1. ÚVOD

Kvázinewtonovské metódy riešia úlohu minimalizácie konvexných funkcií bez ohraničení. Sú dôležitou súčasťou nelineárneho programovania, a za štyri desiatky rokov ich vývoja sa nimi zaoberalo množstvo autorov a bolo napísaných veľa prác a článkov. Ich vývoj však stále pokračuje.

1.1. Formulácia problému

Nech je daná funkcia $f : R^n \to R$. Potom n-rozmernou úlohou na voľný extrém funkcie f nazývame úlohu:

$$(\text{U1})\ \text{Min}\left\{ f(\boldsymbol{x}) \,|\, \boldsymbol{x} \in R^n \right\}.$$

V diplomovej práci sa budeme zaoberať metódami na riešenie úlohy (U1), pričom na účelovú funkciu f kladieme nasledovné požiadavky:

- f má spojité všetky druhé parciálne derivácie, t.j. $f \in C^2$
- f je na R^n konvexná funkcia
- pre nejaký bod $\boldsymbol{x}^0 \in R^n$ je množina S = { $\boldsymbol{x} \in R^n$ | $f(\boldsymbol{x}) \le f(\boldsymbol{x}^0)$ } ohraničená (poznamenávame, že z predpokladu konvexnosti f potom vyplýva, že S je ohraničená pre všetky $\boldsymbol{x}^0 \in R^n$).

Požiadavka konvexnosti sa môže zdať dosť silná, avšak bez nej by neboli možné naše nasledujúce úvahy. Totiž vieme, že každý bod lokálneho minima konvexnej funkcie je zároveň aj jej bodom globálneho minima. Ak by však f nebola konvexná, potom by mohla mať viac kvalitatívne odlišných bodov lokálneho minima (t.j. nadobúdala by v nich rôzne hodnoty). V takom prípade by sme nemohli garantovať konvergenciu našich metód k bodu globálneho minima, o ktoré máme záujem. Tretia požiadavka zaručuje existenciu minima konvexnej funkcie (v praxi sa neoveruje). V diplomovej práci podáme prehľad o kvázinewtonovských metódach používajúcich konštantnú dĺžku kroku a vykazujúcich (n+1)-krokovú konvergenciu pre kvadratickú funkciu.

1.2. Motivácia

Vieme, že každé riešenie úlohy konvexného programovania

$$\text{Min}\left\{ f(\boldsymbol{x}) \,|\, g_i(\boldsymbol{x}) \geq 0, \boldsymbol{x} \in R^n,\; i = 1, \ldots, m \right\},$$

je možné pretransformovať na riešenie postupnosti úloh (U1). Aby sme mohli takto pristupovať k riešeniu úlohy na viazaný extrém, mali by sme byť schopní vedieť efektívne riešiť úlohu (U1) (t.j. úlohu na voľný extrém). Spomínané transformačné techniky sú predmetom samostatnej kapitoly nelineárneho programovania, a preto sa nimi v ďalšom nebudeme zaoberať.

1.3. Prehľad

Teraz sa stručne oboznámime s obsahom jednotlivých kapitol.

V kapitole 2 si predstavíme zákadné pojmy, veličiny (a vzťahy medzi nimi) súvisiace s iteračnými metódami na riešenie úlohy (U1). Na záver kapitoly upresníme cieľ diplomovej práce.

V kapitolách 3 až 6 podrobne analyzujeme štyri vybrané kvázinewtonovské metódy s konštantnou dĺžkou kroku na riešenie úlohy (U1). Sú to:

- SR1 metóda (z anglického "Symetric Rank One"), tzv. Symetrická Hodnosti Jedna (r. 1967-1968)
- Davidonova metóda, využívajúca techniku projekčných matíc (r. 1975)
- Dixonova metóda, založená na analýze vplyvu dĺžky kroku na niektoré veličiny kvázinewtonovských formúl (r. 1973)
- Goldfarbova metóda, ktorá využíva Choleského rozklad kladne definitných matíc (r. 1977).

V kapitole 7 uvedieme popis numerického experimentu, ktorý zrealizujeme použitím spomínaných štyroch metód s konštantnou dĺžkou kroku.

V kapitole 8 predložíme tabuľky numerických výsledkov, ktorých vyhodnotenie podáme v kapitole číslo 9.

V prílohe dodáme výpis použitého počítačového programu.

2. Základné pojmy

2.1. Dĺžka kroku

Napriek tomu, že vo všeobecnosti riešiť *n*-rozmernú úlohu na voľný extrém (t.j.úlohu (U1)), je značne jednoduchšie, ako riešiť *n*-rozmernú úlohu na viazaný extrém, aj tak je to ešte stále dosť zložitá úloha, ktorá sa obvykle rieši nejakou iteračnou metódou. Najväčšiu triedu metód riešenia úlohy na voľný extrém tvoria metódy s iteráciou typu "bod" , "smer" , "krok". Presnejšie povedané, pre *k*-tu iteráciu platí:

- poznáme približné riešenie $\boldsymbol{x}^k \in R^n$, t.j. "bod" ;
- v bode $\boldsymbol{x}^k$ vytýčime nenulový vektor $\boldsymbol{s}^k \in R^n$, t.j. "smer", ktorý sa volí tak, že v ňom funkcia f vykazuje pokles (je to tzv. spádový smer) ;
- zvolíme kladné číslo λ_k, t.j. "krok" (v smere $\boldsymbol{s}^k$), aby v "novom bode"

$$\boldsymbol{x}^{k+1} = \boldsymbol{x}^k + \lambda_k \boldsymbol{s}^k \tag{2.1}$$

platilo:
$$f(\boldsymbol{x}^{k+1}) < f(\boldsymbol{x}^k). \tag{2.2}$$

Tým je *k*-ta iterácia ukončená a prechádza sa na ďalšiu iteráciu.

Každá metóda je založená na inej voľbe "smeru" a "kroku". Voľba smeru je spravidla daná nejakým jednoduchým vzorcom.

S voľbou kroku je to ťažšie. Pretože chceme, aby nový bod $\boldsymbol{x}^{k+1}$ bol lepším priblížením k bodu minima ako starý bod $\boldsymbol{x}^k$, musíme zvoliť dĺžku kroku λ_k tak, aby krok nebol ani príliš dlhý, ani príliš krátky. V minulosti sa často volila "<u>optimálna dĺžka kroku</u>", t.j. za λ_k sa zvolilo riešenie nasledovnej pomocnej úlohy:

$$\mathrm{Min}\left\{ \varphi(\lambda) \equiv f(\boldsymbol{x}^k + \lambda \boldsymbol{s}^k) \mid \lambda \in R \right\}. \tag{2.3}$$

Zrejme λ_k je riešením úlohy (2.3) práve vtedy, keď platí:

$$\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}^k + \lambda_k \boldsymbol{s}^k)^{\mathrm{T}} \boldsymbol{s}^k = 0, \tag{2.4}$$

kde $\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x})$ je gradient funkcie f v bode $\boldsymbol{x} \in R^n$.

Poznamenávame, že (2.3) je jednorozmerná úloha na voľný extrém, ktorú je potrebné vyriešiť v každej iterácii. Preto efektívnosť iteračného procesu pôvodnej úlohy (U1) závisí od toho, ako efektívne riešime podúlohu (2.3). Najmä kôli výpočtovej náročnosti riešenia úlohy

(2.3), v súčasnosti sa upúšťa od optimálnej dĺžky kroku a úloha (2.3) sa rieši len približne. Avšak potom splnenie podmienky (2.2) v každej iterácii nemusí byť postačujúce pre konvergenciu k riešeniu úlohy (U1). Existujú isté "bezpečnostné hranice", ktoré odvodili autori Armijo a Goldstein, a ak sa vrámci nich volí dĺžka kroku, potom nie je ohrozená konvergencia iteračnej metódy (2.1).

Definícia 2.1:

Majme dané:
- konštanty α, β spĺňajúce: $0 < \alpha < \beta < 1$
- funkciu $f: R^n \rightarrow R$, ktorá má spojité prvé parciálne derivácie
- spádový smer $\boldsymbol{s}^k \in R^n$ (pozri definíciu 2.3).

Potom dĺžku kroku λ_k pokladáme za:

a) dostatočne malú, ak platí:

$$f(\boldsymbol{x}^k + \lambda_k \boldsymbol{s}^k) \leq f(\boldsymbol{x}^k) + \alpha.\lambda_k [\nabla f(\boldsymbol{x}^k)]^{\mathrm{T}} \boldsymbol{s}^k, \qquad \text{(Armijo 1966)} \qquad (2.5)$$

b) dostatočne veľkú, ak platí:

$$[\nabla f(\boldsymbol{x}^k + \lambda_k \boldsymbol{s}^k)]^{\mathrm{T}} \boldsymbol{s}^k \geq \beta.[\nabla f(\boldsymbol{x}^k)]^{\mathrm{T}} \boldsymbol{s}^k. \qquad \text{(Goldstein 1967)} \qquad (2.6)$$

Nasledujúca lema (uvádzaná bez dôkazu) zaručuje, že vždy existuje "bezpečný" krok.

Lema 2.2:

Nech sú splnené predpoklady definície 2.1, a nech platí: $\alpha \in <0, 0.5>$ a $\beta \in <\alpha, 1>$.

Potom existuje taký interval $<d, h>$, $d > 0$, že pre $\forall\ \lambda_k \in <d, h>$ platia súčasne vzťahy (2.5), (2.6).

V praxi sa volí $\alpha \in <10^{-5}, 10^{-1}>$ a $\beta \in <10^{-1}, 5.10^{-1}>$.

Existuje ešte jeden prístup k voľbe dĺžky kroku. V každej iterácii sa volí rovnaké λ_k a kontroluje sa len spádovosť metódy, t.j. vzťah (2.2), prípadne zosilnený vzťah (2.5), a ak je to nevyhnutné, tak sa λ_k zmenší na polovičnú dĺžku (resp. zdvojnásobí) a posledná iterácia sa zopakuje. V žiadnom prípade sa však nerieši úloha (2.3). Takéto metódy sa nazývajú spádovými metódami s konštantnou dĺžkou kroku a sú predmetom záujmu tejto práce. V praktických algoritmoch sa často kombinujú oba spomínané prístupy voľby dĺžky kroku.

2.2. Spádové smery

V tejto časti uvádzame definíciu a niektoré vlastnosti spádových smerov.

Definícia 2.3:

Nech je daná funkcia $f : R^n \to R$, a bod $\boldsymbol{x}^k \in R^n$.

Potom nenulový vektor $\boldsymbol{s}^k \in R^n$ nazývame spádovým smerom funkcie f v bode $\boldsymbol{x}^k$, ak existuje číslo $\bar{\lambda} > 0$ také, že pre všetky $0 < \lambda < \bar{\lambda}$ platí: $f(\boldsymbol{x}^k + \lambda \boldsymbol{s}^k) < f(\boldsymbol{x}^k)$.

Lema 2.4:

Nech sú dané: • funkcia $f : R^n \to R$, $f \in C^1$, bod $\boldsymbol{x}^k \in R^n$

• vektor $\boldsymbol{s}^k \in R^n$, pre ktorý platí:

$$[\nabla f(\boldsymbol{x}^k)]^{\mathrm{T}} \boldsymbol{s}^k < 0. \tag{2.7}$$

Potom $\boldsymbol{s}^k$ je spádový smer funkcie f v bode $\boldsymbol{x}^k$.

Dôkaz: Dôkaz bezprostredne vyplýva z definície derivácie funkcie $\varphi(\lambda) \equiv f(\boldsymbol{x}^k + \lambda \boldsymbol{s}^k), \lambda \in R$. ■

Poznámka: Opačná veta neplatí. Totiž aj v prípade $[\nabla f(\boldsymbol{x}^k)]^{\mathrm{T}} \boldsymbol{s}^k = 0$ môže byť smer $\boldsymbol{s}^k$ spádový. Avšak platí, že ak je $\boldsymbol{s}^k$ spádový smer funkcie f v bode $\boldsymbol{x}^k$, potom $[\nabla f(\boldsymbol{x}^k)]^{\mathrm{T}} \boldsymbol{s}^k \le 0$.

Lema 2.5:

Nech pre funkciu $f : R^n \to R$, $f \in C^1$, a pre bod $\boldsymbol{x}^k \in R^n$ platí: $\nabla f(\boldsymbol{x}^k) \ne \boldsymbol{0}_n$.

Potom pre každú kladne definitnú $n \times n$ maticu $\boldsymbol{H}_k$, je $\boldsymbol{s}^k = -\boldsymbol{H}_k \nabla f(\boldsymbol{x}^k)$ spádový smer.

Dôkaz: Počítajme: $[\nabla f(\boldsymbol{x}^k)]^{\mathrm{T}} \boldsymbol{s}^k = -[\nabla f(\boldsymbol{x}^k)]^{\mathrm{T}} \boldsymbol{H}_k \nabla f(\boldsymbol{x}^k) < 0$, lebo $\nabla f(\boldsymbol{x}^k) \ne \boldsymbol{0}_n$ a $\boldsymbol{H}_k$ je kladne definitná matica. Platnosť lemy 2.5 vyplýva priamo z lemy 2.4. ■

Dôsledok 2.6:

Za predpokladov lemy 2.5 platí:

a) Tzv. cauchyovský smer $\boldsymbol{s}^k = -\nabla f(\boldsymbol{x}^k)$ je spádový.

b) Ak navyše $f \in C^2$ a Hessova matica $[\nabla^2 f(\boldsymbol{x}^k)]$ je kladne definitná, potom je tzv. newtonovský smer $\boldsymbol{s}^k = -[\nabla^2 f(\boldsymbol{x}^k)]^{-1} \nabla f(\boldsymbol{x}^k)$ spádový.

Dôkaz: Triviálny z lemy 2.5.. ■

2.3. Modelový algoritmus

V tejto časti uvádzame všeobecný gradientny algoritmus na riešenie úlohy (U1) iteračnými metódami typu "bod" , "smer" , "krok".

ALGORITMUS 1

Vstup: • funkcia s vlastnosťami uvedenými v časti 1.1. (t.j. $f \in C^2$, konvexná funkcia)

• štartovací bod $\boldsymbol{x}^0 \in R^n$

• symetrická, kladne definitná $n \times n$ matica $\boldsymbol{H}_0$ (napr. $\boldsymbol{H}_0 = \boldsymbol{I}_n$)

• parameter požadovanej presnosti $\varepsilon > 0$ (ε sa volí ako malé číslo, napr. 10^{-6})

Cyklus pre $k = 0, 1, 2, \ldots$

krok 1: Výpočet gradientu $\boldsymbol{g}^k = \nabla f(\boldsymbol{x}^k)$.

krok 2: Test: ak $\|\boldsymbol{g}^k\|_2 < \varepsilon$, tak $\boldsymbol{x}^k$ je ε-aproximácia bodu minima, stop.

krok 3: Výpočet (spádového) smeru $\boldsymbol{s}^k = -\boldsymbol{H}_k \boldsymbol{g}^k$.

krok 4: Výpočet dĺžky kroku $\lambda_k > 0$.

krok 5: Výpočet nového bodu $\boldsymbol{x}^{k+1} = \boldsymbol{x}^k + \lambda_k \boldsymbol{s}^k$.

krok 6: Výpočet (novej) symetrickej, kladne definitnej $n \times n$ matice $\boldsymbol{H}_{k+1}$.

Keďže f je C^2 hladká, konvexná funkcia, tak nutná a postačujúca podmienka na to, aby v bode $\boldsymbol{x}^k$ mala f minimum, je: $\boldsymbol{g}^k = \boldsymbol{0}_n \Leftrightarrow \|\boldsymbol{g}^k\|_2 = 0$.

2.4. Newtonova iteračná metóda

Majme úlohu (U1), pričom navyše budeme predpokladať, že Hessova matica $\nabla^2 f(\boldsymbol{x})$ druhých parciálnych derivácii funkcie f v bode $\boldsymbol{x}\in R^n$ je kladne definitná.

Označme:

- $\boldsymbol{G}_k = \nabla^2 f(\mathbf{x}^k)$ ... Hessova matica druhých parciálnych derivácii funkcie f v bode $\boldsymbol{x}^k\in R^n$
- $\boldsymbol{g}^k = \nabla f(\boldsymbol{x}^k)$ ... gradient funkcie f v bode $\boldsymbol{x}^k\in R^n$
- f_k ... hodnota funkcie f v bode $\boldsymbol{x}^k\in R^n$.

Newtonova metóda je založená na tom, že v k-tej iterácii aproximujeme funkciu f Taylorovým polynómom druhého stupňa v okolí bodu $\boldsymbol{x}^k$, t.j. máme:

$$f(\boldsymbol{x}) \approx f_k + \boldsymbol{g}^{k\,\mathrm{T}}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^k) + \frac{1}{2}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^k)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{G}_k(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^k) \equiv Q(\boldsymbol{x})$$

Nový bod $\boldsymbol{x}^{k+1}$ definujeme ako bod minima rýdzokonvexnej kvadratickej funkcie Q, ktorá má jediné minimum. Nutná a postačujúca podmienka na to, aby $\boldsymbol{x}^{k+1}$ bol bodom jej minima je: $\nabla Q(\boldsymbol{x}^{k+1}) = \mathbf{0}_n$. Máme:

$$\nabla Q(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{g}^k + \boldsymbol{G}_k(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^k) \qquad \Rightarrow \qquad [\nabla Q(\boldsymbol{x}^{k+1}) = \mathbf{0}_n \Leftrightarrow \boldsymbol{x}^{k+1} = \boldsymbol{x}^k - \boldsymbol{G}_k^{-1}\boldsymbol{g}^k\,].$$

Teda k-ta iterácia newtonovej metódy má tvar:

$$\boldsymbol{x}^{k+1} = \boldsymbol{x}^k - [\nabla^2 f(\boldsymbol{x}^k)]^{-1}\nabla f(\boldsymbol{x}^k). \tag{2.8}$$

Označme $\boldsymbol{p}^k = \boldsymbol{x}^{k+1} - \boldsymbol{x}^k$, potom $\boldsymbol{p}^k$ vyhovuje sústave: $\boldsymbol{G}_k\boldsymbol{p}^k = -\boldsymbol{g}^k$ (s neznámou $\boldsymbol{p}^k$). Teda iteráciu (2.8) možno realizovať bez výpočtu inverznej Hessovej matice (čo je výpočtovo náročnejšie, ako riešiť spomínanú sústavu). Potom: $\boldsymbol{x}^{k+1} = \boldsymbol{x}^k + \boldsymbol{p}^k$. Teda v zmysle vzťahu (2.1), sa v newtonovej metóde volí smer $\boldsymbol{s}^k = \boldsymbol{p}^k$ a dĺžka kroku $\lambda_k = 1$.

Poznamenávame, že sa tu využíva tzv. newtonovský smer spomínaný v dôsledku 2.6. Ak je f kvadratická funkcia, tak newtonovou metódou nájdeme jej minimum hneď v prvej iterácii, lebo vtedy sú funkcie f a Q totožné.

Je nutné podotknúť, že pri voľbe $\lambda_k = 1$ v každej iterácii, newtonova metóda (2.8) nevykazuje dobrú konvergenciu k bodu minima nekvadratickej funkcie f. Tento nedostatok je možné odstrániť voľbou optimálnej dĺžky kroku. Takto pozmenená newtonova metóda sa nazýva tzv. "modifikovaná newtonová metóda" a jej k-ta iterácia má tvar:

$$\boldsymbol{x}^{k+1} = \boldsymbol{x}^k - \lambda_k [\nabla^2 f(\boldsymbol{x}^k)]^{-1} \nabla f(\boldsymbol{x}^k), \qquad (2.9)$$

kde λ_k je optimálna dĺžka kroku.

2.5. Kvázinewtonovské metódy

Kvázinewtonovské metódy sú iteračné metódy na riešenie úlohy (U1), pričom základná myšlienka pochádza z modifikovanej newtonovej metódy (2.9) s optimálnou dĺžkou kroku .

Nevýhody modifikovanej newtonovej metódy sú, že v každej iterácii musíme:

- vypočítať Hessovu maticu $\nabla^2 f(\mathbf{x}^k)$
- riešiť systém $\nabla^2 f(\boldsymbol{x}^k)\boldsymbol{s}^k = -\nabla f(\boldsymbol{x}^k),$ s neznámou $\boldsymbol{s}^k$
- riešiť pomocnú úlohu (2.3).

Prvé dva nedostatky možno odstrániť tak, že budeme v každej iterácii minimalizačného procesu postupne aproximovať inverznú Hessovu maticu $[\nabla^2 f(\boldsymbol{x}^k)]^{-1}$. Toto je základná myšlienka kvázinewtonovských metód. Poznamenávame, že tieto metódy pracujú s optimálnou dĺžkou kroku a s prvými parciálnymi deriváciami funkcie *f*.

Keďže kvázinewtonovské metódy vychádzajú z prvotnej myšlienky modifikovanej newtonovej metódy, a táto v každej iterácii minimalizovala kvadratickú rýdzokonvexnú funkciu *Q*, tak aj prvá analýza a tvorba optimalizačného algoritmu pomocou kvázinewtonovských metód bude pre kvadratickú funkciu, a potom sa urobí zovšeobecnenie aj pre nekvadratickú funkciu.

Označenie:

- $\boldsymbol{g}^k \equiv \nabla f(\boldsymbol{x}^k)$
- $\boldsymbol{p}^k \equiv \boldsymbol{x}^{k+1} - \boldsymbol{x}^k,$ teraz v zmysle vzťahu (2.1) máme: $\boldsymbol{p}^k = \lambda_k \boldsymbol{s}^k$
- $\boldsymbol{y}^k \equiv \boldsymbol{g}^{k+1} - \boldsymbol{g}^k$

- $\boldsymbol{r}^k \equiv \boldsymbol{p}^k - \boldsymbol{H}_k \boldsymbol{y}^k$
- $\boldsymbol{G}_k = \nabla^2 f(\boldsymbol{x}^k) \equiv$ Hessova matica funkcie f v bode $\boldsymbol{x}^k \in R^n$
- $\boldsymbol{H}_k \equiv$ aproximácia inverznej Hessovej matice $[\nabla^2 f(\boldsymbol{x}^k)]^{-1}$
- $\boldsymbol{B}_k \equiv$ aproximácia Hessovej matice $\nabla^2 f(\mathbf{x}^k)$.

Veličiny neoznačené žiadnym indexom súvisia s k-tou iteráciou, a tie, ktoré budú označené indexom "+" súvisia s (k+1)-vou iteráciou. Napr.: $\boldsymbol{H}_{k+1} \equiv \boldsymbol{H}_+$, $\boldsymbol{x}^k \equiv \boldsymbol{x}$.

Nová matica $\boldsymbol{H}_{k+1}$ sa volí v tvare aditívnej korekcie matice $\boldsymbol{H}_k$:

$$\boldsymbol{H}_{k+1} = \boldsymbol{H}_k + \Delta \boldsymbol{H}_k \tag{2.10}$$

Každá matica $\boldsymbol{H}_k$ by mala splĺňať nasledovné požiadavky:

- matica $\boldsymbol{H}_k$ je symetrická, pretože aproximuje inverznú Hessovu maticu a každá C^2 hladká funkcia má symetrickú Hessovu maticu
- matica $\boldsymbol{H}_k$ je kladne definitná, pretože toto je nevyhnutné pre modifikovanú newtonovú metódu, z ktorej vychádzame
- korekčná matica $\Delta \boldsymbol{H}_k$ je jednoduchá, čo je vyjadrené jej malou hodnosťou (hodnosť najviac dva, kvôli jednoduchosti výpočtu matice $\boldsymbol{H}_{k+1}$)
- kvázinewtonovskú podmienku:

$$\boldsymbol{H}_{k+1} \boldsymbol{y}^k = \boldsymbol{p}^k, \text{ (resp. } \Delta \boldsymbol{H}_k \boldsymbol{y}^k = \boldsymbol{r}^k \text{)} \tag{2.11}$$

pretože táto platí pre inverznú Hessovu maticu $\boldsymbol{G}^{-1}$ každej kvadratickej funkcie:

$$f(\boldsymbol{x}) \equiv \frac{1}{2} \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{G} \boldsymbol{x} + \boldsymbol{h}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{x} + f_0 , \tag{2.12}$$

(kde $\boldsymbol{G} = \boldsymbol{G}^{\mathrm{T}}$ je kladne definitná $n \times n$ matica), pre ktorú sa robí prvotná analýza.

