathbf{H} + \frac{\mathbf{r}\,\mathbf{r}^T}{\mathbf{r}^T\mathbf{y}}\right) = \det\left[\mathbf{H}.\left(\gamma\,\mathbf{I} + \frac{\mathbf{H}^{-1}\mathbf{r}\,\mathbf{r}^T}{\mathbf{r}^T\mathbf{y}}\right)\right] =$$

$$= \det(\mathbf{H})\left[\gamma + \frac{\mathbf{r}^T\mathbf{H}^{-1}\mathbf{r}}{\mathbf{r}^T\mathbf{y}}\right] = \det(\mathbf{H})\left[\frac{\gamma\,\pi - \beta}{\gamma\,\chi - \pi}\right]. \tag{10}$$

Teda det $(\mathbf{H}_+) > 0 \Leftrightarrow$ ak platí (9). ■

Dostali sme dve triedy kladne definitných SR1 formúl Orenovho typu. Jedna zodpovedá voľbe parametra $\gamma \in (0, \pi/\chi)$ a druhá zodpovedá voľbe parametra $\gamma \in (\beta/\pi, \infty)$.

Poznámka: Ak platí Veta 4.3, tak podľa vzťahu (6) bude $\mathbf{H}_+ > 0$ vtedy a len vtedy, ak

$$-\frac{\pi^2}{\beta\chi - \pi^2} < \varphi < 0 \qquad \text{t.j.} \quad \gamma \in (\beta/\pi, \infty)$$

alebo

$$1 < \varphi < \infty \qquad \text{t.j.} \quad \gamma \in (0, \pi/\chi).$$

Ak $\gamma \in [\pi/\chi, \beta/\pi]$, tak $-\infty < \varphi < -\dfrac{\pi^2}{\beta\chi - \pi^2}$. Pre tento prípad vieme už z Vety 3.17, že $\mathbf{H}_+$ nebude kladne definitná.

Vidíme, že ak $\gamma \in (0, \pi/\chi)$, tak $1 < \varphi < \infty$.

Po transformácii $(\mathbf{H} \to \mathbf{H}^{-1},\ \mathbf{p} \to \mathbf{y},\ \mathbf{y} \to \mathbf{p})$ $1/\gamma \in (\beta/\pi, \infty)$

a
$$-\frac{\pi^2}{\beta\chi - \pi^2} < \varphi_{\text{transf}} < 0.$$

SR1 formuly Orenovho typu sú podľa Vety 4.1 samokomplementárne. Podľa predchádzajúcich úvah budú mať kladne definitné formuly z jednej triedy komplementárne formuly v druhej triede kladne definitných formúl.

Pre porovnanie v kapitole 3 sme pre kvadratickú funkciu ($\mathbf{G} > 0$) ukázali, že ak $\gamma \in [\pi/\chi, \beta/\pi]$ a $\varphi \in [0, 1]$, tak $\mathbf{H}_+$ bude kladne definitná a pre číslo podmienenosti matice $\mathbf{R}_k = \mathbf{G}^{1/2}\mathbf{H}_k\mathbf{G}^{1/2}$ platí $K(\mathbf{R}_+) \le K(\mathbf{R})$.Neuvažovali sme o prípade, kedy hodnoty parametrov nepatria spomenutým intervalom.

4.4. Optimálna podmienenosť formúl SR1 Orenovho typu

Formuly SR1 so zavedeným Orenovým parametrom sú špeciálnym prípadom Orenovej triedy (Veta 4.1.), preto môžeme pri vyšetrovaní optimálnej podmienenosti využiť všeobecne platné vlastnosti tejto triedy.

Veta 4.4.

Nech $\mathbf{H} > 0$, $\gamma > 0$ a $\mathbf{H}_+$ je definovaná vzťahom (3). Potom $\mathbf{H}_+$ je optimálne podmienená vtedy a len vtedy, ak

$$\gamma = \frac{\beta\chi + \sqrt{\beta\chi(\beta\chi - \pi^2)}}{\pi\chi} \tag{10.a}$$

alebo

$$\gamma = \frac{\beta\chi - \sqrt{\beta\chi(\beta\chi - \pi^2)}}{\pi\chi}. \tag{10.b}$$

Dôkaz: Podľa Vety 3.20 je $\mathbf{H}_+$ optimálne podmienená vtedy a len vtedy, ak

$$\varphi = \frac{\pi(\beta - \gamma\pi)}{\gamma(\beta\chi - \pi^2)}. \tag{12}$$

V prípade SR1 Orenovho typu

$$\varphi = \frac{\pi}{\pi - \gamma\chi}. \tag{13}$$

Porovnaním (12) a (13) dostávame pre γ nasledujúcu kvadratickú rovnicu

$$(\pi\chi)\gamma^2 - 2(\beta\chi)\gamma + \beta\pi = 0. \tag{14}$$

Korene kvadratickej rovnice (14) sú

$$\gamma_1 = \frac{\beta\chi - \sqrt{\beta\chi(\beta\chi - \pi^2)}}{\pi\chi}. \tag{15}$$

$$\gamma_2 = \frac{\beta\chi + \sqrt{\beta\chi(\beta\chi - \pi^2)}}{\pi\chi}. \tag{16}$$

Pretože $\beta\chi > \pi^2$, tak tieto korene sú reálne. ■

Poznámka: Medzi γ a φ je jednoznačné zobrazenie (13), preto ak $\gamma = \gamma_1$, tak

$$\varphi_1 = 1 + \sqrt{\frac{\beta\chi}{\beta\chi - \pi^2}}. \tag{17}$$

Ak $\gamma = \gamma_2$, tak

$$\varphi_2 = 1 - \sqrt{\frac{\beta\chi}{\beta\chi - \pi^2}} . \tag{18}$$

Vidíme, že $\varphi_1 > 1$, teda $\gamma_1 \in (0, \pi/\chi)$.

Na druhej strane $\gamma_2 > \beta/\pi$, teda $-\dfrac{\pi^2}{\beta\chi - \pi^2} < \varphi < 0$.

To znamená, že obidve triedy kladne definitných SR1 formúl Orenovho typu obsahujú formulu, ktorá je optimálne podmienená.

Z predchádzajúcich úvah sa ako prirodzená stratégia voľby hodnôt parametra γ javí stratégia, ktorá priradí v každej iterácii parametru γ jednu z hodnôt γ_1, γ_2, kde γ_1 a γ_2 sú definované vzťahmi (15) a (16).