Totiž z (2.12) máme: $\boldsymbol{g}^k = \boldsymbol{G}\boldsymbol{x}^k + \boldsymbol{h}$, $\boldsymbol{G}_k = \boldsymbol{G}$, preto $\boldsymbol{y}^k = \boldsymbol{G}(\boldsymbol{x}^{k+1} - \boldsymbol{x}^k) = \boldsymbol{G}\boldsymbol{p}^k$, čo je ekvivalentné s:

$$\boldsymbol{G}^{-1} \boldsymbol{y}^k = \boldsymbol{p}^k . \tag{2.13}$$

Medzi známe triedy kvázinewtonovských formúl patrí aj tzv. Broydenova jednoparametrická trieda, ktorá má tvar:

$$H_+ = H + \frac{pp^T}{p^T y} - \frac{Hyy^T H}{y^T Hy} + \Phi(y^T Hy)ww^T, \tag{2.14}$$

kde
$$w = \frac{p}{p^T y} - \frac{Hy}{y^T Hy}, \tag{2.15}$$

a $\Phi \in R$ je parameter.

Ak je matica $\boldsymbol{H}$ kladne definitná, a vektory $\boldsymbol{p}$, $\boldsymbol{Hy}$ sú lineárne nezávislé, potom nutná a postačujúca podmienka na to, aby bola kladne definitná aj matica $\boldsymbol{H}_+$ je:

$$\left\{ p^T y > 0 \ \wedge \ \Phi > \frac{(p^T y)^2}{(p^T y)^2 - (y^T Hy)(p^T H^{-1} p)} \right\}. \tag{2.16}$$

Dôkaz (2.16) je možné nájsť v [1], strany 253 až 257.

Poznamenávame, že z Cauchy-Schwartzovej nerovnosti vyplýva, že zlomok v (2.16) je záporný, a teda aj každé nezáporné Φ spolu s podmienkou $p^T y > 0$ zaručuje kladnú definitnosť matice $\boldsymbol{H}_+$.

Ak je matica $\boldsymbol{H}$ kladne definitná, a vektory $\boldsymbol{p}$, $\boldsymbol{Hy}$ sú lineárne závislé, tak nutná a postačujúca podmienka kladnej definitnosti matice $\boldsymbol{H}_+$ je: $p^T y > 0$ (pozri dôkaz vety 4.3).

Rôznymi voľbami perametra Φ dostávame rôzne formule.

Niektoré známe voľby parametra Φ:

- $\Phi = 0$, v tomto prípade dostávame tzv. DFP formulu
- $\Phi = 1$, tejto voľbe zodpovedá tzv. BFGS formula, ktorá má tvar:

$$H_+ = H + \left(1 + \frac{y^T Hy}{p^T y}\right)\frac{pp^T}{p^T y} - \frac{Hyp^T + py^T H}{p^T y}$$

- $\Phi = \dfrac{p^T y}{p^T y - y^T Hy}$, takto dostávame tzv. SR1 formulu, ktorá má tvar:

$$H_+ = H + \frac{rr^T}{r^T y} \ .$$

Všeobecný kvázinewtonovský algoritmus dostaneme nasledovnou modifikáciou algoritmu 1 (pozri stranu 13):

- v kroku 4 volíme optimálnu dĺžku kroku

- v kroku 6 generujeme $n \times n$ maticu $\boldsymbol{H}_{k+1}$ tak, aby spĺňala všetky štyri požiadavky uvedené na strane 16.

Tzv. Broydenov algoritmus je špeciálnym prípadom všeobecného kvázinewtonovského algoritmu pre voľbu matice $\boldsymbol{H}_{k+1}$ z Broydenovej triedy (t.j. $\boldsymbol{H}_{k+1}$ je generovaná vzťahmi (2.14) a (2.15)).

Definícia 2.7:

Nech je daná symetrická, kladne definitná $n \times n$ matica $\boldsymbol{G}$.

Potom nenulové vektory $\boldsymbol{s}^0, \ldots, \boldsymbol{s}^{n-1} \in R^n$, sa nazývajú $\boldsymbol{G}$-združené (resp. $\boldsymbol{G}$-konjugované), ak pre všetky $0 \leq i < j \leq n-1$ platí:

$$\boldsymbol{s}^{i\,\mathrm{T}} \boldsymbol{G} \boldsymbol{s}^{j} = 0. \tag{2.17}$$

Lema 2.8:

$\boldsymbol{G}$-združené vektory $\boldsymbol{s}^0, \ldots, \boldsymbol{s}^{n-1}$ sú lineárne nezávislé v R^n.

Dôkaz: Sporom. Nech je napríklad nenulový vektor $\boldsymbol{s}^0$ lineárnou kombináciou ostatných vektorov $\boldsymbol{s}^1, \ldots, \boldsymbol{s}^{n-1}$. Potom existjú skaláre $\alpha_1, \ldots, \alpha_{n-1}$ také, že: $\boldsymbol{s}^0 = \sum_{i=1}^{n-1} \alpha_i \boldsymbol{s}^i$. Z definície 2.7 máme, že pre $j = 1, \ldots, n-1$ platí:
$$0 = \boldsymbol{s}^{0\,\mathrm{T}} \boldsymbol{G} \boldsymbol{s}^{j} = \sum_{i=1}^{n-1} \alpha_i \boldsymbol{s}^{i\,\mathrm{T}} \boldsymbol{G} \boldsymbol{s}^{j} = \alpha_j \boldsymbol{s}^{j\,\mathrm{T}} \boldsymbol{G} \boldsymbol{s}^{j}.$$
Pretože $\boldsymbol{G}$ je kladne definitná matica a $\boldsymbol{s}^j \neq \boldsymbol{0}_n$, tak $\boldsymbol{s}^{j\,\mathrm{T}} \boldsymbol{G} \boldsymbol{s}^{j} > 0$. Následne dostávame $\alpha_j = 0$, pre $j = 1, \ldots, n-1$, čo dáva $\boldsymbol{s}^0 = \boldsymbol{0}_n$. Spor! ■

Nasledujúca veta zdôrazňuje význam $\boldsymbol{G}$-združených smerov pre kvadratickú funkciu .

Veta 2.9:

Nech sú dané:
- kvadratická funkcia (2.12)
- $\boldsymbol{G}$-združené smery $\boldsymbol{s}^0, \ldots, \boldsymbol{s}^{n-1} \in R^n$

- iteračný proces (2.1), kde λ_k je optimálna dĺžka kroku a $\boldsymbol{x}^0 \in R^n$ je ľubovoľný štartovací bod.

Potom $\boldsymbol{x}^n$ je bod minima funkcie (2.12).

Dôkaz: Z (2.12) máme: $\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{Gx} + \boldsymbol{h}$ je gradient funkcie f v bode $x \in R^n$. Pre $k \in \{0, \ldots, n\text{-}2\}$ možno písať: $\boldsymbol{x}^n = \boldsymbol{x}^{k+1} + \sum_{i=k+1}^{n-1} \alpha_i \boldsymbol{s}^i$. Potom $\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}^n) = \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}^{k+1}) + \sum_{i=k+1}^{n-1} \alpha_i \boldsymbol{Gs}^i$. Po prenásobení vektorom $\boldsymbol{s}^{k\,\mathrm{T}}$ (sprava) dostávame: $\boldsymbol{s}^{k\,\mathrm{T}}\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}^n) = \boldsymbol{s}^{k\,\mathrm{T}}\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}^{k+1}) = 0$. Pritom sme využili vzťahy (2.17) a (2.4). Naviac z (2.4) máme: $\boldsymbol{s}^{(n-1)\,\mathrm{T}}\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}^n) = 0$. Teda vektor $\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}^n)$ je ortogonálny ku všetkým smerom $\boldsymbol{s}^0, \ldots, \boldsymbol{s}^{n-1}$ (ktoré sú podľa lemy 2.8 lineárne nezávislé), a preto platí: $\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}^n) = \boldsymbol{0}_n$. To však značí, že $\boldsymbol{x}^n$ je bod minima funkcie (2.12). ■

Lema 2.10:

Uvažujme Broydenov algoritmus (str.18), pričom naviac definujeme tieto vektory:

- $\boldsymbol{p}^k = \lambda_k \boldsymbol{s}^k$
- $\boldsymbol{y}^k = \boldsymbol{g}^{k+1} - \boldsymbol{g}^k$.

Ak $\boldsymbol{g}^k \neq \boldsymbol{0}_n$, potom platí: a) $\lambda_k \neq 0$.

b) $\boldsymbol{p}^{k\,\mathrm{T}}\boldsymbol{y}^k > 0$.

Dôkaz: a) Sporom. Nech $\lambda_k = 0$. Potom z Broydenovho algoritmu dostávame: $\boldsymbol{x}^{k+1} = \boldsymbol{x}^k$, $\boldsymbol{g}^{k+1} = \boldsymbol{g}^k$. Odtiaľ s využitím (2.4) máme: $\boldsymbol{g}^{k\,\mathrm{T}}\boldsymbol{s}^k = \boldsymbol{g}^{(k+1)\,\mathrm{T}}\boldsymbol{s}^k = 0$. Ale $\boldsymbol{g}^{k\,\mathrm{T}}\boldsymbol{s}^k = -\boldsymbol{g}^{k\,\mathrm{T}}\boldsymbol{H}_k\boldsymbol{g}^k < 0$, lebo $\boldsymbol{H}_k$ je kladne definitná matica a $\boldsymbol{g}^k \neq \boldsymbol{0}_n$. Spor!

b) Využijúc vzťah (2.4) počítajme: $\boldsymbol{p}^{k\,\mathrm{T}}\boldsymbol{y}^k = \boldsymbol{p}^{k\,\mathrm{T}}(\boldsymbol{g}^{k+1} - \boldsymbol{g}^k) = \lambda_k \boldsymbol{s}^{k\,\mathrm{T}}(\boldsymbol{g}^{k+1} - \boldsymbol{g}^k) = -\lambda_k \boldsymbol{s}^{k\,\mathrm{T}}\boldsymbol{g}^k$. To spolu s tvrdením a) a $\boldsymbol{g}^{k\,\mathrm{T}}\boldsymbol{s}^k = -\boldsymbol{g}^{k\,\mathrm{T}}\boldsymbol{H}_k\boldsymbol{g}^k < 0$ dáva $\boldsymbol{p}^{k\,\mathrm{T}}\boldsymbol{y}^k \neq 0$. Avšak f je konvexná funkcia, preto vždy platí: $\boldsymbol{p}^{k\,\mathrm{T}}\boldsymbol{y}^k \geq 0$. Odtiaľ už vyplýva tvrdenie b). ■

Veta 2.11:

Uvažujme Broydenov algoritmus aplikovaný na kvadratickú funkciu (2.12), pričom definujme vektory: $\boldsymbol{p}^k = \lambda_k \boldsymbol{s}^k$ a $\boldsymbol{y}^k = \boldsymbol{g}^{k+1} - \boldsymbol{g}^k$. Nech naviac pre $0 \leq j < k$ platí: $\boldsymbol{g}^j \neq \boldsymbol{0}_n$.

Potom pre všetky $0 \le j < i \le l \le k$ platí:

$$\boldsymbol{H}_l \boldsymbol{y}^j = \boldsymbol{p}^j \tag{2.18}$$

$$\boldsymbol{g}^{l\,\mathrm{T}} \boldsymbol{p}^j = 0 \tag{2.19}$$

$$\boldsymbol{p}^{i\,\mathrm{T}} \boldsymbol{G} \boldsymbol{p}^j = 0. \tag{2.20}$$

Dôkaz: Najprv niekoľko pomocných vzťahov:

Z (2.4) máme:

$$\boldsymbol{g}^{(j+1)\mathrm{T}} \boldsymbol{s}^j = 0 = \boldsymbol{g}^{(j+1)\mathrm{T}} \boldsymbol{p}^j \tag{2.21}$$

Z definície predošlých veličín:

$$\boldsymbol{p}^l = \lambda_l \boldsymbol{s}^l = -\lambda_l \boldsymbol{H}_l \boldsymbol{g}^l \tag{2.22}$$

Vetu dokážeme indukciou vzhľadom na l (súčasne všetky tri vzťahy).

1° Nech $l = 1$, $j = 0$, $i = 1$. Vzťahy (2.18) a (2.19) platia triviálne z (2.11), resp. z (2.21). Keďže $\boldsymbol{g}^0 \neq \boldsymbol{0}_n$, tak podľa lemy 2.10 možno vzťahmi (2.14), (2.15) korektne skonštruovať kladne definitnú maticu $\boldsymbol{H}_1$. Postupným použitím vzťahov (2.13), (2.22), (2.11), (2.21) počítajme: $\boldsymbol{p}^{0\,\mathrm{T}} \boldsymbol{G} \boldsymbol{p}^1 = \boldsymbol{y}^{0\,\mathrm{T}} \boldsymbol{p}^1 = -\lambda_1 \boldsymbol{y}^{0\,\mathrm{T}} \boldsymbol{H}_1 \boldsymbol{g}^1 = -\lambda_1 \boldsymbol{p}^{0\,\mathrm{T}} \boldsymbol{g}^1 = 0$. Tým je 1° dokázaná.

2° Indukčný predpoklad: nech sú tvrdenia (2.18), (2.19), (2.20) platné pre $1 \le l < k$.

3° Overme platnosť (2.18), (2.19), (2.20) pre $l+1 \le k$.

a) Keďže $\boldsymbol{g}^l \neq \boldsymbol{0}_n$, tak podľa lemy 2.10 možno vzťahmi (2.14), (2.15) korektne skonštruovať kladne definitnú maticu $\boldsymbol{H}_{l+1}$. Z (2.11) pre $j = l$ triviálne platí $\boldsymbol{H}_{l+1} \boldsymbol{y}^j = \boldsymbol{p}^j$. Využijúc (2.14), (2.15), a indukčný predpoklad o (2.18) pre $0 \le j < l$ počítajme:

$$\boldsymbol{H}_{l+1} \boldsymbol{y}^j = \boldsymbol{p}^j + \boldsymbol{p}^l \frac{\boldsymbol{p}^{l\,\mathrm{T}} \boldsymbol{y}^j}{\boldsymbol{p}^{l\,\mathrm{T}} \boldsymbol{y}^l} - \boldsymbol{H}_l \boldsymbol{y}^l \frac{\boldsymbol{y}^{l\,\mathrm{T}} \boldsymbol{p}^j}{\boldsymbol{y}^{l\,\mathrm{T}} \boldsymbol{H}_l \boldsymbol{y}^l} + \Phi_l\, (\boldsymbol{y}^{l\,\mathrm{T}} \boldsymbol{H}_l \boldsymbol{y}^l) \boldsymbol{w}^l \left(\frac{\boldsymbol{p}^{l\,\mathrm{T}} \boldsymbol{y}^j}{\boldsymbol{p}^{l\,\mathrm{T}} \boldsymbol{y}^l} - \frac{\boldsymbol{y}^{l\,\mathrm{T}} \boldsymbol{p}^j}{\boldsymbol{y}^{l\,\mathrm{T}} \boldsymbol{H}_l \boldsymbol{y}^l} \right) =$$

$$=_{[(2.13)]}= \boldsymbol{p}^j + \boldsymbol{p}^l \frac{\boldsymbol{p}^{l\,\mathrm{T}} \boldsymbol{G} \boldsymbol{p}^j}{\boldsymbol{p}^{l\,\mathrm{T}} \boldsymbol{y}^l} - \boldsymbol{H}_l \boldsymbol{y}^l \frac{\boldsymbol{p}^{l\,\mathrm{T}} \boldsymbol{G} \boldsymbol{p}^j}{\boldsymbol{y}^{l\,\mathrm{T}} \boldsymbol{H}_l \boldsymbol{y}^l} + \Phi_l\, (\boldsymbol{y}^{l\,\mathrm{T}} \boldsymbol{H}_l \boldsymbol{y}^l) \boldsymbol{w}^l \left(\frac{\boldsymbol{p}^{l\,\mathrm{T}} \boldsymbol{G} \boldsymbol{p}^j}{\boldsymbol{p}^{l\,\mathrm{T}} \boldsymbol{y}^l} - \frac{\boldsymbol{p}^{l\,\mathrm{T}} \boldsymbol{G} \boldsymbol{p}^j}{\boldsymbol{y}^{l\,\mathrm{T}} \boldsymbol{H}_l \boldsymbol{y}^l} \right) = \boldsymbol{p}^j.$$

Pritom pri poslednej rovnosti sme využili indukčný predpoklad o (2.20).

b) Z (2.21) pre $j = l$ triviálne platí $\boldsymbol{g}^{(l+1)\mathrm{T}} \boldsymbol{p}^j = 0$.

Postupne využijúc indukčný predpoklad o (2.19), vzťah (2.13) a indukčný predpoklad o (2.20) pre $0 \le j < l$ počítajme: $\boldsymbol{g}^{(l+1)\mathrm{T}} \boldsymbol{p}^j = (\boldsymbol{g}^l + \boldsymbol{y}^l)^{\mathrm{T}} \boldsymbol{p}^j = \boldsymbol{y}^{l\,\mathrm{T}} \boldsymbol{p}^j = \boldsymbol{p}^{l\,\mathrm{T}} \boldsymbol{G} \boldsymbol{p}^j = 0$.

c) Pre $0 \le j < i = l+1$ počítajme: $\boldsymbol{p}^{j\,\mathrm{T}} \boldsymbol{G} \boldsymbol{p}^i = \boldsymbol{p}^{j\,\mathrm{T}} \boldsymbol{G} \boldsymbol{p}^{l+1} =_{[(2.13)]}= \boldsymbol{y}^{j\,\mathrm{T}} \boldsymbol{p}^{l+1} =_{[(2.22)]}=$

$= -\lambda_{l+1} \boldsymbol{y}^{j\,\mathrm{T}} \boldsymbol{H}_{l+1} \boldsymbol{g}^{l+1} = -\lambda_{l+1} \boldsymbol{p}^{j\,\mathrm{T}} \boldsymbol{g}^{l+1} = 0$. Pritom pri posledných dvoch rovnostiach sme využili už dokázané vzťahy (2.18), (2.19). ■

Z definície 2.7, vety 2.9 a vety 2.11 vyplýva pre kvadratickú funkciu (2.12) n-kroková konvergencia Broydenovho algoritmu (s optimálnou dĺžkou kroku).

2.6. Cieľ diplomovej práce

Nedostatkom kvázinewtonovských metód je počítanie optimálnej dĺžky kroku v každej iterácii (čím sa pre kvadratickú funkciu zaručuje n-kroková konvergencia algoritmu).

V diplomovej práci sa zameriame na podrobnú analýzu (z literatúri známych) štyroch kvázinewtonovských metód s konštantnou dĺžkou kroku, ktoré pre kvadratickú funkciu zaručujú (n+1)- krokovú konvergenciu optimalizačného algoritmu.

3. SR1 - metóda

Odvodenie tejto formule je elementárne. Totiž každá symetrická $\Delta \boldsymbol{H}$ matica hodnosti jedna, sa dá vo všeobecnosti zapísať v tvare: $\Delta \boldsymbol{H} = \alpha \boldsymbol{a}\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}$, kde α je nenulový skalár a $\boldsymbol{a}$ je nenulový vektor z R^{n}. Keďže sa jedná o kvázinewtonovskú formulu, musí byť splnená kvázinewtonovská podmienka (2.11), t.j. musí platiť: $\Delta \boldsymbol{H}\boldsymbol{y} = \boldsymbol{r}$ (používame označenia z časti 2.5.). Avšak $\Delta \boldsymbol{H}\boldsymbol{y} = \alpha(\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y})\boldsymbol{a}$, odtiaľ dostávame: $\alpha(\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y})\boldsymbol{a} = \boldsymbol{r}$. Keďže máme istú voľnosť vo voľbe skalára α, tak možno zvoliť $\boldsymbol{a} = \boldsymbol{r}$, z čoho následne máme $\alpha(\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}) = \alpha(\boldsymbol{r}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}) = 1$. Zrejme, ak $\boldsymbol{r}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} \neq 0$, potom $\alpha = \dfrac{1}{\boldsymbol{r}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}}$. Dostávame tak SR1-formulu:

$$\boldsymbol{H}_{+} = \boldsymbol{H} + \frac{\boldsymbol{r}\boldsymbol{r}^{\mathrm{T}}}{\boldsymbol{r}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}}\text{, (resp. } \Delta \boldsymbol{H}_{SR1} = \frac{\boldsymbol{r}\boldsymbol{r}^{\mathrm{T}}}{\boldsymbol{r}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}} \Leftrightarrow \boldsymbol{H}_{+} = \boldsymbol{H} + \frac{(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{H}\boldsymbol{y})(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{H}\boldsymbol{y})^{\mathrm{T}}}{(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{H}\boldsymbol{y})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}}\text{)} \tag{3.1}$$

Ešte si premyslime, či by aj v prípade, keď $\boldsymbol{r}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} = 0$, existovala nejaká kvázinewtonovská symetrická formula hodnosti najviac jedna. Z predchádzajúcej analýzi je zrejmé, že by muselo platiť $\alpha(\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y})\boldsymbol{a} = \boldsymbol{r}$, z čoho máme: $0 = \boldsymbol{r}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} = \alpha(\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y})(\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y})$. Odtiaľ vyplýva $\alpha(\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}) = 0$, a spätným dosadením do $\alpha(\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y})\boldsymbol{a} = \boldsymbol{r}$ dostávame, že by muselo platiť: $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{0}_n$. Preto ak $\boldsymbol{r}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} = 0$ a $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{0}_n$, tak každý vekor $\boldsymbol{a}$ a každý skalár α, pre ktoré platí $\alpha(\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}) = 0$, sú vhodné. Obyčajne v prípade, keď $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{0}_n$, volíme $\boldsymbol{H}_{+} = \boldsymbol{H}$. Ak by však $\boldsymbol{r}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} = 0$ a $\boldsymbol{r} \neq \boldsymbol{0}_n$, potom z predchádzajúcich úvah vidno, že SR1-formula neexistuje.

Žiaľ nemožno garantovať "dostatočnú veľkosť " menovateľa $\boldsymbol{r}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}$ (dokonca môže byť nulový, vtedy formula (3.1) nie je korektná), preto je formula (3.1) numericky nestabilná. Naviac nemožno zaručiť ani $\boldsymbol{r}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} > 0$ a vtedy (aj napriek kladnej definitnosti matice $\boldsymbol{H}$) nemusí byť matica $\boldsymbol{H}_{+}$ kladne definitná. Totiž pre kladne definitnú maticu $\boldsymbol{H}$ máme:

$$\det(\boldsymbol{H}_{+}) = \left(1 + \frac{\boldsymbol{r}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{H}^{-1}\boldsymbol{r}}{\boldsymbol{r}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}}\right).\det(\boldsymbol{H}), \tag{3.2}$$

a ak $\boldsymbol{r}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} < 0$, tak tento determinant nemusí byť kladný (vzťah dokážeme použitím nasledovnej lemy).

Lema 3.1:

<u>Majme</u> $n \times n$ maticu $\boldsymbol{M} = \boldsymbol{I}_n + \beta \boldsymbol{b}\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}$, kde β je nenulový skalár a $\boldsymbol{0}_n \neq \boldsymbol{b} \in R^{n}$.

<u>Potom</u> vlastné čísla matice $\boldsymbol{M}$ sú: $\lambda_1 = \ldots = \lambda_{n-1} = 1$ a $\lambda_n = (1+\beta \boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b})$.

Dôkaz: Zrejme existujú lineárne nezávislé vektory $\boldsymbol{v}^1, \boldsymbol{v}^2, \dots, \boldsymbol{v}^{n-1} \in R^n$ kolmé na $\boldsymbol{b}$. Potom $\boldsymbol{M}\boldsymbol{v}^j = \boldsymbol{v}^j + \beta(\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}^j)\boldsymbol{b} = \boldsymbol{v}^j + \beta.0.\boldsymbol{b} = \boldsymbol{v}^j$, pre $j = 1, 2, \dots, n$-1. Teda $\boldsymbol{v}^j$ sú vlastné vektory matice $\boldsymbol{M}$ a príslušné vlastné čísla $\lambda_1, \dots, \lambda_{n-1}$ sú jednotkové. Ďalej $\boldsymbol{M}\boldsymbol{b} = \boldsymbol{b} + \beta(\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b})\boldsymbol{b} = (1+\beta\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b})\boldsymbol{b}$, z čoho vyplýva, že $\boldsymbol{b}$ je n-tý vlastný vektor matice $\boldsymbol{M}$ a prislúchajúce vlastné číslo je $\lambda_n = (1+\beta\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b})$. ■

Poznámka: (dôkaz vzťahu (3.2))

Z kladnej definitnosti $\boldsymbol{H}$ a z (3.1) máme: $\boldsymbol{H}^{-\frac{1}{2}}\boldsymbol{H}_+\boldsymbol{H}^{-\frac{1}{2}} = \boldsymbol{I}_n + \frac{1}{\boldsymbol{r}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}}.\boldsymbol{H}^{-\frac{1}{2}}\boldsymbol{r}\boldsymbol{r}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{H}^{-\frac{1}{2}}$. Z lemy 3.1 dostávame: $\left(1+\frac{\boldsymbol{r}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{H}^{-1}\boldsymbol{r}}{\boldsymbol{r}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}}\right) = 1+\frac{\boldsymbol{r}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{H}^{-\frac{1}{2}}\boldsymbol{H}^{-\frac{1}{2}}\boldsymbol{r}}{\boldsymbol{r}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}} = \det(\boldsymbol{H}^{-\frac{1}{2}}\boldsymbol{H}_+\boldsymbol{H}^{-\frac{1}{2}}) = \det(\boldsymbol{H}_+).\det(\boldsymbol{H})^{-1}$.

Pritom sme využili, že determinant matice je rovný súčinu všetkých jej vlastných čísel. ■

Napriek spomínaným nevýhodám SR1-formule (možná numerická nestabilita a nemožnosť garantovania kladnej definitnosti matce $\boldsymbol{H}_{k+1}$) ukážeme, že pri jej "úspešnej" (tento pojem zahŕňa druhý a piaty predpoklad nasledujúcej vety) aplikácii na kvadratickú funkciu (2.12) dostávame: $\boldsymbol{H}_n = \boldsymbol{G}^{-1}$. Pritom tento výsledok nezávisí od použitých dĺžiek krokov $\lambda_0, \dots, \lambda_{n-1}$.

Veta 3.2:

Nech sú dané:
- kvadratická funkcia (2.12)
- lineárne nezávislé vektory $\boldsymbol{p}^0, \dots, \boldsymbol{p}^{n-1} \in R^n$
- vektory $\boldsymbol{y}^k = \boldsymbol{G}\boldsymbol{p}^k$ ($k = 0, \dots, n$-1)
- postupnosť $n \times n$ matíc $\boldsymbol{H}_k$ definovaná vzťahom (3.1) pre $k = 1, \dots, n$, pričom $\boldsymbol{H}_0$ je ľubovoľná symetrická $n \times n$ matica
- vektory $\boldsymbol{r}^k = \boldsymbol{p}^k - \boldsymbol{H}_k\boldsymbol{y}^k$ ($k = 0, \dots, n$-1), o ktorých predpokladáme $(\boldsymbol{r}^{k\mathrm{T}}\boldsymbol{y}^k) \neq 0$, aby boli matice $\boldsymbol{H}_{k+1}$ korektne definované.

Potom platí: $\boldsymbol{H}_n = \boldsymbol{G}^{-1}$.

Dôkaz: Uvedomme si, že tretí predpoklad je vlastne vzťah (2.13), ktorý vyplýva zo vzťahu (2.12). Najskôr indukciou dokážeme, že pre pevne zvolené $j \in \{1, \ldots, n\}$, a pre $k = 0, \ldots, j\text{-}1$ platí: $\boldsymbol{H}_j \boldsymbol{y}^k = \boldsymbol{p}^k$.

Indukcia vzhľadom na j.

1° Nech $j = 1$, $k = 0$. Zo vzťahu (3.1) vyplýva: $\boldsymbol{H}_1 \boldsymbol{y}^0 = \boldsymbol{p}^0$.

2° Indukčný predpoklad: nech pre $1 \leq j < n$, a pre $k = 0, \ldots, j\text{-}1$ platí: $\boldsymbol{H}_j \boldsymbol{y}^k = \boldsymbol{p}^k$.

3° Overme platnosť: $\boldsymbol{H}_{j+1} \boldsymbol{y}^k = \boldsymbol{p}^k$, pre $k = 0, 1, \ldots, j$, kde $1 \leq j+1 \leq n$.

Z (3.1) pre $k = j$ triviálne platí: $\boldsymbol{H}_{k+1} \boldsymbol{y}^k = \boldsymbol{p}^k$.

Ďalej nech $0 \leq k < j$. Z (3.1) a 2° máme: $\boldsymbol{H}_{j+1} \boldsymbol{y}^k = \boldsymbol{H}_j \boldsymbol{y}^k + \dfrac{\boldsymbol{r}^{j\mathrm{T}} \boldsymbol{y}^k}{\boldsymbol{r}^{j\mathrm{T}} \boldsymbol{y}^j} \boldsymbol{r}^j =$

$$= \boldsymbol{p}^k + \frac{\boldsymbol{y}^{k\,\mathrm{T}} (\boldsymbol{p}^j - \boldsymbol{H}_j \boldsymbol{y}^j)}{\boldsymbol{r}^{j\mathrm{T}} \boldsymbol{y}^j} \boldsymbol{r}^j =_{[2°,\,(2.13)]}= \boldsymbol{p}^k + \frac{\boldsymbol{p}^{k\mathrm{T}} \boldsymbol{G} \boldsymbol{p}^j - \boldsymbol{p}^{k\mathrm{T}} \boldsymbol{G} \boldsymbol{p}^j}{\boldsymbol{r}^{j\mathrm{T}} \boldsymbol{y}^j} \boldsymbol{r}^j = \boldsymbol{p}^k.$$

Tým je indukcia úplná.

Odtiaľ pre $k = 0, \ldots, n\text{-}1$ platí: $\boldsymbol{H}_n \boldsymbol{y}^k = \boldsymbol{p}^k$. To podľa (2.13) znamená: $\boldsymbol{H}_n \boldsymbol{G} \boldsymbol{p}^k = \boldsymbol{p}^k$. Ale podľa predpokladu sú $\boldsymbol{p}^0, \ldots, \boldsymbol{p}^{n-1}$ lineárne nezávislé vektory v R^n, preto matica $\boldsymbol{P}$, ktorej stĺpce pozostávajú z vektorov $\boldsymbol{p}^k$, je regulárna $n \times n$ matica a platí:

$\boldsymbol{H}_n \boldsymbol{G} \boldsymbol{P} = \boldsymbol{P} \quad \Rightarrow \quad \boldsymbol{H}_n \boldsymbol{G} = \boldsymbol{I}_n \quad \Rightarrow \quad \boldsymbol{H}_n = \boldsymbol{G}^{-1}$. ■

Z uvedenej vety vyplýva, že ak algoritmom 1 (pričom v kroku 6 je $\boldsymbol{H}_{k+1}$ generovaná vzťahom (3.1)) s kvadratickou funkciou (2.12) vykonáme n "úspešných" iterácií s "jednotkovými krokmi" $\lambda_k = 1$, tak v $(n+1)$-vej iterácii máme k dispozícii newtonovský smer $\boldsymbol{s}^n = -\boldsymbol{G}^{-1} \boldsymbol{g}^n$. Potom pri voľbe $\lambda_n = 1$, je táto $(n+1)$-vá iterácia newtonovská, a teda určuje minimum kvadratickej funkcie (2.12) (pozri tiež časť 2.4.).

4. Davidonova metóda

V Broydenovej triede kvázinewtonovských formúl sa pre transformáciu matice $\boldsymbol{H}$ na $\boldsymbol{H}_+$ využívajú vektory $\boldsymbol{p}$ a $\boldsymbol{y}$. Davidon dokázal, že na tento účel nie je nevyhnutné používať vektory $\boldsymbol{p}$ a $\boldsymbol{y}$, ale existuje celá množina dvojíc vektorov $\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b} \in R^n$, ktoré na to možno použiť, pričom bude stále zachovaná platnosť kvázinewtonovskej podmienky $\boldsymbol{H}_+ \boldsymbol{y} = \boldsymbol{p}$. Nakoniec Davidon použitím projekcií vektorov $\boldsymbol{p}$ a $\boldsymbol{y}$ vytvoril akúsi zovšeobecnenú SR1 formulu, ktorá odstraňuje oba nedostatky pôvodnej SR1 formule (t.j. numerickú nestabilitu a možnú indefinitnosť matice $\boldsymbol{H}_+$). Pritom aj táto Davidonova formula zachováva $(n+1)$-krokovú konvergenciu pri aplikácii algoritmu (s konštantnou dĺžkou kroku) na kvadratickú funkciu.

Teraz zavedieme niektoré označenia.

Nech $\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B}$ sú dve matice s rovnakým počtom riadkov, potom:

- $[\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B}]$ je matica pozostávajúcu zo stĺpcov matice $\boldsymbol{A}$ nasledovaných stĺpcami matice $\boldsymbol{B}$.
- $\boldsymbol{B}|\boldsymbol{A}$ označuje, že priestor generovaný stĺpcami matice $\boldsymbol{A}$ je podpriestorom priestoru generovaného stĺpcami matice $\boldsymbol{B}$. Zrejme :

$$\{ \boldsymbol{B}|\boldsymbol{A} \} \Leftrightarrow \{ \text{existuje matica } \boldsymbol{M} \text{ taká, že platí: } \boldsymbol{A} = \boldsymbol{BM} \}.$$

- $\boldsymbol{B}\|\boldsymbol{A}$ označuje, že platí $\boldsymbol{B}|\boldsymbol{A}$ a $\boldsymbol{A}|\boldsymbol{B}$. Špeciálne (pre jednostĺpcové matice):
  $\boldsymbol{u}\|\boldsymbol{v}$ pre $\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v} \in R^n$ označuje, že existuje číslo $\lambda \neq 0$ také, že platí: $\boldsymbol{v} = \lambda \boldsymbol{u}$.
- $\boldsymbol{A} \geq 0$ označuje symetrickú, kladne semidefinitnú štvorcovú maticu $\boldsymbol{A}$.
- $\boldsymbol{A} > 0$ označuje symetrickú, kladne definitnú štvorcovú maticu $\boldsymbol{A}$.

Lema 4.1: (vlastnosti symbolu " | ")

a) $(\boldsymbol{A}|\boldsymbol{B}$ a $\boldsymbol{B}|\boldsymbol{C}) \Rightarrow \boldsymbol{A}|\boldsymbol{C}$.

b) $\boldsymbol{A}|\boldsymbol{B} \Rightarrow \boldsymbol{CA}|\boldsymbol{CB}$ pre každú maticu $\boldsymbol{C}$.

c) $\boldsymbol{CA}|\boldsymbol{CB} \Rightarrow \boldsymbol{A}|\boldsymbol{B}$ pre každú regulárnu maticu $\boldsymbol{C}$.

Dôkaz: a) $\boldsymbol{A}|\boldsymbol{B} \Rightarrow$ existuje matica $\boldsymbol{M}_1$ taká, že $\boldsymbol{B} = \boldsymbol{AM}_1$. $\boldsymbol{B}|\boldsymbol{C} \Rightarrow$ existuje matica $\boldsymbol{M}_2$ taká, že $\boldsymbol{C} = \boldsymbol{BM}_2$. Teda máme: $\boldsymbol{C} = \boldsymbol{BM}_2 = \boldsymbol{AM}_1\boldsymbol{M}_2 = \boldsymbol{AM}$, kde $\boldsymbol{M} = \boldsymbol{M}_1\boldsymbol{M}_2$. Odtiaľ: $\boldsymbol{A}|\boldsymbol{C}$.

b) $\boldsymbol{A}|\boldsymbol{B} \Rightarrow$ existuje matica $\boldsymbol{M}$ taká, že $\boldsymbol{B} = \boldsymbol{AM}$. Po prenásobení maticou $\boldsymbol{C}$ zľava máme: $\boldsymbol{CB} = \boldsymbol{CAM} \Rightarrow \boldsymbol{CA}|\boldsymbol{CB}$.

c) $\boldsymbol{CA}|\boldsymbol{CB} \Rightarrow$ existuje matica $\boldsymbol{M}$ taká, že $\boldsymbol{CB} = \boldsymbol{CAM}$. Po prenásobení maticou $\boldsymbol{C}^{-1}$ zľava dostávame: $\boldsymbol{B} = \boldsymbol{AM} \Rightarrow \boldsymbol{A}|\boldsymbol{B}$. ■

Poznámka: V predchádzajúcich úvahách sme predpokladali, že príslušné matice majú vhodné rozmery, aby dané výrazy a použité operácie mali zmysel. Vo všetkých nasledujúcich častiach a kapitolách budeme používať označenia z časti 2.5.

Veta 4.2:

Nech sú dané: • symetrická, kladne definitná $n\times n$ matica $\boldsymbol{H}$, t.j. $\boldsymbol{H} > 0$

• vektory $\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b} \in R^n$, pričom $\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b} > 0$.

Potom pre symetrickú $n\times n$ maticu $\boldsymbol{H}_+ = \boldsymbol{H} + \Delta\boldsymbol{H}$ platí nasledujúca ekvivalencia:

$$\left\{ \begin{array}{lr} \boldsymbol{H}_+\boldsymbol{b} = \boldsymbol{a} & (4.1) \\ [\boldsymbol{Hb}, \boldsymbol{a}] \,|\, \Delta\boldsymbol{H} & (4.2) \end{array} \right\}$$

$$\Leftrightarrow$$

$$\left\{ \begin{array}{llr} \text{Pre nejaké } \Phi \in R \text{ platí :} & & \\ & \boldsymbol{H}_+ = \boldsymbol{H} + \dfrac{\boldsymbol{aa}^{\mathrm{T}}}{\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}} - \dfrac{\boldsymbol{Hbb}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{H}}{\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Hb}} + \Phi(\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Hb})\boldsymbol{vv}^{\mathrm{T}}, & (4.3) \\ \text{kde} & \boldsymbol{v} = \dfrac{\boldsymbol{a}}{\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}} - \dfrac{\boldsymbol{Hb}}{\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Hb}}. & (4.4) \end{array} \right\}$$

Ak sú navyše vektory $\boldsymbol{a}$, $\boldsymbol{Hb}$ lineárne nezávislé, potom $\boldsymbol{H}_+$ je kladne definitná matica práve vtedy, keď:

$$\Phi > \frac{(\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b})^2}{(\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b})^2 - (\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Hb})(\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{H}^{-1}\boldsymbol{a})}.$$

Dôkaz: Z $\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b} > 0$ vyplýva: $\boldsymbol{a} \neq \boldsymbol{0}_n$ a $\boldsymbol{b} \neq \boldsymbol{0}_n$. To spolu s $\boldsymbol{H} > 0$ dáva $\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Hb} > 0$ a $\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{H}^{-1}\boldsymbol{a} > 0$. Implikácia $\Leftarrow$ je triviálna. Budeme teda dokazovať len $\Rightarrow$ implikáciu.

Z (4.2) a symetrie máme, že $\Delta\boldsymbol{H} = \boldsymbol{H}_+ - \boldsymbol{H} = \alpha\boldsymbol{aa}^{\mathrm{T}} + \beta(\boldsymbol{Hba}^{\mathrm{T}} + \boldsymbol{ab}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{H}) + \delta\boldsymbol{Hbb}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{H}$, pre nejaké $\alpha, \beta, \delta \in R$. Po prenásobení tejto rovnice vektorom $\boldsymbol{b}$ sprava dostávame:

$$\boldsymbol{H}_+\boldsymbol{b} - \boldsymbol{Hb} = \alpha(\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b})\boldsymbol{a} + \beta(\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b})\boldsymbol{Hb} + \beta(\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Hb})\boldsymbol{a} + \delta(\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Hb})\boldsymbol{Hb}.$$

Teraz zo (4.1) máme, že skaláre α, β, δ musia vyhovovať sústave rovníc:

$$\underline{\begin{array}{l} 1 = \alpha(\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}) + \beta(\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Hb}) \\ -1 = \beta(\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}) + \delta(\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Hb}) \end{array}}$$, ktorú dostaneme porovnaním koeficientov pri $\boldsymbol{a}$ a $\boldsymbol{Hb}$.

Ak zavedieme substitúciu: $\beta = -\dfrac{\Phi}{(\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b})}$, kde $\Phi \in R$, potom možno pomocou Φ vyjadriť aj koeficienty α a δ. Presnejšie: $\alpha = \dfrac{\Phi(\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Hb}) + (\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b})}{(\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b})^2}$, $\delta = \dfrac{\Phi - 1}{(\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Hb})}$. Po dosadení (a úprave) do prvej rovnice v tomto dôkaze dostávame (4.3) a (4.4).

Dôkaz podmienky kladenej na Φ je možné nájsť v [1], strany 253 až 257. ■

Všimnime si, že vzťah (4.1) svojou štruktúrou pripomína kvázinewtonovskú podmienku (2.11), a vzťahy (4.3), (4.4) zasa Broydenovu triedu (2.14), (2.15). Nasledujúca veta dokazuje, že vo vete 4.2 nemusíme nutne použiť vektory $\boldsymbol{a} = \boldsymbol{p}$ a $\boldsymbol{b} = \boldsymbol{y}$ na to, aby bola splnená kvázinewtonovská podmienka (2.11). Budeme sa snažiť o takú voľbu vektorov $\boldsymbol{a}$, $\boldsymbol{b}$, aby bola splnená podmienka (2.11), a aby algoritmus s konštantnou dĺžkou kroku zachovával $(n+1)$-krokovú konvergenciu pre kvadratickú funkciu.

Veta 4.3:

Nech sú dané: • symetrická, kladne definitná $n \times n$ matica $\boldsymbol{H}$, t.j. $\boldsymbol{H} > 0$

• $\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}, \boldsymbol{p}, \boldsymbol{y} \in R^n$, pre ktoré platí:

$$\boldsymbol{a} - \boldsymbol{Hb} = \boldsymbol{p} - \boldsymbol{Hy} \tag{4.5}$$

$$\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b} = \boldsymbol{p}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b} = \boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} > 0. \tag{4.6}$$

Potom pre všetky $\Phi \in R$ matica $\boldsymbol{H}_+ = \boldsymbol{H} + \Delta\boldsymbol{H}$ tvaru (4.3), (4.4) spĺňa kvázinewtonovskú podmienku (2.11). Navyše existuje $\Phi \in R$ také, že je matica $\boldsymbol{H}_+$ kladne definitná.

Dôkaz: Prenásobením vzťahu (4.5) vektorom $\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}$ zľava dostávame:

$$\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{H}(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{b}) = \boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{p} - \boldsymbol{a}) =_{[(4.6)]}= \boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{b}) =_{[(4.6)]}= 0. \tag{4.7}$$

Z (4.3) máme:

$$\Delta\boldsymbol{H}(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{b}) = \frac{\boldsymbol{aa}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{b})}{\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{a}} - \frac{\boldsymbol{Hbb}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{H}(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{b})}{\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Hb}} + \Phi(\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Hb})\boldsymbol{vv}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{b}) =_{[(4.4),\,(4.7)]}= \boldsymbol{0}_n.$$

To spolu s $\boldsymbol{H}_+ = \boldsymbol{H} + \Delta\boldsymbol{H}$ dáva: $\boldsymbol{H}_+\boldsymbol{y} = \boldsymbol{Hy} + \boldsymbol{H}_+\boldsymbol{b} - \boldsymbol{Hb} =_{[(4.1)]}= \boldsymbol{Hy} + \boldsymbol{a} - \boldsymbol{Hb} =_{[(4.5)]}= \boldsymbol{p}$.

Pre lineárne nezávislé vektory $\boldsymbol{a}$ a $\boldsymbol{Hb}$ stačí zvoliť napr. $\Phi = 0$, potom podmienka na Φ z vety 4.2 je (v dôsledku Cauchy-Schwartzovej nerovnosti) splnená, a teda $\boldsymbol{H}_+ > 0$.

Ak $\boldsymbol{a}$ a $\boldsymbol{Hb}$ sú lineárne závislé vektory, potom existuje číslo η také, že $\boldsymbol{a} = \eta\boldsymbol{Hb}$. Dosadením do $\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b} > 0$ dostávame $\eta > 0$ (Totiž z $\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b} > 0$ vyplýva $\boldsymbol{b} \neq \boldsymbol{0}_n$, čo spolu s $\boldsymbol{H} > 0$ dáva $\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Hb} > 0$). Potom z (4.3) a (4.4) vyplýva, že pre všetky voľby parametra $\Phi \in R$ platí:

$\boldsymbol{H}_+ = \boldsymbol{H} + (\eta - 1)\ \dfrac{\boldsymbol{Hbb}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{H}}{(\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Hb})}$. Po úprave: $\boldsymbol{H}^{-\frac{1}{2}}\boldsymbol{H}_+\boldsymbol{H}^{-\frac{1}{2}} = \boldsymbol{I}_n + \dfrac{\eta - 1}{\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Hb}}\boldsymbol{H}^{\frac{1}{2}}\boldsymbol{bb}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{H}^{\frac{1}{2}}$.

Odtiaľ je zrejmé, že matica $\boldsymbol{H}_+$ je kladne definitná práve vtedy, keď je kladne definitná aj matica na pravej strane rovnice, a to je podľa lemy 3.1 práve vtedy, keď $\eta > 0$. Avšak táto podmienka je splnená, preto je $\boldsymbol{H}_+$ kladne definitná. Tým sme dokázali, že bez ohľadu na to, či sú vektory $\boldsymbol{a}$ a $\boldsymbol{Hb}$ lineárne závislé, alebo nie, ak platí $\boldsymbol{H} > 0$ a $\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b} > 0$, potom sa z formúl (4.3), (4.4) vždy dá skonštruovať kladne definitná matica $\boldsymbol{H}_+$. ■

Pripomíname, že $\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b} > 0$ je aj nutnou (nie len postačujúcou) podmienkou na to, aby $\boldsymbol{H}_+$ z (4.3) a (4.4) bola kladne definitná. Totiž $\boldsymbol{H}_+\boldsymbol{b} = \boldsymbol{a} \Rightarrow \boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b} = \boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{H}_+\boldsymbol{b}$. A ak je $\boldsymbol{b} \neq \boldsymbol{0}_n$, tak pre kladne definitnú maticu $\boldsymbol{H}_+$ musí platiť $\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{H}_+\boldsymbol{b} > 0$.

Zo vzťahu (4.5) vyplýva, že zadaním jedného z vektorov $\boldsymbol{a}$, $\boldsymbol{b}$ je ten druhý jednoznačne určený. Takže s ďalšími dvoma rovnicami v (4.6) máme (n-2)-rozmerný priestor dvojíc vektorov $\boldsymbol{a}$, $\boldsymbol{b}$, ktoré spĺňajú vzťahy (4.5) a (4.6). Dôkaz vety 4.6 (ktorú uvádzame neskôr) dáva aj návod na konštrukciu vhodných vektorov $\boldsymbol{a}$, $\boldsymbol{b}$, a to tak, že pomocou vhodnej projekčnej matice $\boldsymbol{P}$ sprojektujeme vektory $\boldsymbol{p}$ a $\boldsymbol{y}$.

Skôr, ako vyslovíme vetu 4.6, pripomeňme niektoré pojmy a vlastnosti projekčných matíc. Budeme používať nasledovné **označenia**:

- $\mathcal{R}(\boldsymbol{A}) = \{\, \boldsymbol{t} \in R^m \mid \boldsymbol{Az} = \boldsymbol{t}, \boldsymbol{z} \in R^n \,\}$ je obraz zobrazenia určeného $m \times n$ maticou $\boldsymbol{A}$
- $\mathcal{N}(\boldsymbol{A}) = \{\, \boldsymbol{z} \in R^n \mid \boldsymbol{Az} = \boldsymbol{0}_m \,\}$ je nulový priestor (jadro) zobrazenia určeného $m \times n$ maticou $\boldsymbol{A}$
- $\mathcal{L}(\boldsymbol{a}^1, \boldsymbol{a}^2, ..., \boldsymbol{a}^m)$ označuje lineárny obal vektorov $\boldsymbol{a}^1, \boldsymbol{a}^2, ..., \boldsymbol{a}^m \in R^n$.

Lema 4.4:

Nech $\boldsymbol{q}, \boldsymbol{s} \in R^n$, a nech pre $n \times n$ maticu $\boldsymbol{P}$ platí: $\boldsymbol{P}^2 = \boldsymbol{P}$ (t.j. $\boldsymbol{P}$ je projektor).

Potom platí: I. $\boldsymbol{Pq} = \boldsymbol{q} \Leftrightarrow \boldsymbol{q} \in \mathcal{R}(\boldsymbol{P})$.

II. $\boldsymbol{Ps} = \boldsymbol{0}_n \Leftrightarrow \boldsymbol{s} \in \mathcal{N}(\boldsymbol{P})$.

Dôkaz: Označme i-ty stĺpec matice $\boldsymbol{P}$ vektorom $\boldsymbol{c}^i$, $i = 1, ..., n$.

Potom $[\boldsymbol{c}^1, ..., \boldsymbol{c}^n] = \boldsymbol{P}$, $\boldsymbol{PP} = [\boldsymbol{Pc}^1, ..., \boldsymbol{Pc}^n]$. Následne z $\boldsymbol{P}^2 = \boldsymbol{P}$ pre $i = 1, ..., n$ máme:

$$\boldsymbol{Pc}^i = \boldsymbol{c}^i.$$

Ďalej pre ľubovoľné $\boldsymbol{z} \in R^n$ označme: $\boldsymbol{t} = \boldsymbol{Pz} = z_1.\boldsymbol{c}^1 + ... + z_n.\boldsymbol{c}^n$, kde z_i je i-ta zložka vektora $\boldsymbol{z}$. Vidno, že $\boldsymbol{t}$ je lineárnou kombináciou stĺpcov matice $\boldsymbol{P}$. Navyše $\boldsymbol{z}$ prebieha celé R^n, a teda z_i prebieha celé R. Z toho je zrejmé, že $\mathcal{R}(\boldsymbol{P}) = \mathcal{L}(\boldsymbol{c}^1, ..., \boldsymbol{c}^n)$. Preto:

$$\boldsymbol{q} \in \mathcal{R}(\boldsymbol{P}) \Leftrightarrow \boldsymbol{q} \text{ je lineárnou kombináciou stĺpcov matice } \boldsymbol{P}.$$

I. ($\Rightarrow$) Označme q_i ako i-tu zložku vektora $\boldsymbol{q}$. Potom $\boldsymbol{Pq} = \sum_{i=1}^{n} q_i \boldsymbol{c}^i$ (t.j. $\boldsymbol{Pq}$ je lineárna kombinácia vektorov $\boldsymbol{c}^1, ..., \boldsymbol{c}^n$), a preto $\boldsymbol{Pq} \in \mathcal{R}(\boldsymbol{P})$. Avšak $\boldsymbol{Pq} = \boldsymbol{q}$, a tak aj $\boldsymbol{q} \in \mathcal{R}(\boldsymbol{P})$.

($\Leftarrow$) Ak $\boldsymbol{q} \in \mathcal{R}(\boldsymbol{P})$, potom $\boldsymbol{q}$ je lineárnou kombináciou vektorov $\boldsymbol{c}^1, ..., \boldsymbol{c}^n$. Preto $\exists\, \alpha_i \in R$, $i = 1, ..., n$, také, že $\boldsymbol{q} = \alpha_1.\boldsymbol{c}^1 + ... + \alpha_n.\boldsymbol{c}^n$. Odtiaľ:

$$\boldsymbol{Pq} = \alpha_1.\boldsymbol{Pc}^1 + ... + \alpha_n.\boldsymbol{Pc}^n =_{[\boldsymbol{Pc}^i = \boldsymbol{c}^i]} \alpha_1.\boldsymbol{c}^1 + ... + \alpha_n.\boldsymbol{c}^n = \boldsymbol{q}.$$

II. Triviálne, z definície $\mathcal{N}(\boldsymbol{P})$. ■

Poznámka: Z lemy 4.4 je zrejmé, že projektor $\boldsymbol{P} = \boldsymbol{P}^2$ sprojektuje vektor sám na seba práve vtedy, keď je tento projektovaný vektor lineárnou kombináciou stĺpcov matice $\boldsymbol{P}$.

Dôsledok 4.5:

Nech pre $n \times n$ maticu $\boldsymbol{P}$ a vektory $\boldsymbol{r}, \boldsymbol{u} \in R^n$ platí:
- $\boldsymbol{P}^2 = \boldsymbol{P}$
- $[\boldsymbol{r}, \boldsymbol{u}] \,||\, \boldsymbol{P}$.

Potom pre $\boldsymbol{s}, \boldsymbol{q} \in R^n$, $\boldsymbol{s} \neq \boldsymbol{0}_n$ platí:

I. $\boldsymbol{Pq} = \boldsymbol{q} \quad \Leftrightarrow \quad \boldsymbol{q}$ je lineárnou kombináciou vektorov $\boldsymbol{r}$ a $\boldsymbol{u}$.

II. $\boldsymbol{Ps} = \boldsymbol{0}_n \quad \Rightarrow \quad \boldsymbol{s} \in \{R^n \setminus \mathcal{L}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{u})\}$.

Dôkaz: I. Z $[\boldsymbol{r}, \boldsymbol{u}] \,||\, \boldsymbol{P}$ máme, že priestor generovaný vektormi $\boldsymbol{r}$ a $\boldsymbol{u}$ je rovnaký ako priestor generovaný stĺpcami $\boldsymbol{c}^i$ matice $\boldsymbol{P}$, a preto sú zhodné lineárne obaly $\mathcal{L}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{u})$ a $\mathcal{L}(\boldsymbol{c}^1, ..., \boldsymbol{c}^n)$. Navyše vieme, že $\mathcal{R}(\boldsymbol{P}) = \mathcal{L}(\boldsymbol{c}^1, ..., \boldsymbol{c}^n)$. Použitím lemy 4.4 vyplýva tvrdenie I. dôsledku 4.5.

II. Z $\boldsymbol{s} \neq \boldsymbol{0}_n$ a $\boldsymbol{Ps} = \boldsymbol{0}_n$ vyplýva, že $\boldsymbol{s} \neq \boldsymbol{Ps}$. To podľa lemy 4.4 značí, že $\boldsymbol{s} \notin \mathcal{R}(\boldsymbol{P})$, pričom z dôkazu I. v tomto dôsledku máme: $\mathcal{R}(\boldsymbol{P}) = \mathcal{L}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{u})$. Preto platí: $\boldsymbol{s} \in \{R^n \setminus \mathcal{L}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{u})\}$. ■

Veta 4.6:

Nech sú dané : • symetrická, kladne definitná $n\times n$ matica $\boldsymbol{H}$, t.j. $\boldsymbol{H} > 0$

• $\boldsymbol{p}, \boldsymbol{y}, \boldsymbol{u} \in R^n$ a $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{p} - \boldsymbol{H}\boldsymbol{y}$.

Potom: I. Existuje jediná $n\times n$ matica $\boldsymbol{P}$ spĺňajúca: • $\boldsymbol{P}^2 = \boldsymbol{P}$ (4.8)

• $\boldsymbol{PH} = \boldsymbol{HP}^{\mathrm{T}}$ (4.9)

• $[\boldsymbol{r}, \boldsymbol{u}] \parallel \boldsymbol{P}$. (4.10)

II. Ak navyše $\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Pp} > 0$, potom existuje symetrická, kladne definitná $n\times n$ matica $\boldsymbol{H}_+ = \boldsymbol{H} + \Delta\boldsymbol{H}$, spĺňajúca: • $\boldsymbol{H}_+\boldsymbol{y} = \boldsymbol{p}$ (4.11)

• $[\boldsymbol{r}, \boldsymbol{u}] \mid \Delta\boldsymbol{H}$. (4.12)

Dôkaz: I. Najprv skonštruujeme $\boldsymbol{P}$ spĺňajúcu (4.8) až (4.10), a potom dokážeme jej jednoznačnosť. Označme: $\boldsymbol{X} = [\boldsymbol{r}, \boldsymbol{u}]$ ako $n\times 2$ maticu hodnosti l, kde $l \in \{0,1,2\}$. Potom pre túto maticu existuje kostrový rozklad $\boldsymbol{X} = \boldsymbol{YZ}$, pričom $\boldsymbol{Y}$ je $n\times l$ a $\boldsymbol{Z}$ je $l\times 2$ matica a obe sú hodnosti l. Keďže $\boldsymbol{H} > 0$, potom $l\times l$ matica $\boldsymbol{Y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{H}^{-1}\boldsymbol{Y}$ je tiež kladne definitná (Dôkaz: nech $\boldsymbol{v} \in R^l$ je nenulový vektor, potom $\boldsymbol{c} = \boldsymbol{Yv}$ je nenulový vektor z R^n. Totiž $\boldsymbol{c}$ je nenulová lineárna kombinácia všetkých l stĺpcov matice $\boldsymbol{Y}$, a tieto sú lineárne nezávislé, lebo hodnosť $\boldsymbol{Y}$ je l. Potom $\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{H}^{-1}\boldsymbol{Yv} = \boldsymbol{c}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{H}^{-1}\boldsymbol{c} > 0$, lebo $\boldsymbol{H}^{-1} > 0$.). Preto existuje $(\boldsymbol{Y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{H}^{-1}\boldsymbol{Y})^{-1}$, a možno skonštruovať:

$$\boldsymbol{P} = \boldsymbol{Y}(\boldsymbol{Y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{H}^{-1}\boldsymbol{Y})^{-1}\boldsymbol{Y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{H}^{-1}.$$

Ľahko preveríme podmienky (4.8) a (4.9). Ďalej: $\boldsymbol{X} = \boldsymbol{YZ} \Rightarrow \boldsymbol{Y}|\boldsymbol{X}$, t.j. priestor generovaný stĺpcami matice $\boldsymbol{X}$ je podpriestorom priestoru generovaného stĺpcami matice $\boldsymbol{Y}$. Avšak hodnosť matíc $\boldsymbol{X}$ a $\boldsymbol{Y}$ je rovnaká, a teda dimenzie priestorov generovaných stĺpcami týchto dvoch matíc sú rovnaké. Preto sú oba priestory zhodné, čo značí $\boldsymbol{Y} \parallel \boldsymbol{X}$.

Ďalej: $\boldsymbol{P} = \boldsymbol{Y}[(\boldsymbol{Y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{H}^{-1}\boldsymbol{Y})^{-1}\boldsymbol{Y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{H}^{-1}] = \boldsymbol{YM}$, teda $\boldsymbol{Y}|\boldsymbol{P}$. Navyše $(\boldsymbol{Y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{H}^{-1}\boldsymbol{Y})^{-1}$ a $\boldsymbol{H}^{-1}$ sú kladne definitné (teda aj regulárne) matice a $\boldsymbol{Y}$ má hodnosť l. Preto hodnosť $\boldsymbol{P}$ je tiež l.

Potom $\boldsymbol{Y} \parallel \boldsymbol{P}$ (podobne to bolo s $\boldsymbol{X}$ a $\boldsymbol{Y}$). Spolu teda máme: $\boldsymbol{X} \parallel \boldsymbol{Y}$ a $\boldsymbol{Y} \parallel \boldsymbol{P}$, čo dáva: $\boldsymbol{X} \parallel \boldsymbol{P}$.

Dôkaz jednoznačnosti: nech $\boldsymbol{Q} \neq \boldsymbol{P}$ je iná $n\times n$ matica spĺňajúca (4.8) až (4.10). Z (4.10) máme: $\boldsymbol{Q} \parallel \boldsymbol{X}$ a $\boldsymbol{X} \parallel \boldsymbol{P} \Rightarrow \boldsymbol{Q} \parallel \boldsymbol{P}$. Teda $\exists$ $\boldsymbol{K}_1, \boldsymbol{K}_2$ matice (vhodných rozmerov) také, že platí:

$$\boldsymbol{P} = \boldsymbol{QK}_1 \text{ a } \boldsymbol{Q} = \boldsymbol{PK}_2.$$

Potom $\boldsymbol{QP} = \boldsymbol{Q}(\boldsymbol{QK}_1) =_{[(4.8)]}= \boldsymbol{QK}_1 = \boldsymbol{P}$. Výmenou úloh $\boldsymbol{P}$, $\boldsymbol{Q}$ dostaneme tiež $\boldsymbol{PQ} = \boldsymbol{Q}$. Z (4.9) máme:

$$\boldsymbol{P} = \boldsymbol{HP}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{H}^{-1}, \boldsymbol{Q} = \boldsymbol{HQ}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{H}^{-1}.$$

Potom:

$$\boldsymbol{P} = \boldsymbol{QP} = (\boldsymbol{HQ}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{H}^{-1})(\boldsymbol{HP}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{H}^{-1}) = \boldsymbol{H}(\boldsymbol{PQ})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{H}^{-1} = \boldsymbol{HQ}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{H}^{-1} = \boldsymbol{Q}.$$

To je v spore s $\boldsymbol{Q} \neq \boldsymbol{P}$.

II. Definujme vektory $\boldsymbol{b} = \boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}$ a $\boldsymbol{a} = \boldsymbol{Pp}$. Teraz $\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{a} = \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{PPp} =_{[(4.8)]}= \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Pp} > 0$ (podľa predpokladu). Využijúc vzťahy (4.8), (4.10) a dôsledok 4.5, máme $\boldsymbol{Pr} = \boldsymbol{r}$. Overíme splnenie predpokladov (4.5) a (4.6) vety 4.3. Platí:

$$\boldsymbol{a} - \boldsymbol{Hb} = \boldsymbol{Pp} - \boldsymbol{HP}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} =_{[(4.9)]}= \boldsymbol{Pp} - \boldsymbol{PHy} = \boldsymbol{P}(\boldsymbol{p} - \boldsymbol{Hy}) = \boldsymbol{Pr} = \boldsymbol{r}.$$

Platí teda (4.5). Platnosť (4.6) overíme jednoduchým dosadením za vektory $\boldsymbol{b}$, $\boldsymbol{a}$, pričom sme už vyššie ukázali $\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{a} > 0$. Z vety 4.3 dostávame: existuje symetrická, kladne definitná $n\times n$ matica $\boldsymbol{H}_{+}$, spĺňajúca vzťahy (4.3), (4.4) a (4.11). Následne z vety 4.2 vyplýva platnosť vzťahu (4.2). Ďalej počítajme:

$$[\boldsymbol{Hb}, \boldsymbol{a}] = [\boldsymbol{HP}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}, \boldsymbol{Pp}] =_{[(4.9)]}= [\boldsymbol{PHy}, \boldsymbol{Pp}] = \boldsymbol{P}[\boldsymbol{Hy}, \boldsymbol{p}].$$

Z (4.10) máme $[\boldsymbol{r}, \boldsymbol{u}] \parallel \boldsymbol{P} \Rightarrow$ existuje matica $\boldsymbol{M}$ (vhodných rozmerov) taká, že platí:

$$\boldsymbol{P} = [\boldsymbol{r}, \boldsymbol{u}]\boldsymbol{M}. \tag{4.13}$$

Podľa (4.2) existuje matica $\boldsymbol{N}$ (vhodných rozmerov) taká, že platí: $\Delta\boldsymbol{H} = [\boldsymbol{Hb}, \boldsymbol{a}]\boldsymbol{N}$. Po dosadení $[\boldsymbol{Hb}, \boldsymbol{a}] = \boldsymbol{P}[\boldsymbol{Hy}, \boldsymbol{p}]$ máme:

$$\Delta\boldsymbol{H} = \boldsymbol{P}[\boldsymbol{Hy}, \boldsymbol{p}]\boldsymbol{N} =_{[(4.13)]}= [\boldsymbol{r}, \boldsymbol{u}]\boldsymbol{M}[\boldsymbol{Hy}, \boldsymbol{p}]\boldsymbol{N} = [\boldsymbol{r}, \boldsymbol{u}]\boldsymbol{A},$$

kde $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{M}[\boldsymbol{Hy}, \boldsymbol{p}]\boldsymbol{N}$. Tak dostávame: $[\boldsymbol{r}, \boldsymbol{u}] \mid \Delta\boldsymbol{H}$. ■

Veta 4.7:

Nech sú dané:
- symetrická $n\times n$ matica $\boldsymbol{G} = \boldsymbol{G}^{\mathrm{T}}$
- symetrická, kladne definitná $n\times n$ matica $\boldsymbol{H}$, t.j. $\boldsymbol{H} > 0$
- idempotentná $n\times n$ matica $\boldsymbol{Q} = \boldsymbol{Q}^2$ (t.j. $\boldsymbol{Q}$ je projektor).

Potom platia nasledujúce tvrdenia:

I. Ak $\boldsymbol{GQ}$ a $\boldsymbol{H}^{-1}\boldsymbol{Q}$ sú symetrické matice a

$$\bullet\ \boldsymbol{GQ} = \boldsymbol{H}^{-1}\boldsymbol{Q} \tag{4.14}$$

potom platí: $(\boldsymbol{HG})\boldsymbol{Q} = \boldsymbol{Q} = \boldsymbol{Q}(\boldsymbol{HG})$.

II. Ak naviac pre $\boldsymbol{p}, \boldsymbol{y}, \boldsymbol{u} \in R^n$ platí:

- $\boldsymbol{Gp} = \boldsymbol{y}$ (4.15)
- $(\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{Q})\boldsymbol{p} \parallel \boldsymbol{u}$, (4.16)

potom existuje číslo $\lambda \neq 0$ také, že platí:

- $\boldsymbol{p} = \lambda\boldsymbol{u} + \boldsymbol{Qp}$ (4.17)
- $\boldsymbol{y} = \lambda\boldsymbol{Gu} + \boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}$. (4.18)

III. Ak navyše $\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Gu} > 0$, potom pre $n\times n$ maticu

$$\boldsymbol{Q}_{+} = \boldsymbol{Q} + \frac{\boldsymbol{uu}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{G}}{\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Gu}} \tag{4.19}$$

platí:

- $\mathrm{rank}(\boldsymbol{Q}_{+}) = 1 + \mathrm{rank}(\boldsymbol{Q})$ (4.20)
- $\boldsymbol{Q}_{+}^{2} = \boldsymbol{Q}_{+}$ (4.21)
- $\boldsymbol{GQ}_{+} = \boldsymbol{Q}_{+}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{G}$ (4.22)
- $\boldsymbol{Q}_{+} \parallel [\boldsymbol{Q}, \boldsymbol{p}]$ (4.23)
- $\boldsymbol{Q}_{+}^{\mathrm{T}} \parallel [\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}, \boldsymbol{y}]$. (4.24)

IV. Naviac pre vektor $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{p} - \boldsymbol{Hy}$ existuje $n\times n$ matica $\boldsymbol{H}_{+} = \boldsymbol{H} + \Delta\boldsymbol{H}$ taká, že platí:

- $\boldsymbol{H}_{+} > 0$ (t.j. je symetrická a kladne definitná) (4.25)
- $\boldsymbol{H}_{+}\boldsymbol{y} = \boldsymbol{p}$ (4.26)
- $[\boldsymbol{u}, \boldsymbol{r}] \mid \Delta\boldsymbol{H}$. (4.27)

V. Navyše ak $\boldsymbol{H}_{+} = \boldsymbol{H} + \Delta\boldsymbol{H}$ je $n\times n$ matica spĺňajúca vzťahy (4.25) až (4.27), potom platí:

- $\boldsymbol{GQ}_{+}$ a $\boldsymbol{H}_{+}^{-1}\boldsymbol{Q}_{+}$ sú symetrické matice a

$$\boldsymbol{GQ}_{+} = \boldsymbol{H}_{+}^{-1}\boldsymbol{Q}_{+} \tag{4.28}$$

- $\boldsymbol{H}_{+}\boldsymbol{Gu} = \boldsymbol{u}$ (4.29)
- $(\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{Q}_{+})\boldsymbol{H}_{+}\boldsymbol{H}^{-1}\boldsymbol{u} \parallel (\boldsymbol{ur}^{\mathrm{T}} - \boldsymbol{ru}^{\mathrm{T}})\boldsymbol{y}$. (4.30)

Dôkaz: I. Po prenásobení (4.14) maticou $\boldsymbol{H}$ zľava máme: $\boldsymbol{HGQ} = \boldsymbol{Q}$. Zo symetrie $\boldsymbol{H}$ a $\boldsymbol{H}^{-1}\boldsymbol{Q}$ dostávame: $\boldsymbol{H}^{-1}\boldsymbol{Q} = \boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{H}^{-1}$. Túto rovnicu vynásobíme maticami $\boldsymbol{H}$ zľava a $\boldsymbol{HG}$ sprava. Potom máme: $\boldsymbol{QHG} = \boldsymbol{HQ}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{G}$. Transponujme (4.14), pričom zohľadníme symetriu matíc $\boldsymbol{G}$ a $\boldsymbol{H}^{-1}\boldsymbol{Q}$. Platí: $\boldsymbol{H}^{-1}\boldsymbol{Q} = \boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{G}$. Spolu to dáva $\boldsymbol{QHG} = \boldsymbol{Q}$. Tým je I. dokázaná.

II. Z definície symbolu "||" a z (4.16) máme: $\exists\ \lambda \neq 0$ také, že platí: $(\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{Q})\boldsymbol{p} = \lambda.\boldsymbol{u}$, t.j. $\boldsymbol{p} = \lambda\boldsymbol{u} + \boldsymbol{Qp}$. Ďalej prenásobíme rovnicu $(\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{Q})\boldsymbol{p} = \lambda\boldsymbol{u}$ zľava maticou $\boldsymbol{G}$. Dostávame:

$$\lambda\boldsymbol{Gu} = (\boldsymbol{G} - \boldsymbol{GQ})\boldsymbol{p} =_{[\text{symetria } \boldsymbol{G}, \boldsymbol{GQ}]}= (\boldsymbol{G} - \boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{G})\boldsymbol{p} = \boldsymbol{Gp} - \boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Gp} =_{[(4.15)]}= \boldsymbol{y} - \boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}\,.$$

III. Z (4.16) máme: $\exists\ \lambda \neq 0$ také, že platí: $(\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{Q})\boldsymbol{p} = \lambda\boldsymbol{u}$. Prenásobíme zľava maticou $\boldsymbol{Q}$, pričom využijeme $\boldsymbol{Q} = \boldsymbol{Q}^2$. Dostávame: $\boldsymbol{0}_n = \lambda\boldsymbol{Qu}$, pričom $\lambda \neq 0$. Preto:

$$\boldsymbol{Qu} = \boldsymbol{0}_n. \tag{4.31}$$

Ďalej: $$\boldsymbol{Q}_+^2 = \left(\boldsymbol{Q} + \frac{\boldsymbol{uu}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{G}}{\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Gu}}\right)\left(\boldsymbol{Q} + \frac{\boldsymbol{uu}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{G}}{\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Gu}}\right) =_{[\boldsymbol{Q} = \boldsymbol{Q}^2]}= \boldsymbol{Q}_+ + \frac{\boldsymbol{uu}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{GQ} + \boldsymbol{Quu}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{G}}{\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Gu}} =$$

$$=_{[\text{symetria } \boldsymbol{G} \text{ a } \boldsymbol{GQ}]}= \boldsymbol{Q}_+ + \frac{\boldsymbol{uu}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{G} + \boldsymbol{Quu}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{G}}{\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Gu}} =_{[(4.31)]}= \boldsymbol{Q}_+.$$

Počítajme: $\boldsymbol{Q}_+^{\mathrm{T}}\boldsymbol{G} =_{[(4.19)]}= \boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{G} + \dfrac{\boldsymbol{Guu}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{G}}{\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Gu}} =_{[\text{symetria } \boldsymbol{G} \text{ a } \boldsymbol{GQ}]}= \boldsymbol{GQ} + \dfrac{\boldsymbol{Guu}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{G}}{\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Gu}} = \boldsymbol{GQ}_+\,.$

Skôr ako budeme dokazovať vzťah (4.20), treba si uvedomiť, že $n\times n$ matica $\boldsymbol{Q}_+$ nemôže mať hodnosť väčšiu ako n. Toto však nie je v rozpore so vzťahom (4.20). Totiž ak by $\mathrm{rank}(\boldsymbol{Q}) = n$, t.j. ak by $n\times n$ matica $\boldsymbol{Q}$ bola regulárna, tak po prenásobení rovnice $\boldsymbol{Q} = \boldsymbol{Q}^2$ maticou $\boldsymbol{Q}^{-1}$ dostaneme: $\boldsymbol{I}_n = \boldsymbol{Q}$ (jediný regulárny projektor je jednotková matica). Potom zo (4.16) máme: $\boldsymbol{u} = \boldsymbol{0}_n$. Avšak v III. sa predpokladá $\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Gu} > 0$, t.j aj $\boldsymbol{u} \neq \boldsymbol{0}_n$. Teda v III. nemôže nastať $\mathrm{rank}(\boldsymbol{Q}) = n$, ale len $\mathrm{rank}(\boldsymbol{Q}) < n$.

Teraz samotný dôkaz.

Všimnime si $\mathcal{R}(\boldsymbol{Q})$ a $\mathcal{R}(\boldsymbol{Q}_+)$ priestory. Z definície priestoru $\mathcal{R}(\boldsymbol{A})$ vieme, že je zhodný s lineárnym obalom všetkých stĺpcov matice $\boldsymbol{A}$. Preto $\dim(\mathcal{R}(\boldsymbol{A})) = \mathrm{rank}(\boldsymbol{A})$. Stačí nám teda dokázať, že platí: $\dim(\mathcal{R}(\boldsymbol{Q}_+)) = 1 + \dim(\mathcal{R}(\boldsymbol{Q}))$.

Z $\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Gu} > 0$, vieme, že $\boldsymbol{u} \neq \boldsymbol{0}_n$. To spolu s (4.31) implikuje: $\boldsymbol{Qu} \neq \boldsymbol{u}$, pričom $\boldsymbol{Q}$ je projektor, a preto podľa tvrdenia I. lemy 4.4 dostávame: $\boldsymbol{0}_n \neq \boldsymbol{u} \notin \mathcal{R}(\boldsymbol{Q})$. Ďalej z (4.19) pre $\boldsymbol{t} \in R^n$ platí:

$\boldsymbol{Q}_+\,\boldsymbol{t} = \boldsymbol{Qt} + \alpha\boldsymbol{u}$, kde $\alpha = \dfrac{\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Gt}}{\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Gu}}$. Odtiaľ už vidíme, že $\mathcal{R}(\boldsymbol{Q}_+)$ je vlastne priestor $\mathcal{R}(\boldsymbol{Q})$ rozšírený o všetky násobky nenulového vektora $\boldsymbol{u}$ (ktorý do $\mathcal{R}(\boldsymbol{Q})$ nepatrí). Preto platí:

$$\dim(\mathcal{R}(\boldsymbol{Q}_+)) = 1 + \dim(\mathcal{R}(\boldsymbol{Q})).$$

Pokračujme dokazovaním vzťahu (4.23). Z definícií symbolu "||" a priestoru $\mathcal{R}(\boldsymbol{A})$, pre matice $\boldsymbol{A}$, $\boldsymbol{B}$ platí: $\boldsymbol{A}\|\boldsymbol{B} \Leftrightarrow \mathcal{R}(\boldsymbol{A}) = \mathcal{R}(\boldsymbol{B})$.

Zoberme $\boldsymbol{A} \equiv \boldsymbol{Q}_+$, $\boldsymbol{B} \equiv [\boldsymbol{Q}, \boldsymbol{p}]$. Pre vektor $\boldsymbol{h} \in R^n$ je $\boldsymbol{Ah} = \boldsymbol{Q}_+\boldsymbol{h} =_{[(4.19)]}= \boldsymbol{Qh} + \mu\boldsymbol{u}$, pričom sme

označili $\mu = \dfrac{\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Gh}}{\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Gu}}$. To spolu s (4.17) dáva: $\boldsymbol{Q}_+\boldsymbol{h} = \boldsymbol{Qh} + \dfrac{\mu}{\lambda}(\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{Q})\boldsymbol{p} = \boldsymbol{Q}(\boldsymbol{h} - \dfrac{\mu}{\lambda}\boldsymbol{p}) + \dfrac{\mu}{\lambda}\boldsymbol{p}$.

Ak označíme $\tilde{\boldsymbol{h}} = \boldsymbol{h} - \dfrac{\mu}{\lambda}\boldsymbol{p}$ a $\xi = \dfrac{\mu}{\lambda}$, potom dostávame:

$$\boldsymbol{Q}_+\boldsymbol{h} = \boldsymbol{Q}\tilde{\boldsymbol{h}} + \xi\boldsymbol{p}$$

(pričom $\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Gu} > 0 \Rightarrow \boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{G} \neq \boldsymbol{0}_n \Rightarrow \mu$ prebieha celé $R \Rightarrow \xi$ prebieha celé R, naviac zrejme $\tilde{\boldsymbol{h}}$ prebieha celé R^n). Ďalej zoberme ľubovoľný vektor $\tilde{z} \in R^{n+1}$, $\tilde{z} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{z} \\ \eta \end{pmatrix}$, kde $\boldsymbol{z} \in R^n$ a $\eta \in R$, potom:

$$\boldsymbol{B}\tilde{z} = [\boldsymbol{Q}, \boldsymbol{p}].\begin{pmatrix} \boldsymbol{z} \\ \eta \end{pmatrix} = \boldsymbol{Qz} + \eta\boldsymbol{p},$$

kde $\boldsymbol{z}$ prebieha celý priestor R^n a η prebieha celé R. Z toho je zrejmé, že $\mathcal{R}(\boldsymbol{A}) = \mathcal{R}(\boldsymbol{B})$. Teda $\boldsymbol{Q}_+ \parallel [\boldsymbol{Q}, \boldsymbol{p}]$. Analogicky by sme dokázali vzťah (4.24).

IV. Z vety 4.6 máme: existuje jediná $n \times n$ matica $\boldsymbol{P}$ spĺňajúca (4.8) až (4.10). Počítajme: $\boldsymbol{Qr} = \boldsymbol{Qp} - \boldsymbol{QHy} =_{[(4.15)]}= \boldsymbol{Qp} - \boldsymbol{QHGp} = (\boldsymbol{Q} - \boldsymbol{QHG})\boldsymbol{p} =_{[\mathrm{I.}]}= \boldsymbol{0}_n$. To spolu s (4.31) dáva:

$$\boldsymbol{Q}[\boldsymbol{u}, \boldsymbol{r}] = \boldsymbol{0}_{n\times 2}. \tag{4.32}$$

Z (4.10) máme: $[\boldsymbol{u}, \boldsymbol{r}] \mid \boldsymbol{P}$. Odtiaľ po prenásobení maticou $\boldsymbol{Q}$ zľava dostávame:

$\boldsymbol{0}_{n\times 2} = \boldsymbol{Q}[\boldsymbol{u}, \boldsymbol{r}] \mid \boldsymbol{QP}$. Preto platí: $\boldsymbol{QP} = \boldsymbol{0}_{n\times n}$. Z (4.9) vyplýva: $\boldsymbol{P} = \boldsymbol{HP}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{H}^{-1}$. Zo symetrie matíc $\boldsymbol{H}$ a $\boldsymbol{H}^{-1}\boldsymbol{Q}$ dostávame $\boldsymbol{H}^{-1}\boldsymbol{Q} = \boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{H}^{-1}$, po úprave: $\boldsymbol{Q} = \boldsymbol{HQ}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{H}^{-1}$. Potom $\boldsymbol{PQ} = \boldsymbol{H}(\boldsymbol{QP})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{H}^{-1} = \boldsymbol{H}.\boldsymbol{0}_{n\times n}.\boldsymbol{H}^{-1} = \boldsymbol{0}_{n\times n}$. Dostali sme:

$$\boldsymbol{PQ} = \boldsymbol{QP} = \boldsymbol{0}_{n\times n}. \tag{4.33}$$

Ak využijeme symetriu matice $\boldsymbol{G}$ a z (4.17), (4.18) dosadíme za $\boldsymbol{p}$ a $\boldsymbol{y}$, potom platí: $\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Pp} = (\lambda\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{G} + \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q})\boldsymbol{P}(\lambda\boldsymbol{u} + \boldsymbol{Qp}) =_{[(4.33)]}= \lambda^2\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{GPu}$. Z (4.8), (4.10) a dôsledku 4.5 máme: $\boldsymbol{Pu} = \boldsymbol{u}$. Následne $\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Pp} = \lambda^2\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Gu} > 0$ (lebo z II. je $\lambda \neq 0$ a z predpokladov III. je $\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Gu} > 0$). Sú teda splnené predpoklady vety 4.6, z ktorej vyplýva tvrdenie IV.

V. Najskôr dokážeme vzťah (4.29). Zo symetrie $\boldsymbol{G}$ a $\boldsymbol{GQ}$ máme: $\boldsymbol{GQ} = \boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{G}$. Počítajme: $\Delta\boldsymbol{HGQ} =_{[\boldsymbol{G}, \boldsymbol{H}, \boldsymbol{H}_+ \text{ sú symetrické}]}= (\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{G}\Delta\boldsymbol{H})^{\mathrm{T}} = (\boldsymbol{GQ}\Delta\boldsymbol{H})^{\mathrm{T}}$. Z (4.27) vyplýva: $\boldsymbol{Q}[\boldsymbol{u}, \boldsymbol{r}] \mid \boldsymbol{Q}\Delta\boldsymbol{H}$. To spolu s (4.32) dáva: $\boldsymbol{Q}\Delta\boldsymbol{H} = \boldsymbol{0}_{n\times n}$, preto $\Delta\boldsymbol{HGQ} = \boldsymbol{0}_{n\times n}$. Odtiaľ :

$$\boldsymbol{H}_+\boldsymbol{G}\boldsymbol{Q} = \boldsymbol{H}\boldsymbol{G}\boldsymbol{Q} =_{[\mathrm{L}]}= \boldsymbol{Q}. \tag{4.34}$$

Zo (4.17) máme: $\exists\, \lambda \neq 0$ také, že platí: $(\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{Q})\boldsymbol{p} = \lambda\boldsymbol{u} \;\Rightarrow\; \boldsymbol{H}_+\boldsymbol{G}(\lambda\boldsymbol{u}) = \boldsymbol{H}_+\boldsymbol{G}(\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{Q})\boldsymbol{p} =_{[(4.15)]}=$ $= \boldsymbol{H}_+\boldsymbol{y} - \boldsymbol{H}_+\boldsymbol{G}\boldsymbol{Q}\boldsymbol{p} =_{[(4.26),\,(4.34)]}= \boldsymbol{p} - \boldsymbol{Q}\boldsymbol{p} =_{[(4.17)]}= \lambda\boldsymbol{u}$. A pretože $\lambda \neq 0$, potom $\boldsymbol{H}_+\boldsymbol{G}\boldsymbol{u} = \boldsymbol{u}$.

Ďalej počítajme: $\boldsymbol{H}_+\boldsymbol{G}\boldsymbol{Q}_+ =_{[(4.19)]}= \boldsymbol{H}_+\boldsymbol{G}\boldsymbol{Q} + \dfrac{\boldsymbol{H}_+\boldsymbol{G}\boldsymbol{u}\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{G}}{\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{G}\boldsymbol{u}} =_{[(4.34),\ (4.29),\ (4.19)]}= \boldsymbol{Q}_+$. Po prenásobení maticou $\boldsymbol{H}_+^{-1}$ (pričom vieme, že $\boldsymbol{H}_+ > 0$) dostávame (4.28). Navyše zo symetrie matice $\boldsymbol{G}$ a z (4.22) dostávame, že je symetrická aj matica $\boldsymbol{G}\boldsymbol{Q}_+ = \boldsymbol{H}_+^{-1}\boldsymbol{Q}_+$.

Nakoniec dokážeme (4.30). Počítajme: $\boldsymbol{H}_+\boldsymbol{H}^{-1}\boldsymbol{u} = (\boldsymbol{H} + \boldsymbol{H}_+ - \boldsymbol{H})\boldsymbol{H}^{-1}\boldsymbol{u} = \boldsymbol{u} + \Delta\boldsymbol{H}\boldsymbol{H}^{-1}\boldsymbol{u}$. Označme vektor $\boldsymbol{t} = \boldsymbol{H}^{-1}\boldsymbol{u}$. Potom $\Delta\boldsymbol{H}\boldsymbol{H}^{-1}\boldsymbol{u} = \Delta\boldsymbol{H}\boldsymbol{t}$ je vektor, ktorý je lineárnou kombináciou stĺpcov matice $\Delta\boldsymbol{H}$. Potom z (4.27) a (4.10) máme: $\boldsymbol{u} + \Delta\boldsymbol{H}\boldsymbol{H}^{-1}\boldsymbol{u} = \boldsymbol{H}_+\boldsymbol{H}^{-1}\boldsymbol{u}$ je vektor patriaci do $\mathcal{R}(\boldsymbol{P})$, t.j. $\boldsymbol{P} \mid \boldsymbol{H}_+\boldsymbol{H}^{-1}\boldsymbol{u}$. Podľa (4.8) a lemy 4.4 máme:

$$\boldsymbol{P}\boldsymbol{H}_+\boldsymbol{H}^{-1}\boldsymbol{u} = \boldsymbol{H}_+\boldsymbol{H}^{-1}\boldsymbol{u}.$$

Z (4.10) a dôsledku 4.5 vyplýva, že $\boldsymbol{0}_n \neq \boldsymbol{H}_+\boldsymbol{H}^{-1}\boldsymbol{u}$ je lineárnou kombináciou vektorov $\boldsymbol{r}$ a $\boldsymbol{u}$ (nenulovosť je zrejmá z nenulovosti $\boldsymbol{u}$ a kladnej definitnosti $\boldsymbol{H}$ a $\boldsymbol{H}_+$). Z (4.10) a (4.27) máme, že $\boldsymbol{P} \mid \Delta\boldsymbol{H}$, čo spolu s (4.8) a lemou 4.4 dáva: $\boldsymbol{P}\Delta\boldsymbol{H} = \Delta\boldsymbol{H}$. Využijúc symetriu matice $\Delta\boldsymbol{H}$ dostávame: $\Delta\boldsymbol{H}\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}} = \Delta\boldsymbol{H}$, teda platí: $\boldsymbol{P}\Delta\boldsymbol{H} = \Delta\boldsymbol{H}\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}$. Počítajme:

$$\boldsymbol{P}\boldsymbol{H}_+ = \boldsymbol{P}(\boldsymbol{H} + \Delta\boldsymbol{H}) =_{[(4.9)]}= (\boldsymbol{H} + \Delta\boldsymbol{H})\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{H}_+\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}.$$

Z (4.8), (4.10) a dôsledku 4.5 máme $\boldsymbol{P}\boldsymbol{u} = \boldsymbol{u}$. Potom z (4.19) a (4.33) dostávame:

$$\boldsymbol{P}\boldsymbol{Q}_+ = \frac{\boldsymbol{u}\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{G}}{\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{G}\boldsymbol{u}}.\ \text{Odtiaľ: } \boldsymbol{P}\boldsymbol{Q}_+\boldsymbol{H}_+ = \frac{\boldsymbol{u}\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{G}\boldsymbol{H}_+}{\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{G}\boldsymbol{u}} = \frac{\boldsymbol{u}(\boldsymbol{H}_+\boldsymbol{G}\boldsymbol{u})^{\mathrm{T}}}{\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{G}\boldsymbol{u}} =_{[(4.29)]}= \frac{\boldsymbol{u}\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}}{\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{G}\boldsymbol{u}}.$$

Podobne: $\boldsymbol{Q}_+\boldsymbol{P}\boldsymbol{H}_+ = \dfrac{\boldsymbol{u}\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{G}\boldsymbol{P}\boldsymbol{H}_+}{\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{G}\boldsymbol{u}} = \dfrac{\boldsymbol{u}\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{G}\boldsymbol{H}_+\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}}{\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{G}\boldsymbol{u}} =_{[\boldsymbol{G},\ \boldsymbol{H}_+\ \text{sú symetrické}]}= \dfrac{\boldsymbol{u}(\boldsymbol{H}_+\boldsymbol{G}\boldsymbol{u})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}}{\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{G}\boldsymbol{u}} =_{[(4.29)]}=$ $\dfrac{\boldsymbol{u}\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}}{\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{G}\boldsymbol{u}} = \dfrac{\boldsymbol{u}\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}}{\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{G}\boldsymbol{u}}$. Teda: $\boldsymbol{P}\boldsymbol{Q}_+\boldsymbol{H}_+ = \boldsymbol{Q}_+\boldsymbol{P}\boldsymbol{H}_+ = \dfrac{\boldsymbol{u}\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}}{\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{G}\boldsymbol{u}}$. Prenásobením sprava maticou $\boldsymbol{H}_{\mathrm{T}}^{\mathrm{TT}}$ máme:

$$\boldsymbol{P}\boldsymbol{Q}_+ = \boldsymbol{Q}_+\boldsymbol{P}.$$

Počítajme:

$$\boldsymbol{P}(\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{Q}_+) = \boldsymbol{P} - \boldsymbol{P}\boldsymbol{Q}_+ = \boldsymbol{P} - \boldsymbol{Q}_+\boldsymbol{P} = (\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{Q}_+)\,\boldsymbol{P}.$$

Ale $\boldsymbol{P}(\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{Q}_+)\boldsymbol{H}_+\boldsymbol{H}^{-1}\boldsymbol{u} = (\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{Q}_+)\boldsymbol{P}\boldsymbol{H}_+\boldsymbol{H}^{-1}\boldsymbol{u} =_{[\boldsymbol{P}\boldsymbol{H}_+\boldsymbol{H}^{-1}\boldsymbol{u} = \boldsymbol{H}_+\boldsymbol{H}^{-1}\boldsymbol{u}]}= (\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{Q}_+)\boldsymbol{H}_+\boldsymbol{H}^{-1}\boldsymbol{u}$, a pretože projektor $\boldsymbol{P}$ nezmenil vektor $(\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{Q}_+)\boldsymbol{H}_+\boldsymbol{H}^{-1}\boldsymbol{u}$, tak z lemy 4.4 máme: $\boldsymbol{P} \mid (\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{Q}_+)\boldsymbol{H}_+\boldsymbol{H}^{-1}\boldsymbol{u}$. Keďže $\boldsymbol{P} \parallel [\boldsymbol{r}, \boldsymbol{u}]$, tak vektor $(\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{Q}_+)\boldsymbol{H}_+\boldsymbol{H}^{-1}\boldsymbol{u}$ je lineárnou kombináciou vektorov $\boldsymbol{r}$ a $\boldsymbol{u}$. Počítajme:

$$(\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{Q}_+)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} = \boldsymbol{y} - \boldsymbol{Q}_+^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} =_{[(4.21),\ (4.24)\ \text{a dôsledok 4.5 dáva}\ \boldsymbol{Q}_+^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} = \boldsymbol{y}]}= \boldsymbol{0}_n.$$

Preto $\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{Q}_+)\boldsymbol{H}_+\boldsymbol{H}^{-1}\boldsymbol{u} = 0$, t.j. vektor $\boldsymbol{y}$ je ortogonálny k vektoru $(\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{Q}_+)\boldsymbol{H}_+\boldsymbol{H}^{-1}\boldsymbol{u}$. Z $\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{G}\boldsymbol{u} > 0$, $\boldsymbol{H} > 0$, $\boldsymbol{H}_+ > 0$, vyplýva $\boldsymbol{H}_+\boldsymbol{H}^{-1}\boldsymbol{u} \neq \boldsymbol{0}_n$. Navyše z (4.18): $\lambda\boldsymbol{G}\boldsymbol{u} =(\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}})\boldsymbol{y}$, kde $\lambda \neq 0$. Z toho dostávame:

$$0 \neq \lambda\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{G}\boldsymbol{u} = \boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}(\lambda\boldsymbol{G}\boldsymbol{u}) = \boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}})\boldsymbol{y} = \boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} - (\boldsymbol{Q}\boldsymbol{u})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} =_{[(4.31)]}= \boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}.$$

Označíme: $$\beta = \boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} \neq 0.$$

Zrejme potom $\boldsymbol{y} \neq \boldsymbol{0}_n$ a z (4.15) vyplýva: $\boldsymbol{p} \neq \boldsymbol{0}_n$.

Tiež označme: $$\boldsymbol{q} = (\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{Q}_+)\boldsymbol{H}_+\boldsymbol{H}^{-1}\boldsymbol{u}.$$

Keďže už vieme, že vektor $\boldsymbol{q}$ je lineárnou kombináciou vektorov $\boldsymbol{r}$ a $\boldsymbol{u}$, tak $\exists\ \xi, \eta \in R$ také, že platí: $$\boldsymbol{q} = \xi\boldsymbol{u} + \eta\boldsymbol{r}.$$

Z $\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{q} = 0 \Rightarrow$ $$\xi = \frac{-\eta(\boldsymbol{r}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y})}{\beta}, \qquad \beta = \boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} \neq 0.$$

<u>AI. Nech $\boldsymbol{r} \neq \boldsymbol{0}_n$.</u> a) Ak $\boldsymbol{u} \parallel \boldsymbol{r} \Rightarrow \exists\ 0 \neq \omega \in R$ také, že platí:

$$\boldsymbol{r} = \omega\boldsymbol{u} \ \Rightarrow\ \boldsymbol{r}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} = \omega\beta \ \Rightarrow\ \xi = -\eta\omega \ \Rightarrow\ \boldsymbol{q} = \boldsymbol{0}_n.$$

b) Ak $\boldsymbol{q} = \boldsymbol{0}_n \Rightarrow \boldsymbol{Q}_+\boldsymbol{H}_+\boldsymbol{H}^{-1}\boldsymbol{u} = \boldsymbol{H}_+\boldsymbol{H}^{-1}\boldsymbol{u}$. Potom z (4.21), (4.23) a dôsledku 4.5 máme: $[\boldsymbol{Q}, \boldsymbol{p}] \mid \boldsymbol{H}_+\boldsymbol{H}^{-1}\boldsymbol{u}$, t.j. $\boldsymbol{H}_+\boldsymbol{H}^{-1}\boldsymbol{u} \neq \boldsymbol{0}_n$ je z priestoru generovaného stĺpcami matice $[\boldsymbol{Q}, \boldsymbol{p}]$. Už sme ukázali, že $\boldsymbol{H}_+\boldsymbol{H}^{-1}\boldsymbol{u}$ je lineárnou kombináciou vektorov $\boldsymbol{r}$ a $\boldsymbol{u}$. Teda $\exists\ \gamma, \delta \in R$ také, že platí: $$\boldsymbol{H}_+\boldsymbol{H}^{-1}\boldsymbol{u} = \gamma\boldsymbol{u} + \delta\boldsymbol{r}.$$

Naviac z (4.19) a (4.32) máme: $\boldsymbol{Q}_+\boldsymbol{r} = \phi\boldsymbol{u}$, kde $\phi = \dfrac{\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{G}\boldsymbol{r}}{\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{G}\boldsymbol{u}}$. Z (4.19) a (4.31) vyplýva $\boldsymbol{Q}_+\boldsymbol{u} = \boldsymbol{u}$.

Dostávame:

$$\boldsymbol{0}_n \neq \boldsymbol{H}_+\boldsymbol{H}^{-1}\boldsymbol{u} = \boldsymbol{Q}_+\boldsymbol{H}_+\boldsymbol{H}^{-1}\boldsymbol{u} = \gamma\boldsymbol{Q}_+\boldsymbol{u} + \delta\boldsymbol{Q}_+\boldsymbol{r} = (\gamma + \delta\phi)\boldsymbol{u} = \psi\boldsymbol{u}, \text{ kde } \psi = (\gamma + \delta\phi) \neq 0.$$

Počítajme: $\boldsymbol{Q}\boldsymbol{H}_+\boldsymbol{H}^{-1}\boldsymbol{u} = \psi\boldsymbol{Q}\boldsymbol{u} =_{[(4.31)]}= \boldsymbol{0}_n$. Avšak $\boldsymbol{Q}$ je projektor, preto podľa dôsledku 4.5 vektor $\boldsymbol{0}_n \neq \boldsymbol{H}_+\boldsymbol{H}^{-1}\boldsymbol{u}$ patrí do $\{R^n \setminus$ priestor generovaný stĺpcami matice $\boldsymbol{Q}\}$. Ale na začiatku dôkazu b) sme ukázali, že $\boldsymbol{H}_+\boldsymbol{H}^{-1}\boldsymbol{u}$ je z priestoru generovaného stĺpcami matice $[\boldsymbol{Q}, \boldsymbol{p}]$. Preto nutne musí $\exists\ 0 \neq \mu \in R$ také, že platí: $\mu\boldsymbol{p} = \boldsymbol{H}_+\boldsymbol{H}^{-1}\boldsymbol{u} \neq \boldsymbol{0}_n$. Tiež sme mali: $\boldsymbol{0}_n \neq \boldsymbol{H}_+\boldsymbol{H}^{-1}\boldsymbol{u} = \psi\boldsymbol{u}$.

Preto $\mu\boldsymbol{p} = \psi\boldsymbol{u} \neq \boldsymbol{0}_n \Rightarrow \boldsymbol{p} = \dfrac{\psi}{\mu}\boldsymbol{u}$. Z $\boldsymbol{0}_n \neq \boldsymbol{H}_+\boldsymbol{H}^{-1}\boldsymbol{u} = \psi\boldsymbol{u}$ vyplýva $\boldsymbol{u} = \psi\boldsymbol{H}\boldsymbol{H}_+^{-1}\boldsymbol{u} =_{[(4.29)]}= \psi\boldsymbol{H}\boldsymbol{G}\boldsymbol{u}$.

V AI. je predpoklad: $\boldsymbol{0}_n \neq \boldsymbol{r} = \boldsymbol{p} - \boldsymbol{H}\boldsymbol{y} =_{[(4.15)]}= \boldsymbol{p} - \boldsymbol{H}\boldsymbol{G}\boldsymbol{p} = \dfrac{\psi}{\mu}\boldsymbol{u} - \dfrac{\psi}{\mu}\boldsymbol{H}\boldsymbol{G}\boldsymbol{u} = \dfrac{\psi - 1}{\mu}\boldsymbol{u} \ \Rightarrow\ \boldsymbol{u} \parallel \boldsymbol{r}$.

Teda v AI. a), b) sme ukázali: ak $\boldsymbol{r} \neq \boldsymbol{0}_n$, potom: $(\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{Q}_+)\boldsymbol{H}_+\boldsymbol{H}^{-1}\boldsymbol{u} = \boldsymbol{0}_n \ \Leftrightarrow\ \boldsymbol{u} \parallel \boldsymbol{r}$.

Ďalej označme: $$\boldsymbol{j} = (\boldsymbol{u}\boldsymbol{r}^{\mathrm{T}} - \boldsymbol{r}\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}})\boldsymbol{y} = (\boldsymbol{r}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y})\boldsymbol{u} - (\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y})\boldsymbol{r}.$$

Zrejme $\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{j} = 0$, bez ohľadu na to, či $\boldsymbol{r}$ je, alebo nie je nulový vektor. Tiež je jasné, že vektor $\boldsymbol{j}$ je lineárnou kombináciou vektorov $\boldsymbol{r}$ a $\boldsymbol{u}$.

c) Ak $\boldsymbol{u} \parallel \boldsymbol{r} \;\Rightarrow\; \exists\, 0 \neq \rho \in R$ také, že platí: $\boldsymbol{r} = \rho\boldsymbol{u}$. Potom $\boldsymbol{j} = \boldsymbol{0}_n$.

d) Ak $\boldsymbol{j} = \boldsymbol{0}_n \Rightarrow (\boldsymbol{r}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y})\boldsymbol{u} - (\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y})\boldsymbol{r} = \boldsymbol{0}_n$. Keďže $\beta = \boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} \neq 0$, tak $\boldsymbol{r} = \dfrac{(\boldsymbol{r}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y})}{\beta}\boldsymbol{u} \neq \boldsymbol{0}_n \;\Rightarrow\; \boldsymbol{u} \parallel \boldsymbol{r}$.

V AI. c), d) sme ukázali, že ak $\boldsymbol{r} \neq \boldsymbol{0}_n$, potom: $(\boldsymbol{u}\boldsymbol{r}^{\mathrm{T}} - \boldsymbol{r}\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}})\boldsymbol{y} = 0 \Leftrightarrow \boldsymbol{u} \parallel \boldsymbol{r}$.

<u>AII. Nech $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{0}_n$.</u> Pozri začiatok dôkazu AI.b): $\exists\, \gamma, \delta \in R$ také, že platí: $\boldsymbol{H}_+\boldsymbol{H}^{-1}\boldsymbol{u} = \gamma\boldsymbol{u} + \delta\boldsymbol{r}$, bez ohľadu na to, či $\boldsymbol{r}$ je, alebo nie je nulový vektor. Tiež sme v AI. ukázali, že $\boldsymbol{Q}_+\boldsymbol{u} = \boldsymbol{u}$. Preto ak $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{0}_n$, tak $\boldsymbol{H}_+\boldsymbol{H}^{-1}\boldsymbol{u} = \gamma\boldsymbol{u}$, čo spolu s $(\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{Q}_+)\boldsymbol{u} = \boldsymbol{0}_n$ dáva: $(\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{Q}_+)\boldsymbol{H}_+\boldsymbol{H}^{-1}\boldsymbol{u} = \gamma(\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{Q}_+)\boldsymbol{u} = \boldsymbol{0}_n$.

Pre $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{0}_n$, máme triviálne: $\boldsymbol{j} = (\boldsymbol{u}\boldsymbol{r}^{\mathrm{T}} - \boldsymbol{r}\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}})\boldsymbol{y} = \boldsymbol{0}_n$.

<u>Zhrnutie</u>: pre vektory $(\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{Q}_+)\boldsymbol{H}_+\boldsymbol{H}^{-1}\boldsymbol{u}$ a $(\boldsymbol{u}\boldsymbol{r}^{\mathrm{T}} - \boldsymbol{r}\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}})\boldsymbol{y}$ platí:

- sú lineárnou kombináciou vektorov $\boldsymbol{r}$ a $\boldsymbol{u}$, sú ortogonálne k vektoru $\boldsymbol{y}$
- ak $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{0}_n$, potom sú oba vektory nulové
- ak $\boldsymbol{r} \neq \boldsymbol{0}_n$, potom platí: $(\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{Q}_+)\boldsymbol{H}_+\boldsymbol{H}^{-1}\boldsymbol{u} = \boldsymbol{0}_n \;\Leftrightarrow\; \boldsymbol{u} \parallel \boldsymbol{r} \;\Leftrightarrow\; (\boldsymbol{u}\boldsymbol{r}^{\mathrm{T}} - \boldsymbol{r}\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}})\boldsymbol{y} = \boldsymbol{0}_n$
- ak $\boldsymbol{r} \neq \boldsymbol{0}_n$ a ak neplatí $\boldsymbol{u} \parallel \boldsymbol{r}$, potom: $(\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{Q}_+)\boldsymbol{H}_+\boldsymbol{H}^{-1}\boldsymbol{u} \neq \boldsymbol{0}_n$, $(\boldsymbol{u}\boldsymbol{r}^{\mathrm{T}} - \boldsymbol{r}\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}})\boldsymbol{y} \neq \boldsymbol{0}_n$. Vieme, že vtedy $\exists\, \xi, \eta \in R$ také, že platí: $(\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{Q}_+)\boldsymbol{H}_+\boldsymbol{H}^{-1}\boldsymbol{u} = \xi\boldsymbol{u} + \eta\boldsymbol{r} \neq \boldsymbol{0}_n$, pričom pred AI. sme ukázali: $\xi = \dfrac{-\eta(\boldsymbol{r}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y})}{\beta}$. Odtiaľ máme:

$$(\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{Q}_+)\boldsymbol{H}_+\boldsymbol{H}^{-1}\boldsymbol{u} = \frac{-\eta}{\beta}(\boldsymbol{u}\boldsymbol{r}^{\mathrm{T}} - \boldsymbol{r}\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}})\boldsymbol{y}\,, \text{ t.j. } (\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{Q}_+)\boldsymbol{H}_+\boldsymbol{H}^{-1}\boldsymbol{u} \parallel (\boldsymbol{u}\boldsymbol{r}^{\mathrm{T}} - \boldsymbol{r}\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}})\boldsymbol{y}. \qquad \blacksquare$$

Poznámka: Pre maticu $\boldsymbol{H}_+ = \boldsymbol{H} + \Delta\boldsymbol{H}$ platí nasledujúca ekvivalencia:

$\{\, \boldsymbol{H}_+ = \boldsymbol{H}_+^{\mathrm{T}}$ a $[\boldsymbol{r}, \boldsymbol{u}] \mid \Delta\boldsymbol{H} \,\} \Leftrightarrow \{\, \exists\, \alpha, \beta, \delta \in R$ také, že $\boldsymbol{H}_+ = \boldsymbol{H} + \alpha\boldsymbol{u}\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}} + \beta(\boldsymbol{u}\boldsymbol{r}^{\mathrm{T}} + \boldsymbol{r}\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}) + \delta\boldsymbol{r}\boldsymbol{r}^{\mathrm{T}} \}$.

Z (4.30) vyplýva, že vektor $(\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{Q}_+)\boldsymbol{H}_+\boldsymbol{H}^{-1}\boldsymbol{u}$ je kolineárny s vektorom $(\boldsymbol{u}\boldsymbol{r}^{\mathrm{T}} - \boldsymbol{r}\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}})\boldsymbol{y}$, a teda je nezávislý na voľbe matice $\boldsymbol{H}_+$ spĺňajúcej vzťahy (4.25) až (4.27).

Na základe doterajších poznatkov je možné pre kvadratickú funkciu (2.12) navrhnúť nasledujúci optimalizačný algoritmus:

ALGORITMUS 2

vstup: • kvadratická funkcia (2.12)

• symetrická, kladne definitná $n \times n$ matica $\boldsymbol{H}_0$ (často $\boldsymbol{H}_0 \equiv \boldsymbol{I}_n$)

• štartovací bod $\boldsymbol{x}^0 \in R^n$, príslušný gradient $\boldsymbol{g}^0 = \boldsymbol{G}\boldsymbol{x}^0 + \boldsymbol{h}$ a vektor $\boldsymbol{u}^0 = \boldsymbol{H}_0\boldsymbol{g}^0$

• parameter požadovanej presnosti $\varepsilon > 0$

krok 1: Test: ak $\left\|\boldsymbol{u}^0\right\|_2 < \varepsilon$, tak bod $(\boldsymbol{x}^0 - \boldsymbol{H}_0\boldsymbol{g}^0)$ je ε-aproximácia bodu minima, stop.

krok 2: Cyklus pre $k = 0, 1, ..., n$-1.

2.1: Položíme $\boldsymbol{p}^k = -\boldsymbol{H}_k\boldsymbol{g}^k$.

2.2: Ak $f(\boldsymbol{x}^k + \boldsymbol{p}^k) < f(\boldsymbol{x}^k)$, tak položíme

2.2 a) $\boldsymbol{x}^{k+1} = \boldsymbol{x}^k + \boldsymbol{p}^k$, inak

2.2 b) $\boldsymbol{x}^{k+1} = \boldsymbol{x}^k$.

2.3: Vypočítame $\boldsymbol{g}^{k+1} = \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}^{k+1})$.

2.4: Položíme $\boldsymbol{y}^k = \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}^k + \boldsymbol{p}^k) - \boldsymbol{g}^k$ a $\boldsymbol{r}^k = \boldsymbol{p}^k - \boldsymbol{H}_k\,\boldsymbol{y}^k$.

2.5: Zostrojíme symetrickú $n \times n$ maticu

$\boldsymbol{H}_{k+1} = \boldsymbol{H}_k + \alpha\boldsymbol{u}^k\boldsymbol{u}^{k\,\mathrm{T}} + \beta(\boldsymbol{u}^k\boldsymbol{r}^{k\,\mathrm{T}} + \boldsymbol{r}^k\boldsymbol{u}^{k\,\mathrm{T}}) + \delta\boldsymbol{r}^k\boldsymbol{r}^{k\,\mathrm{T}}$ tak, aby platilo:

2.5 a) $\boldsymbol{H}_{k+1}\boldsymbol{y}^k = \boldsymbol{p}^k$

2.5 b) $\boldsymbol{H}_{k+1} > 0$.

2.6: Vypočítame vektor $\boldsymbol{u}^{k+1} = (\boldsymbol{u}^k\boldsymbol{r}^{k\,\mathrm{T}} - \boldsymbol{r}^k\boldsymbol{u}^{k\,\mathrm{T}})\boldsymbol{y}^k = (\boldsymbol{r}^{k\,\mathrm{T}}\boldsymbol{y}^k)\boldsymbol{u}^k - (\boldsymbol{u}^{k\,\mathrm{T}}\boldsymbol{y}^k)\boldsymbol{r}^k$.

2.7: Test: ak $\left\|\boldsymbol{u}^{k+1}\right\|_2 < \varepsilon$, tak bod $(\boldsymbol{x}^{k+1} - \boldsymbol{H}_{k+1}\boldsymbol{g}^{k+1})$ je ε-aproximácia bodu minima, stop.

Vo vete 4.9 dokážeme $(n+1)$-krokovú konvergenciu algoritmu 2. Najprv však uvádzame jednu potrebnú lemu.

Lema 4.8:

Uvažujme algoritmus 2, pričom pre všetky $0 \le j < k$ platí: $\boldsymbol{u}^j \neq \boldsymbol{0}_n$.

Potom platia tvrdenia $\mathrm{A}_0, \mathrm{A}_1, \ldots, \mathrm{A}_k$, kde tvrdenie A_k znie:

existujú $n \times n$ matice $\boldsymbol{H}_k > 0$ a $\boldsymbol{Q}_k$ také, že platí: • $\mathrm{rank}(\boldsymbol{Q}_k) = k$

- $Q_k^2 = Q_k$
- GQ_k a $H_k^{-1}Q_k$ sú symetrické matice a

  $GQ_k = H_k^{-1}Q_k$
- $(I_n - Q_k)H_k g^k \parallel u^k$
- $Q_k p^j = p^j$, pre všetky $0 \le j < k$.

Dôkaz: Pre $i = 0$ neexistuje $0 \le j < i$, preto je podmienka $Q_0 p^j = p^j$ prázdna. Ostatné vzťahy v A_0 sú splnené pre $Q_0 = \mathbf{0}_{n\times n}$, a pre ľubovoľnú $H_0 > 0$.

Nech $i = 1$, $j = 0$, a $u^0 \neq \mathbf{0}_n$. Potom z A_0 máme $Q_0 = \mathbf{0}_{n\times n}$, $\mathbf{0}_n \neq u^0 = H_0 g^0$. Keďže $G > 0$, tak $u^{0\,T}Gu^0 > 0$. Algoritmus 2 generuje krok $p^0 = -H_0 g^0 \neq \mathbf{0}_n$ (lebo u^0 je nenulový vektor). Použitím vety 4.7 dostávame: existujú $n\times n$ matice $H_1 > 0$ a Q_1 také, že platí:

$Q_T^2 = Q_T$, rank(Q_1) = 1 + rank(Q_0) = 1, matica $GQ_1 = H_1^{-1}Q_1$ je symetrická,

pričom $Q_1 = \dfrac{u^0 u^{0\,T}G}{u^{0\,T}Gu^0} = \dfrac{p^0 p^{0\,T}G}{p^{0\,T}Gp^0}$. Odtiaľ je zrejmé: $Q_1 p^0 = p^0$. Posledné, čo treba z A_1 overiť je: $(I_n - Q_1)H_1 g^1 \parallel u^1$. Z konštrukcie vektora $u^1 = (u^0 r^{0\,T} - r^0 u^{0\,T})y^0$ a zo vzťahu (4.30) máme: $(I_n - Q_1)H_1 H_0^{-1}u^0 \parallel u^1$. Preto nám stačí dokázať, že platí:

$$(I_n - Q_1)H_1 H_0^{-1}u^0 \parallel (I_n - Q_1)H_1 g^1.$$

Avšak podľa algoritmu je $x^1 = x^0 + p^0\delta_0$, kde $\delta_0 \in \{0,1\}$. Teda pre funkciu (2.12) platí:

$$g^1 = g(x^0 + p^0\delta_0) = G(x^0 + p^0\delta_0) + h = g^0 + Gp^0\delta_0.$$

Preto: $$(I_n - Q_1)H_1 g^1 = (I_n - Q_1)H_1 g^0 + (I_n - Q_1)H_1 Gp^0\delta_0.$$

Máme: $(I_n - Q_1)H_1Gp^0\delta_0 = H_1Gp^0\delta_0 - Q_1H_1Gp^0\delta_0 =_{[Q_1p^0 = p^0]}= H_1GQ_1p^0\delta_0 - Q_1H_1Gp^0\delta_0 = \mathbf{0}_n$.

Pri poslednej rovnosti sme využili tvrdenie I. vety 4.7. Potom: $(I_n - Q_1)H_1g^1 = (I_n - Q_1)H_1g^0$, $H_0^{-1}u^0 = g^0$, čo dáva: $(I_n - Q_1)H_1H_0^{-1}u^0 = (I_n - Q_1)H_1g^0 = (I_n - Q_1)H_1g^1$. Tým je A_1 dokázané.

Ďalej dokazujeme indukciou.

Nech pre $1 \le i < k$ platí A_i. Ukážeme platnosť A_{i+1}.

Podľa predpokladu je $u^i \neq \mathbf{0}_n$ a $G > 0$, preto $u^{i\,T}Gu^i > 0$ a skonštruujeme maticu: $Q_{i+1} = Q_i + \dfrac{u^i u^{i\,T}G}{u^{i\,T}Gu^i}$. Z A_i a z bodu 2.1 algoritmu 2 platí: existuje $\lambda \neq 0$ také, že

$\mathbf{0}_n \neq \boldsymbol{u}^i = \lambda(\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{Q}_i)\boldsymbol{H}_i\boldsymbol{g}^i = -\lambda(\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{Q}_i)\boldsymbol{p}^i \;\;\Rightarrow\;\; (\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{Q}_i)\boldsymbol{p}^i \parallel \boldsymbol{u}^i$. Z (2.12) vyplýva $\boldsymbol{y}^i = \boldsymbol{G}\boldsymbol{p}^i$. Sú teda splnené všetky predpoklady vety 4.7, a táto spolu s A_i dáva:

existuje $n\times n$ matica $\boldsymbol{H}_{i+1} > 0$ taká, že pre matice $\boldsymbol{H}_{i+1}$ a $\boldsymbol{Q}_{i+1}$ platí:

$\boldsymbol{Q}_{i+1} = \boldsymbol{Q}_{i+1}^2$, $\mathrm{rank}(\boldsymbol{Q}_{i+1}) = 1 + \mathrm{rank}(\boldsymbol{Q}_i) = 1 + i$. Naviac $\boldsymbol{G}\boldsymbol{Q}_{i+1} = \boldsymbol{H}_{i+1}^{-1}\boldsymbol{Q}_{i+1}$ je symetrická matica. Pre $0 \leq j < i$ počítajme:

$\boldsymbol{u}^{i\,\mathrm{T}}\boldsymbol{G}\boldsymbol{p}^j = -\lambda\boldsymbol{p}^{i\,\mathrm{T}}(\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{Q}_i)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{G}\boldsymbol{p}^j = -\lambda\boldsymbol{p}^{i\,\mathrm{T}}\boldsymbol{G}\boldsymbol{p}^j + \lambda\boldsymbol{p}^{i\,\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{G}\boldsymbol{p}^j =_{[\mathrm{A}_i]} -\lambda\boldsymbol{p}^{i\,\mathrm{T}}\boldsymbol{G}\boldsymbol{p}^j + \lambda\boldsymbol{p}^{i\,\mathrm{T}}\boldsymbol{G}\boldsymbol{Q}_i\boldsymbol{p}^j =$
$=_{[\mathrm{A}_i]} -\lambda\boldsymbol{p}^{i\,\mathrm{T}}\boldsymbol{G}\boldsymbol{p}^j + \lambda\boldsymbol{p}^{i\,\mathrm{T}}\boldsymbol{G}\boldsymbol{p}^j = 0$. Odtiaľ pre $0 \leq j < i$ máme:

$$\boldsymbol{Q}_{i+1}\boldsymbol{p}^j = \boldsymbol{Q}_i\boldsymbol{p}^j = \boldsymbol{p}^j.$$

Pre $j = i$ počítajme: $\boldsymbol{Q}_{i+1}\boldsymbol{p}^i =_{[(4.26)]} \boldsymbol{Q}_{i+1}\boldsymbol{H}_{i+1}\boldsymbol{y}^i =_{[\text{symetria matíc } \boldsymbol{H}_{i+1},\ \boldsymbol{Q}_{i+1}\boldsymbol{H}_{i+1}]} \boldsymbol{H}_{i+1}\boldsymbol{Q}_{i+1}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}^i =$
$=_{[(4.21),\ (4.24),\ \text{dôsledok } 4.5]} \boldsymbol{H}_{i+1}\boldsymbol{y}^i =_{[(4.26)]} \boldsymbol{p}^i$. Teda pre všetky $0 \leq j < i + 1$ platí: $\boldsymbol{Q}_{i+1}\boldsymbol{p}^j = \boldsymbol{p}^j$.

Nakoniec ukážeme: $(\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{Q}_{i+1})\boldsymbol{H}_{i+1}\boldsymbol{g}^{i+1} \parallel \boldsymbol{u}^{i+1}$. Z bodu 2.6 algoritmu 2 a z (4.30) vyplýva, že stačí dokázať:

$$(\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{Q}_{i+1})\boldsymbol{H}_{i+1}\boldsymbol{g}^{i+1} \;\parallel\; (\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{Q}_{i+1})\boldsymbol{H}_{i+1}\boldsymbol{H}_i^{-1}\boldsymbol{u}^i.$$

Z algoritmu: $\boldsymbol{x}^{i+1} = \boldsymbol{x}^i + \boldsymbol{p}^i\delta_i$, kde $\delta_i \in \{0,1\}$ a $\boldsymbol{p}^i = -\boldsymbol{H}_i\boldsymbol{g}^i$. Počítajme:

$\boldsymbol{Q}_{i+1}(\boldsymbol{x}^{i+1} - \boldsymbol{x}^i) = \boldsymbol{Q}_{i+1}\boldsymbol{p}^i\delta_i = \boldsymbol{p}^i\delta_i$, t.j. $\boldsymbol{x}^{i+1} = \boldsymbol{x}^i + \boldsymbol{Q}_{i+1}(\boldsymbol{x}^{i+1} - \boldsymbol{x}^i)$. Odtiaľ máme:
$\boldsymbol{g}^{i+1} = \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}^i + \boldsymbol{Q}_{i+1}(\boldsymbol{x}^{i+1} - \boldsymbol{x}^i)) = \boldsymbol{G}(\boldsymbol{x}^i + \boldsymbol{Q}_{i+1}(\boldsymbol{x}^{i+1} - \boldsymbol{x}^i)) + \boldsymbol{h} = \boldsymbol{g}^i + \boldsymbol{G}\boldsymbol{Q}_{i+1}\boldsymbol{p}^i\delta_i = \boldsymbol{g}^i + \boldsymbol{G}\boldsymbol{p}^i\delta_i$. Zo symetrie matíc v A_i máme: $(\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{Q}_i)\boldsymbol{H}_i = \boldsymbol{H}_i(\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{Q}_i)^{\mathrm{T}}$, čo spolu s A_i dáva:

$$\boldsymbol{H}_i(\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{Q}_i)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{g}^i \;\parallel\; \boldsymbol{u}^i \quad\Leftrightarrow\quad (\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{Q}_i)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{g}^i \;\parallel\; \boldsymbol{H}_i^{-1}\boldsymbol{u}^i.$$

Preto: $$(\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{Q}_{i+1})\boldsymbol{H}_{i+1}(\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{Q}_i)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{g}^i \;\parallel\; (\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{Q}_{i+1})\boldsymbol{H}_{i+1}\boldsymbol{H}_i^{-1}\boldsymbol{u}^i.$$

Teda stačí dokázať vzťah:

$$(\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{Q}_{i+1})\boldsymbol{H}_{i+1}\boldsymbol{g}^{i+1} \;\parallel\; (\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{Q}_{i+1})\boldsymbol{H}_{i+1}(\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{Q}_i)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{g}^i.$$

Počítajme: $$(\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{Q}_{i+1})\boldsymbol{H}_{i+1}\boldsymbol{G}\boldsymbol{p}^i\delta_i = \boldsymbol{H}_{i+1}\boldsymbol{G}\boldsymbol{p}^i\delta_i - \boldsymbol{Q}_{i+1}\boldsymbol{H}_{i+1}\boldsymbol{G}\boldsymbol{p}^i\delta_i =_{[\text{už dokázané časti } \mathrm{A}_{i+1}]}$$

$$= \boldsymbol{H}_{i+1}\boldsymbol{G}\boldsymbol{p}^i\delta_i - \boldsymbol{H}_{i+1}\boldsymbol{Q}_{i+1}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{G}\boldsymbol{p}^i\delta_i =_{[\text{symetria v } \mathrm{A}_{i+1}]} \boldsymbol{H}_{i+1}\boldsymbol{G}\boldsymbol{p}^i\delta_i - \boldsymbol{H}_{i+1}\boldsymbol{G}\boldsymbol{Q}_{i+1}\boldsymbol{p}^i\delta_i =$$

$$= \boldsymbol{H}_{i+1}\boldsymbol{G}\boldsymbol{p}^i\delta_i - \boldsymbol{H}_{i+1}\boldsymbol{G}\boldsymbol{p}^i\delta_i = 0.$$

Preto: $$(\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{Q}_{i+1})\boldsymbol{H}_{i+1}\boldsymbol{g}^{i+1} = (\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{Q}_{i+1})\boldsymbol{H}_{i+1}(\boldsymbol{g}^i + \boldsymbol{G}\boldsymbol{p}^i\delta_i) = (\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{Q}_{i+1})\boldsymbol{H}_{i+1}\boldsymbol{g}^i +$$

$$+ (\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{Q}_{i+1})\boldsymbol{H}_{i+1}\boldsymbol{G}\boldsymbol{p}^i\delta_i = (\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{Q}_{i+1})\boldsymbol{H}_{i+1}\boldsymbol{g}^i.$$

Ďalej spočítajme: $$(\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{Q}_{i+1})\boldsymbol{H}_{i+1}\boldsymbol{Q}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{g}^i =_{[\text{symetria v } \mathrm{A}_{i+1}]} \boldsymbol{H}_{i+1}(\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{Q}_{i+1})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{g}^i =$$

$$=_{[(4.21),\ (4.24),\ \text{dôsledok } 4.5]} \boldsymbol{H}_{i+1}\mathbf{0}_{n\times n}\boldsymbol{g}^i = \mathbf{0}_{n\times n}.$$

Odtiaľ máme:

$$(\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{Q}_{i+1})\boldsymbol{H}_{i+1}(\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{Q}_i)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{g}^i = (\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{Q}_{i+1})\boldsymbol{H}_{i+1}\boldsymbol{g}^i - (\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{Q}_{i+1})\boldsymbol{H}_{i+1}\boldsymbol{Q}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{g}^i = (\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{Q}_{i+1})\boldsymbol{H}_{i+1}\boldsymbol{g}^i.$$

Teda: $(\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{Q}_{i+1})\boldsymbol{H}_{i+1}\boldsymbol{g}^i = (\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{Q}_{i+1})\boldsymbol{H}_{i+1}\boldsymbol{g}^{i+1} = (\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{Q}_{i+1})\boldsymbol{H}_{i+1}(\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{Q}_i)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{g}^i$.

Tým sme ukázali platnosť tvrdenia A $_{i+1}$. ■

Veta 4.9:

Pre algoritmus 2 existuje $0 \le i \le n$, pre ktoré je $\boldsymbol{u}^i = \boldsymbol{0}_n$. Vtedy $\boldsymbol{x}^{i+1} = (\boldsymbol{x}^i - \boldsymbol{H}_i\boldsymbol{g}^i)$ je bod minima kvadratickej funkcie (2.12).

Dôkaz: Najprv uvažujme prípad, keď $\boldsymbol{u}^j \neq \boldsymbol{0}_n$ pre $0 \le j < n$. Potom podľa lemy 4.8 platí tvrdenieA $_n$. Z neho máme, že $\boldsymbol{Q}_n$ je regulárny projektor. Prenásobením rovnice $\boldsymbol{Q}_n = \boldsymbol{Q}_n^{\,2}$ maticou $\boldsymbol{Q}_n^{-1}$ dostávame $\boldsymbol{Q}_n = \boldsymbol{I}_n$. Potom z A $_n$: $(\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{Q}_n)\boldsymbol{H}_n\boldsymbol{g}^n \parallel \boldsymbol{u}^n \Rightarrow \boldsymbol{u}^n = \boldsymbol{0}_n$. Tým sme ukázali, že najneskôr pre $i = n$ bude $\boldsymbol{u}^i = \boldsymbol{0}_n$.

Z algoritmu máme: $\boldsymbol{u}^0 = \boldsymbol{H}_0\boldsymbol{g}^0$. Ak $\boldsymbol{u}^0 = \boldsymbol{g}^0 = \boldsymbol{0}_n$, tak $\boldsymbol{x}^0 = \boldsymbol{x}^0 - \boldsymbol{H}_0\boldsymbol{g}^0$ je bod minima.
Ak $\boldsymbol{u}^0 \neq \boldsymbol{0}_n$, potom označme i ako najmenšie číslo z množiny $\{1, \ldots, n\}$, pre ktoré platí: $\boldsymbol{u}^i = \boldsymbol{0}_n$. Potom pre všetky $0 \le j < i$ platí: $\boldsymbol{u}^j \neq \boldsymbol{0}_n$, a tak podľa lemy 4.8 platí A $_i$.

Odtiaľ: $(\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{Q}_i)\boldsymbol{H}_i\boldsymbol{g}^i \parallel \boldsymbol{u}^i$, čo pre $\boldsymbol{u}^i = \boldsymbol{0}_n$ dáva:

$$\boldsymbol{H}_i\boldsymbol{g}^i = \boldsymbol{Q}_i\boldsymbol{H}_i\boldsymbol{g}^i.$$

Pre funkciu (2.12) počítame: $\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}^i - \boldsymbol{H}_i\boldsymbol{g}^i) = \boldsymbol{G}(\boldsymbol{x}^i - \boldsymbol{H}_i\boldsymbol{g}^i) + \boldsymbol{h} = \boldsymbol{g}^i - \boldsymbol{G}\boldsymbol{H}_i\boldsymbol{g}^i =$

$$= \boldsymbol{H}_i^{-1}(\boldsymbol{H}_i\boldsymbol{g}^i - \boldsymbol{H}_i\boldsymbol{G}\boldsymbol{H}_i\boldsymbol{g}^i) = \boldsymbol{H}_i^{-1}(\boldsymbol{Q}_i\boldsymbol{H}_i\boldsymbol{g}^i - \boldsymbol{H}_i\boldsymbol{G}\boldsymbol{Q}_i\boldsymbol{H}_i\boldsymbol{g}^i) =_{[\mathrm{A}_i]} \boldsymbol{0}_n.$$

Teda $\boldsymbol{x}^{i+1} = (\boldsymbol{x}^i - \boldsymbol{H}_i\boldsymbol{g}^i)$ je bod minima kvadratickej funkcie (2.12). ■

Z algoritmu 2 je zrejmé, že ak nastane $\boldsymbol{g}^i = \boldsymbol{0}_n$, potom $\boldsymbol{p}^i = \boldsymbol{0}_n$, $\boldsymbol{x}^{i+1} = \boldsymbol{x}^i$, $\boldsymbol{g}^{i+1} = \boldsymbol{g}^i = \boldsymbol{0}_n$. Tiež $\boldsymbol{y}^i = \boldsymbol{r}^i = \boldsymbol{0}_n$, a následne $\boldsymbol{u}^{i+1} = \boldsymbol{0}_n$. Potom je $\boldsymbol{x}^{i+1} - \boldsymbol{H}_{i+1}\boldsymbol{g}^{i+1} = \boldsymbol{x}^{i+1} = \boldsymbol{x}^i$ bod minima. Teda máme:

$$\boldsymbol{g}^i = \boldsymbol{0}_n \Rightarrow \boldsymbol{u}^{i+1} = \boldsymbol{0}_n,$$

$$\boldsymbol{u}^i = \boldsymbol{0}_n \Rightarrow \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}^i - \boldsymbol{H}_i\boldsymbol{g}^i) = \boldsymbol{0}_n.$$

Z toho je zrejmé, že pre kvadratickú funkciu možno za stopové kritérium vziať hociktorú z podmienok $\boldsymbol{g}^i = \boldsymbol{0}_n$, $\boldsymbol{u}^i = \boldsymbol{0}_n$. Pre nekvadratickú, konvexnú funkciu možno uvažovať len podmienku $\boldsymbol{g}^i = \boldsymbol{0}_n$.

V bode 2.5 algoritmu 2 sa požaduje splnenie podmienky: $\boldsymbol{H}_{k+1}\boldsymbol{y}^k = \boldsymbol{p}^k$, t.j. musí platiť: $\boldsymbol{0}_n = \boldsymbol{p}^k - \boldsymbol{H}_{k+1}\boldsymbol{y}^k = \boldsymbol{p}^k - \boldsymbol{H}_k\boldsymbol{y}^k - \alpha(\boldsymbol{u}^{k\mathrm{T}}\boldsymbol{y}^k)\boldsymbol{u}^k - \beta(\boldsymbol{r}^{k\mathrm{T}}\boldsymbol{y}^k)\boldsymbol{u}^k - \beta(\boldsymbol{u}^{k\mathrm{T}}\boldsymbol{y}^k)\boldsymbol{r}^k - \delta(\boldsymbol{r}^{k\mathrm{T}}\boldsymbol{y}^k)\boldsymbol{r}^k$. Keďže $\boldsymbol{r}^k = \boldsymbol{p}^k - \boldsymbol{H}_k\boldsymbol{y}^k$, tak porovnaním koeficientov pri vektoroch $\boldsymbol{u}^k$ a $\boldsymbol{r}^k$ dostávame, že skaláre α, β, δ musia spĺňať systém: $\begin{array}{c} 1 = \beta(\boldsymbol{u}^{k\mathrm{T}}\boldsymbol{y}^k) + \delta(\boldsymbol{r}^{k\mathrm{T}}\boldsymbol{y}^k) \\ 0 = \alpha(\boldsymbol{u}^{k\mathrm{T}}\boldsymbol{y}^k) + \beta(\boldsymbol{r}^{k\mathrm{T}}\boldsymbol{y}^k) \end{array}$. Tento systém redukuje voľnosť na jeden parameter. Naviac sa požaduje taká voľba parametrov, aby bola matica $\boldsymbol{H}_{k+1}$ kladne definitná. Lema 4.8 pre kvadratickú funkciu zaručuje existenciu takýchto parametrov, až kým nebude nájdený bod minima. V praxi je však určenie vhodných parametrov veľmi obtiažne. Navyše pre nekvadratickú funkciu nemáme zaručenú existenciu takých parametrov, aby $\boldsymbol{H}_{k+1}$ spĺňala obe podmienky bodu 2.5 algoritmu 2.

Stojí za povšimnutie, že ak je $(\boldsymbol{r}^{k\mathrm{T}}\boldsymbol{y}^k) > 0$, potom možno v bode 2.5 zvoliť $\alpha = \beta = 0$, $\delta = \dfrac{1}{(\boldsymbol{y}^{k\mathrm{T}}\boldsymbol{r}^k)}$, čím dostávame kladne definitnú SR1-formulu (viď. kapitolu 3). V tomto zmysle je Davidonova metóda akousi zovšeobecnenou SR1-metódou, ktorá je pre kvadratickú funkciu (n+1)-kroková, a pritom nemá žiaden z nedostatkov SR1-metódy (t.j. numerickú nestabilitu a možnú indefinitnosť matice $\boldsymbol{H}_{k+1}$).

Powell vo svojej práci naznačuje, že sú možné isté zjednodušujúce modifikácie (Davidonovho) algoritmu 2, pričom pre kvadratickú funkciu “veľmi nepokazíme“ (n+1)-krokovú konvergenciu.

ALGORITMUS 3

vstup: • funkcia s vlastnosťami uvedenými v časti 1.1.

• symetrická, kladne definitná $n \times n$ matica $\boldsymbol{H}_0$ (často $\boldsymbol{H}_0 \equiv \boldsymbol{I}_n$)

- štartovací bod $\boldsymbol{x}^0 \in R^n$, príslušný gradient $\boldsymbol{g}^0 = \nabla f(\boldsymbol{x}^0)$, vektor $\boldsymbol{u}^0 = \boldsymbol{H}_0\boldsymbol{g}^0$
- parameter požadovanej presnosti $\varepsilon > 0$.

krok 1: Test: ak $\|\boldsymbol{g}^0\|_2 < \varepsilon$, tak bod $\boldsymbol{x}^0$ je ε-aproximácia bodu minima, stop.

krok 2: Cyklus pre $k = 0, 1, \ldots, n$-1.

2.1: Vypočítame smer $\boldsymbol{s}^k = -\boldsymbol{H}_k\boldsymbol{g}^k$.

2.2: Nastavíme $\lambda_k = 1$.

2.3: Položíme $\boldsymbol{p}^k = \lambda_k \boldsymbol{s}^k$ a označíme pomocný bod $\tilde{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{x}^k + \boldsymbol{p}^k$.

Test: ak $\|\boldsymbol{g}(\tilde{\boldsymbol{x}})\|_2 < \varepsilon$, tak $\tilde{\boldsymbol{x}}$ je ε-aproximácia bodu minima, stop.

Položíme $\boldsymbol{y}^k = \boldsymbol{g}(\tilde{\boldsymbol{x}}) - \boldsymbol{g}^k$.

Test: ak $\boldsymbol{p}^{k\mathrm{T}}\boldsymbol{y}^k < \varepsilon^2$, tak položíme $\lambda_k := 2*\lambda_k$ a ideme na bod 2.3.

2.4: Ak $f(\boldsymbol{x}^k + \boldsymbol{p}^k) < f(\boldsymbol{x}^k)$, tak položíme

2.4 a) $\boldsymbol{x}^{k+1} = \boldsymbol{x}^k + \boldsymbol{p}^k$, $\boldsymbol{g}^{k+1} = \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}^{k+1})$, inak

2.5 b) $\boldsymbol{x}^{k+1} = \boldsymbol{x}^k$, $\boldsymbol{g}^{k+1} = \boldsymbol{g}^k$.

2.5: Položíme $\boldsymbol{r}^k = \boldsymbol{p}^k - \boldsymbol{H}_k \boldsymbol{y}^k$.

2.6: Ak $(\boldsymbol{r}^{k\mathrm{T}}\boldsymbol{y}^k) \le 0$, tak položíme $\boldsymbol{u}^k = \boldsymbol{H}_k \boldsymbol{y}^k$.

2.7: Skonštruujeme symetrickú, kladne definitnú $n \times n$ maticu

$\boldsymbol{H}_{k+1} = \boldsymbol{H}_k + \alpha\boldsymbol{u}^k\boldsymbol{u}^{k\mathrm{T}} + \beta(\boldsymbol{u}^k\boldsymbol{r}^{k\mathrm{T}} + \boldsymbol{r}^k\boldsymbol{u}^{k\mathrm{T}}) + \delta\boldsymbol{r}^k\boldsymbol{r}^{k\mathrm{T}}$ takú, aby platilo $\boldsymbol{H}_{k+1}\boldsymbol{y}^k = \boldsymbol{p}^k$.

2.8: Položíme $\boldsymbol{u}^{k+1} = (\boldsymbol{u}^k\boldsymbol{r}^{k\mathrm{T}} - \boldsymbol{r}^k\boldsymbol{u}^{k\mathrm{T}})\boldsymbol{y}^k = (\boldsymbol{r}^{k\mathrm{T}}\boldsymbol{y}^k)\boldsymbol{u}^k - (\boldsymbol{u}^{k\mathrm{T}}\boldsymbol{y}^k)\boldsymbol{r}^k$.

krok 3: Položíme $\boldsymbol{H}_0 = \boldsymbol{H}_n$, $\boldsymbol{x}^0 = \boldsymbol{x}^n$, $\boldsymbol{g}^0 = \boldsymbol{g}^n$, $\boldsymbol{u}^0 = \boldsymbol{H}_0\boldsymbol{g}^0$, $k = 0$ a ideme na krok 2.

K dôkazu nasledujúcej vety je potrebné rozdeliť iterácie tohoto algoritmu na dva typy. Hovoríme, že iterácia je slabá, ak sme v nej vykonali bod 2.6 (t.j. ak $\boldsymbol{r}^{k\mathrm{T}}\boldsymbol{y}^k \le 0$). V opačnom prípade iteráciu nazveme silnou.

Veta 4.10:

Ak je algoritmus 3 aplikovaný na kvadratickú funkciu (2.12),

potom najneskôr po vykonaní n-tej silnej iterácie, platí: $\boldsymbol{H}_m = \boldsymbol{G}^{-1}$,

kde $m \ge n$ je celkový počet iterácií (vrátane slabých).

Dôkaz: Najprv si uvedomme, že $\boldsymbol{r}^k \neq \mathbf{0}_n$. Totiž (2.12) je rýdzokonvexná funkcia, a tak je $\boldsymbol{p}^{k\,\mathrm{T}}\boldsymbol{y}^k > 0$. Dôsledkom toho je, že bod 2.3 sa vykoná v každej iterácii jediný raz, a $\lambda_k = 1$ sa nezmení. Potom platí: $\boldsymbol{p}^k = \boldsymbol{s}^k = -\boldsymbol{H}_k\boldsymbol{g}^k$, $\boldsymbol{y}^k = \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}^k + \boldsymbol{p}^k) - \boldsymbol{g}^k$.

Preto $\boldsymbol{r}^k = \boldsymbol{p}^k - \boldsymbol{H}_k\,\boldsymbol{y}^k = -\boldsymbol{H}_k\,\boldsymbol{g}^k - \boldsymbol{H}_k\,\boldsymbol{y}^k = -\boldsymbol{H}_k\,\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}^k + \boldsymbol{p}^k)$. Z kladnej definitnosti matice $\boldsymbol{H}_k$ vyplýva, že $\boldsymbol{r}^k = \mathbf{0}_n \Leftrightarrow \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}^k + \boldsymbol{p}^k) = \mathbf{0}_n$. Ale ak by bolo $\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}^k + \boldsymbol{p}^k) = \mathbf{0}_n$, tak by sme v bode 2.3 skončili s nájdeným bodom minima.

Označme priestor:

$$Z_k = \{\, \boldsymbol{z}\in R^n \mid \boldsymbol{H}_k\boldsymbol{z} = \boldsymbol{G}^{-1}\boldsymbol{z},\ \boldsymbol{z}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{u}^k = 0 \,\}$$

a $\dim(Z_k)$ jeho dimenziu. Z (2.12) máme: $\boldsymbol{G}^{-1}\boldsymbol{y}^k = \boldsymbol{p}^k$, a z $\boldsymbol{r}^k \neq \mathbf{0}_n$ je $\boldsymbol{p}^k \neq \boldsymbol{H}_k\boldsymbol{y}^k$. Preto $\mathbf{0}_n \neq \boldsymbol{y}^k \notin Z_k$. Naviac platí: $\boldsymbol{H}_{k+1}\boldsymbol{y}^k = \boldsymbol{p}^k = \boldsymbol{G}^{-1}\boldsymbol{y}^k$, tiež z bodu 2.8 máme $\boldsymbol{y}^{k\,\mathrm{T}}\boldsymbol{u}^{k+1} = 0$. Teda $\boldsymbol{y}^k \in Z_{k+1}$. Tieto úvahy zrejme platia pre všetky itarácie. Ďalej:

<u>nech</u> je k-ta iterácia silná a $\boldsymbol{z}\in Z_k$. Počítajme:

$$\boldsymbol{z}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{r}^k = \boldsymbol{z}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{p}^k - \boldsymbol{H}_k\boldsymbol{y}^k) = \boldsymbol{z}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{G}^{-1}\boldsymbol{y}^k - \boldsymbol{H}_k\boldsymbol{y}^k) = [(\boldsymbol{G}^{-1} - \boldsymbol{H}_k)\boldsymbol{z}]^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}^k = 0, \qquad \text{z definície } Z_k.$$

Potom z bodu 2.7 (algoritmu 3) a zo $\boldsymbol{z}\in Z_k$ máme: $\boldsymbol{H}_{k+1}\boldsymbol{z} = \boldsymbol{H}_k\,\boldsymbol{z} = \boldsymbol{G}^{-1}\boldsymbol{z}$. A pretože je to silná iterácia, tak $\boldsymbol{z}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{u}^{k+1} = 0$ (pozri bod 2.8 algoritmu 3). Preto všetky vektory zo Z_k patria aj do Z_{k+1}, t.j. $Z_k \subseteq Z_{k+1}$. To spolu s $\mathbf{0}_n \neq \boldsymbol{y}^k \notin Z_k$ a $\boldsymbol{y}^k \in Z_{k+1}$ dáva $Z_k \subset Z_{k+1} \quad \Rightarrow$

$$\dim(Z_k) + 1 \leq \dim(Z_{k+1}).$$

<u>Nech</u> je k-ta iterácia slabá a $\boldsymbol{z}\in Z_k$. Označme $\tilde{\boldsymbol{u}}^k$ ako zmenený vektor $\boldsymbol{u}^k$ (z bodu 2.6) a

$$\tilde{Z}_k = \{\, \tilde{\boldsymbol{z}} \in R^n \mid \boldsymbol{H}_k\tilde{\boldsymbol{z}} = \boldsymbol{G}^{-1}\tilde{\boldsymbol{z}},\ \tilde{\boldsymbol{z}}^{\mathrm{T}}\tilde{\boldsymbol{u}}^k = 0 \,\}.$$

Vidíme, že Z_k a $\tilde{Z}_k$ sa líšia len v podmienkach $\boldsymbol{z}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{u}^k = 0$, resp. $\tilde{\boldsymbol{z}}^{\mathrm{T}}\tilde{\boldsymbol{u}}^k = 0$. Rovnakou úvahou ako pre silnú iteráciu dostávame:

$$\dim(\tilde{Z}_k) + 1 \leq \dim(Z_{k+1}).$$

Navyše z definície priestoru $\tilde{Z}_k$ máme: $\dim(\tilde{Z}_k) \geq \dim(Z_k) - 1$. Totiž ak označíme:

$$V = \{\boldsymbol{z}\in R^n \mid \boldsymbol{H}_k\boldsymbol{z} = \boldsymbol{G}^{-1}\boldsymbol{z}\},\ U = \{\boldsymbol{z}\in R^n \mid \boldsymbol{z}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{u}^k = 0\} \text{ a } \tilde{U} = \{\boldsymbol{z}\in R^n \mid \boldsymbol{z}^{\mathrm{T}}\tilde{\boldsymbol{u}}^k = 0\}, \text{ potom}$$

$$Z_k = V\cap U \ \text{ a } \ \tilde{Z}_k = V\cap \tilde{U}.$$

Avšak zavedením podmienky $\boldsymbol{z}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{u}^k = 0$ do priestoru V, môžeme zmenšiť dimenziu V najviac o jednotku. Teda $\dim(Z_k)\in\{\dim(V), \dim(V) - 1\}$. Podobne dostávame: $\dim(\tilde{Z}_k)\in\{\dim(V), \dim(V) - 1\}$. Odtiaľ už máme:

$$\dim(\tilde{Z}_k) \geq \dim(Z_k) - 1,$$

čo spolu s $\dim(\widetilde{Z}_k) + 1 \le \dim(Z_{k+1})$ dáva: $\dim(Z_k) \le \dim(Z_{k+1})$.

<u>Zhrnutie</u>: • pre slabé iterácie platí: $\dim(Z_k) \le \dim(Z_{k+1})$.

• pre silné iterácie platí: $\dim(Z_k) + 1 \le \dim(Z_{k+1})$.

A pretože pre každú iteráciu platí: $0 \le \dim(Z_k) \le n$, potom zrejme najneskôr pri ukončení n-tej silnej iterácie platí $\dim(Z_m) = n$, kde m je celkový počet iterácií. To však podľa definície priestoru Z_m značí, že $\boldsymbol{H}_m \boldsymbol{z} = \boldsymbol{G}^{-1}\boldsymbol{z}$, pre všetky $\boldsymbol{z} \in R^n$. Ak za vektor $\boldsymbol{z}$ postupne berieme stĺpce jednotkovej matice $\boldsymbol{I}_n$, potom dostávame : $\boldsymbol{H}_m = \boldsymbol{G}^{-1}$. ■

V praxi to pre algoritmus 3 značí, že pre $(\boldsymbol{r}^{k\,\mathrm{T}}\boldsymbol{y}^k) > 0$, v bode 2.7 zvolíme: $\alpha = \beta = 0$, $\delta = \dfrac{1}{(\boldsymbol{y}^{k\,\mathrm{T}}\boldsymbol{r}^k)}$, čím dostávame kladne definitnú SR1-formulu. Ak je $(\boldsymbol{r}^{k\,\mathrm{T}}\boldsymbol{y}^k) \le 0$, potom už nemusí byť SR1-formula korektne definovaná, prípadne by mohla byť matica $\boldsymbol{H}_{k+1}$ indefinitná. V takom prípade pre $\boldsymbol{u}^k = \boldsymbol{H}_k\, \boldsymbol{y}^k$, možno v bode 2.7 ľahko nájsť koeficienty α, β, δ také, že dostaneme DFP formulu, ktorá je (pre $\boldsymbol{p}^{k\,\mathrm{T}}\boldsymbol{y}^k > 0$) kladne definitná. Preto možno z algoritmu 3 úplne vypustiť vektory $\boldsymbol{u}^k$ a priamo voliť SR1, res. DFP-formulu.

Pre konvexnú funkciu je $\boldsymbol{p}^{k\,\mathrm{T}}\boldsymbol{y}^k \ge 0$. V bode 2.3 (algoritmu 3) určíme dĺžku kroku $\lambda_k > 0$ tak, aby platilo $\boldsymbol{p}^{k\,\mathrm{T}}\boldsymbol{y}^k > 0$ (toto je nutná a postačujúca podmienka kladnej definitnosti DFP formule). Podrobnejšie je bod 2.3 zdôvodnený v poznámkach k algoritmu 5 (strany 53-54).

5. Dixonova metóda

Vieme, že Broydenov algoritmus (strana 18) vykazuje pre kvadratickú funkciu (vďaka optimálnej dĺžke kroku – viď. vety 2.9 a 2.11) n-krokovú konvergenciu.

Dixon modifikoval tento Broydenov algoritmus v dvoch bodoch. Zmenil formulu, ktorou generujeme smery $\boldsymbol{s}^k$, a nahradil optimálnu dĺžku kroku konštantnou. Pritom docielil to, že jeho algoritmus generuje (pre kvadratickú funkciu) rovnakú postupnosť matíc $\boldsymbol{H}_k$ a smerov $\boldsymbol{s}^k$, ako pôvodný Broydenov algoritmus, a preto Dixonov algoritmus vykazuje pre kvadratickú funkciu (n+1)- krokovú konvergenciu.

Uvažujme proces minimalizácie kvadratickej funkcie (2.12) Broydenovým algoritmom. Symbolom * označíme tie veličiny, ktoré by sme nagenerovali použitím Broydenovho algoritmu (s optimálnou dĺžkou kroku). Veličiny, ktoré by sme dosiahli použitím toho istého algoritmu, avšak bez optimálnej dĺžky kroku λ_k, nebudú označené symbolom *. Ukážeme, akým spôsobom je možné generovať rovnaké smery $\boldsymbol{s}^k = \boldsymbol{s}^{k}*$. V nasledujúcej analýze budeme používať vzťahy (2.14) a (2.15). Preto budeme pre k- tu iteráciu predpokladať $\boldsymbol{g}^{k}* \neq \boldsymbol{0}_n$ (vtedy sú podľa lemy 2.10, pre kladne definitnú maticu $\boldsymbol{H}_k*$, výrazy $(\boldsymbol{p}^{k\,\mathrm{T}}*\boldsymbol{y}^{k}*)$ a $(\boldsymbol{y}^{k\,\mathrm{T}}*\boldsymbol{H}_k*\boldsymbol{y}^{k}*)$ kladné a $\lambda_k^* \neq 0$). Prípad $\boldsymbol{g}^{k}* = \boldsymbol{0}_n$ rozoberieme neskôr.

<u>I. Pre $k = 0$</u> máme vstupom zadané veličiny: $\boldsymbol{x}^0$, $\boldsymbol{g}^0$, $\boldsymbol{H}_0 > 0$. Z algoritmu platí: $\boldsymbol{s}^{0}* = -\boldsymbol{H}_0*\boldsymbol{g}^{0}*$.

Zrejme: $$\boldsymbol{s}^0 = \boldsymbol{s}^{0}*,\ \boldsymbol{H}_0 = \boldsymbol{H}_0*,\ \boldsymbol{g}^0 = \boldsymbol{g}^{0}*, \tag{5.1}$$

lebo nie sú žiadne predošlé iterácie, a teda tieto veličiny nezávisia na tom, či sme volili predošlé λ_k optimálne, alebo nie. Pre zvolenú dĺžku kroku $\lambda_0 \neq 0$, platí $\boldsymbol{p}^0 = \lambda_0\boldsymbol{s}^0$. Pre optimálnu dĺžku kroku $\lambda_0^* \neq 0$ máme: $\boldsymbol{p}^{0}* = \lambda_0^*\boldsymbol{s}^{0}*$. Po označení $\theta_0 = \dfrac{\lambda_0}{\lambda_0^*} \neq 0$, dostávame:

$$\boldsymbol{p}^0 = \theta_0\boldsymbol{p}^{0}*. \tag{5.2}$$

Vzťahy (2.13) a (5.2) implikujú:

$$\boldsymbol{y}^0 = \boldsymbol{G}\boldsymbol{p}^0 = \theta_0\boldsymbol{G}\boldsymbol{p}^{0}* = \theta_0\boldsymbol{y}^{0}*. \tag{5.3}$$

<u>II. Pre $k = 1$</u> algoritmus vzťahmi (2.14) a (2.15) konštruuje kladne definitné matice $\boldsymbol{H}_1$ a $\boldsymbol{H}_1*$. Vzťahy (5.2), (5.3), spolu s (2.14) a (2.15) dávajú:

$$\boldsymbol{H}_1 = \boldsymbol{H}_1*, \tag{5.4}$$

pričom sme vo vzťahu (2.14) zvolili $\Phi_0^* = \Phi_0$. Z definície vektora $\boldsymbol{y}^{0}*$ máme:

$$\boldsymbol{g}^{1}* = \boldsymbol{g}^{0}* + \boldsymbol{y}^{0}*, \qquad \text{čo s (5.1) dáva:} \qquad \boldsymbol{g}^{1}* = \boldsymbol{g}^0 + \boldsymbol{y}^{0}*.$$

Podobne: $\boldsymbol{g}^1 = \boldsymbol{g}^0 + \boldsymbol{y}^0 =_{[(5.3)]}= \boldsymbol{g}^0 + \theta_0\boldsymbol{y}^{0}* = \boldsymbol{g}^0 + \boldsymbol{y}^{0}* + (\theta_0 - 1)\boldsymbol{y}^{0}*$. Potom:

$$\boldsymbol{g}^1 = \boldsymbol{g}^{1}* + (\theta_0 - 1)\boldsymbol{y}^{0}*. \tag{5.5}$$

Následne z (5.4) a (5.5) dostávame: $\boldsymbol{H}_1\boldsymbol{g}^1 = \boldsymbol{H}_1*\boldsymbol{g}^{1}* + (\theta_0 - 1)\boldsymbol{H}_1*\boldsymbol{y}^{0}*$.

Z kvázinewtonovskej podmienky (2.11) máme: $\boldsymbol{H}_1*\boldsymbol{y}^{0}* = \boldsymbol{p}^{0}*$, preto platí:

$$\boldsymbol{H}_1\boldsymbol{g}^1 = \boldsymbol{H}_1{}^*\boldsymbol{g}^{1*} + (\theta_0 - 1)\boldsymbol{p}^{0*} =_{[(5.2)]}= \boldsymbol{H}_1{}^*\boldsymbol{g}^{1*} + \frac{\theta_0 - 1}{\theta_0}\boldsymbol{p}^0. \tag{5.6}$$

Algoritmus s optimálnou dĺžkou kroku volí $\boldsymbol{s}^{1*} = -\boldsymbol{H}_1{}^*\boldsymbol{g}^{1*}$, a pretože chceme aby platilo:

$$\boldsymbol{s}^1 = \boldsymbol{s}^{1*}, \tag{5.7}$$

tak podľa (5.6) musíme položiť:

$$\boldsymbol{s}^1 = -\boldsymbol{H}_1\boldsymbol{g}^1 + \frac{\theta_0 - 1}{\theta_0}\boldsymbol{p}^0. \tag{5.8}$$

Rovnako postupujeme pre $k = 2, 3, \ldots$

Uvažujme nasledovnú <u>modifikáciu Broydenovho algoritmu</u> (zo strany 18):

- dĺžka kroku $\lambda_k \neq 0$ nie je optimálna
- smery $\boldsymbol{s}^k$ sú generované vzťahom:

$$\boldsymbol{s}^k = -\boldsymbol{H}_k\boldsymbol{g}^k + \sum_{j=0}^{k-1}\frac{\theta_j - 1}{\theta_j}\boldsymbol{p}^j\ , \tag{5.9}$$

kde $\theta_k = \dfrac{\lambda_k}{\lambda_k^*} \neq 0$

- vo formule (2.14) volíme parametre $\Phi_k^* = \Phi_k$.

Potom na základe doterajších úvah možno formulovať nasledujúcu vetu.

Veta 5.1:

<u>Nech</u> je na kvadratickú funkciu (2.12) aplikovaný Broydenov, aj modifikovaný Broydenov algoritmus, pričom pre všetky $0 \leq i < k$ platí: $\boldsymbol{g}^{i*} \neq \boldsymbol{0}_n$.

<u>Potom</u> pre všetky $0 \leq i < j \leq k$ platí:

$$\text{a)}\quad \boldsymbol{H}_j = \boldsymbol{H}_j{}^* \ \text{ a } \ \boldsymbol{p}^i = \theta_i\,\boldsymbol{p}^{i*} \tag{5.10}$$

$$\text{b)}\quad \boldsymbol{g}^j = \boldsymbol{g}^0 + \sum_{i=0}^{j-1}\boldsymbol{y}^i \tag{5.11}$$

$$\text{c)}\quad \boldsymbol{g}^j = \boldsymbol{g}^{j*} + \sum_{i=0}^{j-1}(\theta_i - 1)\boldsymbol{y}^{i*} \tag{5.12}$$

d) $\boldsymbol{H}_j\, \boldsymbol{g}^j = \boldsymbol{H}_j{*}\boldsymbol{g}^{j}{*} + \sum_{i=0}^{j\text{-}1} \frac{\theta_i - 1}{\theta_i}\, \boldsymbol{p}^i$ (5.13)

e) $\boldsymbol{H}_j\, \boldsymbol{g}^j = \boldsymbol{H}_j{*}\boldsymbol{g}^{j}{*} + \sum_{i=0}^{j\text{-}1} (\theta_i - 1)\boldsymbol{H}_j^{*}\boldsymbol{y}^{i*}$ (5.14)

f) $\boldsymbol{s}^j = \boldsymbol{s}^{j}{*}.$ (5.15)

Dôkaz: Indukciou vzhľadom na j.

1° Pre $j = 1$ sme dokázali všetky tvrdenia: a) až e). Pre kontrolu stačí pozrieť úvahy od (5.1) po (5.8).

2° Indukčný predpoklad: nech pre $1 \leq j < k$ platia tvrenia a) až e).

3° Overme platnosť tvrdení a) až e) pre j+1.

a) Z oboch algoritmov: $\boldsymbol{p}^j = \lambda_j \boldsymbol{s}^j$, $\boldsymbol{p}^{j}{*} = \lambda_j^{*} \boldsymbol{s}^{j}{*}$, čo podľa 2° f) dáva: $\boldsymbol{p}^j = \theta_j \boldsymbol{p}^{j}{*}$. Použitím (2.13) máme: $\boldsymbol{y}^j = \theta_j\ \boldsymbol{y}^{j}{*}$. Po dosadení (5.10) a $\Phi_k^{*} = \Phi_k$ do (2.14), (2.15) dostávame: $\boldsymbol{H}_{j+1} = \boldsymbol{H}_{j+1}{*}$.

b) Modifikovaný Broydenov algoritmus volí vektor $\boldsymbol{y}^j$ tak, že platí:

$$\boldsymbol{g}^{j+1} = \boldsymbol{g}^j + \boldsymbol{y}^j =_{[2°\ b)]}= \boldsymbol{g}^0 + \sum_{i=0}^{j\text{-}1} \boldsymbol{y}^i + \boldsymbol{y}^j = \boldsymbol{g}^0 + \sum_{i=0}^{j} \boldsymbol{y}^i\ .$$

c) Ďalej: $\boldsymbol{g}^{j+1} = \boldsymbol{g}^j + \boldsymbol{y}^j =_{[\text{pozri dôkaz } 3°\ a)]}= \boldsymbol{g}^j + \theta_j \boldsymbol{y}^{j}{*} =_{[2°\ c)]}=$

$$=\boldsymbol{g}^{j}{*} + \sum_{i=0}^{j\text{-}1} (\theta_i - 1)\boldsymbol{y}^{i*} + \theta_j \boldsymbol{y}^{j}{*} = \boldsymbol{g}^{j}{*} + \boldsymbol{y}^{j}{*} + \sum_{i=0}^{j} (\theta_i - 1)\boldsymbol{y}^{i*} = \boldsymbol{g}^{(j+1)}{*} + \sum_{i=0}^{j} (\theta_i - 1)\boldsymbol{y}^{i*}\ .$$

d) a e) Počítajme: $\boldsymbol{H}_{j+1}\boldsymbol{g}^{j+1} =_{[3°\ a)]}= \boldsymbol{H}_{j+1}{*}\ \boldsymbol{g}^{j+1} =_{[3°\ c)]}=$

$$= \boldsymbol{H}_{j+1}{*}\ \boldsymbol{g}^{(j+1)}{*} + \sum_{i=0}^{j} (\theta_i - 1)\boldsymbol{H}_{j+1}^{*}\boldsymbol{y}^{i*} =_{[(2.18)]}= \boldsymbol{H}_{j+1}{*}\ \boldsymbol{g}^{(j+1)}{*} + \sum_{i=0}^{j} (\theta_i - 1)\,\boldsymbol{p}^{i*} =_{[(5.10),\ 3°\ a)]}=$$

$$= \boldsymbol{H}_{j+1}{*}\ \boldsymbol{g}^{(j+1)}{*} + \sum_{i=0}^{j} \frac{\theta_i - 1}{\theta_i}\, \boldsymbol{p}^i\ .$$

f) Z Broydenovho algoritmu:

$$\boldsymbol{s}^{(j+1)}{*} = -\boldsymbol{H}_{j+1}{*}\ \boldsymbol{g}^{(j+1)}{*} =_{[3°\ d)]}= -\boldsymbol{H}_{j+1}\ \boldsymbol{g}^{j+1} + \sum_{i=0}^{j} \frac{\theta_i - 1}{\theta_i}\, \boldsymbol{p}^i = \boldsymbol{s}^{j+1}.$$

■

Veta 5.1 dokazuje, že Broydenov algoritmus (s optimálnou dĺžkou kroku) a modifikovaný Broydenov algoritmus (s konštantnou dĺžkou kroku) generujú (pre kvadratickú funkciu) rovnakú postupnosť kladne definitných matíc $\boldsymbol{H}_k$ a smerov $\boldsymbol{s}^k$.

Aby sme mohli vzťah (5.9) použiť, musíme poznať hodnoty všetkých skalárov $\theta_0, \ldots, \theta_{k-1}$. Pre kvadratickú funkciu teraz odvodíme, ako možno pomocou známych veličín vyjadriť θ_i. Vzťahy (5.10) a (2.13) dávajú: $\boldsymbol{y}^i = \theta_i \boldsymbol{y}^{i*} = \theta_i (\boldsymbol{g}^{(i+1)*} - \boldsymbol{g}^{i*})$.

Navyše z (2.4) je $\lambda_i^* \boldsymbol{g}^{(i+1)*\,\mathrm{T}} \boldsymbol{s}^{i*} = \boldsymbol{g}^{(i+1)*\,\mathrm{T}} \boldsymbol{p}^{i*} = 0$, čo spolu s (5.10) dáva: $\boldsymbol{g}^{(i+1)*\,\mathrm{T}} \boldsymbol{p}^i = 0$.

Preto: $\boldsymbol{y}^{i\,\mathrm{T}} \boldsymbol{p}^i = \theta_i (\boldsymbol{g}^{(i+1)*\,\mathrm{T}} \boldsymbol{p}^i - \boldsymbol{g}^{i*\,\mathrm{T}} \boldsymbol{p}^i) = -\theta_i \boldsymbol{g}^{i*\,\mathrm{T}} \boldsymbol{p}^i$.

Naviac z (5.12) je $\boldsymbol{g}^{i\,\mathrm{T}} \boldsymbol{p}^i = \boldsymbol{g}^{i*\,\mathrm{T}} \boldsymbol{p}^i + \sum_{j=0}^{i-1} (\theta_j - 1) \boldsymbol{y}^{j*\mathrm{T}} \boldsymbol{p}^i =_{[(5.10)]}=$

$$= \boldsymbol{g}^{i*\,\mathrm{T}} \boldsymbol{p}^i + \theta_i \sum_{j=0}^{i-1} (\theta_j - 1) \boldsymbol{y}^{j*\mathrm{T}} \boldsymbol{p}^{i*} =_{[(2.13)]}= \boldsymbol{g}^{i*\mathrm{T}} \boldsymbol{p}^i + \theta_i \sum_{j=0}^{i-1} (\theta_j - 1) \boldsymbol{p}^{j*\mathrm{T}} \boldsymbol{G} \boldsymbol{p}^{i*} =_{[(2.20)]}= \boldsymbol{g}^{i*\mathrm{T}} \boldsymbol{p}^i .$$

Odtiaľ máme:

$$\theta_i = -\frac{\boldsymbol{y}^{i\,\mathrm{T}} \boldsymbol{p}^i}{\boldsymbol{g}^{i\,\mathrm{T}} \boldsymbol{p}^i} . \tag{5.16}$$

Ak využijeme $\boldsymbol{y}^i = \boldsymbol{g}^{(i+1)} - \boldsymbol{g}^i$, potom z (5.16) dostávame:

$$\frac{\theta_i - 1}{\theta_i} = \frac{\boldsymbol{g}^{(i+1)\,\mathrm{T}} \boldsymbol{p}^i}{\boldsymbol{y}^{i\,\mathrm{T}} \boldsymbol{p}^i} . \tag{5.17}$$

Z $\boldsymbol{y}^i = \theta_i \boldsymbol{y}^{i*}$, $\boldsymbol{p}^i = \theta_i \boldsymbol{p}^{i*}$ máme: $\boldsymbol{p}^{i\,\mathrm{T}} \boldsymbol{y}^i = \theta_i^2 \boldsymbol{p}^{i*\,\mathrm{T}} \boldsymbol{y}^{i*}$, pričom $\theta_i \neq 0$.

Podľa lemy 2.10 je $\boldsymbol{p}^{i*\,\mathrm{T}} \boldsymbol{y}^{i*} > 0$. Preto $\boldsymbol{p}^{i\,\mathrm{T}} \boldsymbol{y}^i \neq 0$. Potom je vzťah (5.16) korektný, lebo vzišiel z $0 \neq \boldsymbol{y}^{i\,\mathrm{T}} \boldsymbol{p}^i = -\theta_i \boldsymbol{g}^{i\,\mathrm{T}} \boldsymbol{p}^i$.

Teraz analyzujme prípad, keď $\boldsymbol{g}^{l*} = \boldsymbol{0}_n$. Z vety 2.9 a vety 2.11 máme, že najneskôr pre $l = n$ bude po prvý krát: $\boldsymbol{g}^{l*} = \boldsymbol{0}_n$ (t.j. $\boldsymbol{x}^{l*}$ bude bod minima kvadratickej funkcie). Vtedy z $\boldsymbol{s}^{l*} = -\boldsymbol{H}_l^* \boldsymbol{g}^{l*}$, $\boldsymbol{H}_l^* > 0$, $\boldsymbol{s}^{l*} = \boldsymbol{s}^l$ vyplýva: $\boldsymbol{s}^l = \boldsymbol{0}_n \Leftrightarrow \boldsymbol{g}^{l*} = \boldsymbol{0}_n$.

V situácii $\boldsymbol{s}^l = \boldsymbol{0}_n$ vykonáme posledný krok: $\boldsymbol{p}^l = -\boldsymbol{H}_l \boldsymbol{g}^l$. Počítajme:

$$\boldsymbol{p}^l = -\boldsymbol{H}_l \boldsymbol{g}^l =_{[(5.12)]}= -\boldsymbol{H}_l \boldsymbol{g}^{l*} - \boldsymbol{H}_l \sum_{j=0}^{l-1} (\theta_j - 1) \boldsymbol{y}^{j*} = -\boldsymbol{H}_l \sum_{j=0}^{l-1} (\theta_j - 1) \boldsymbol{y}^{j*} = -\sum_{j=0}^{l-1} (\theta_j - 1) \boldsymbol{H}_l \boldsymbol{y}^{j*} =$$

$=_{[(2.18)]}= -\sum_{j=0}^{l-1} (\theta_j - 1) \boldsymbol{p}^{j*}$. Teda máme:

$$\boldsymbol{p}^l = -\sum_{j=0}^{l-1}(\theta_j - 1)\boldsymbol{p}^{j*} . \tag{5.18}$$

Teraz z (5.10) a (5.18) dostávame: $\sum_{j=0}^{l}\boldsymbol{p}^j = \sum_{j=0}^{l-1}\theta_j\boldsymbol{p}^{j*} + \boldsymbol{p}^l = \sum_{j=0}^{l}\theta_j\boldsymbol{p}^{j*} - \sum_{j=0}^{l}(\theta_j - 1)\boldsymbol{p}^{j*} =$

$= \sum_{j=0}^{l}(\theta_j - (\theta_j - 1))\boldsymbol{p}^{j*} = \sum_{j=0}^{l-1}\boldsymbol{p}^{j*}$. Potom: $\boldsymbol{x}^{l+1} = \boldsymbol{x}^0 + \sum_{j=0}^{l}\boldsymbol{p}^j = \boldsymbol{x}^0 + \sum_{j=0}^{l-1}\boldsymbol{p}^{j*} = \boldsymbol{x}^{l*}$, t.j. $\boldsymbol{x}^{l+1} = \boldsymbol{x}^{l*}$ je bod minima kvadratickej funkcie (2.12).

Tým sme vykonali dôkaz vety 5.2, ktorú vyslovíme hneď za formuláciou nasledujúceho algoritmu.

ALGORITMUS 4

vstup: • kvadratická funkcia (2.12)

• štartovací bod $\boldsymbol{x}^0 \in R^n$, príslušný gradient $\boldsymbol{g}^0$, vektor $\boldsymbol{v}^0 = \boldsymbol{0}_n$

• štarovacia matica $\boldsymbol{H}_0 = \boldsymbol{I}_n$.

krok 1: Vypočítame smer $\boldsymbol{s}^0 = -\boldsymbol{H}_0\boldsymbol{g}^0 + \boldsymbol{v}^0$ $(= -\boldsymbol{g}^0)$.

krok 2: Test: ak $\boldsymbol{s}^0 = \boldsymbol{0}_n$, tak bod $\boldsymbol{x}^1 = \boldsymbol{x}^0 - \boldsymbol{H}_0\boldsymbol{g}^0$ $(= \boldsymbol{x}^0)$ je bod minima funkcie (2.12), stop.

krok 3: Pre $k = 0, 1, \dots , n-1$ opakuj krok 4.

krok 4: Zvolíme dĺžku kroku $\lambda_k \neq 0$.

Vypočítame vektory $\boldsymbol{p}^k = \lambda_k \boldsymbol{s}^k$, $\boldsymbol{y}^k = \boldsymbol{g}^{k+1} - \boldsymbol{g}^k$, $\boldsymbol{x}^{k+1} = \boldsymbol{x}^k + \boldsymbol{p}^k$.

Vzťahmi (2.14) a (2.15) skonštruujeme kladne definitnú maticu $\boldsymbol{H}_{k+1}$.

Vypočítame vektor $\boldsymbol{v}^{k+1} = \boldsymbol{v}^k + \dfrac{\boldsymbol{g}^{(k+1)\mathrm{T}}\boldsymbol{p}^k}{\boldsymbol{y}^{k\mathrm{T}}\boldsymbol{p}^k}\boldsymbol{p}^k$,

a smer $\boldsymbol{s}^{k+1} = -\boldsymbol{H}_{k+1}\boldsymbol{g}^{k+1} + \boldsymbol{v}^{k+1}$.

Test: ak $\boldsymbol{s}^{k+1} = \boldsymbol{0}_n$, tak $\boldsymbol{x}^{k+2} = \boldsymbol{x}^{k+1} - \boldsymbol{H}_{k+1}\boldsymbol{g}^{k+1}$ je bod minima funkcie (2.12), stop.

Veta 5.2:

Pre algoritmus 4 platia nasledujúce tvrdenia:

a) Smery $\boldsymbol{s}^k$ a matice $\boldsymbol{H}_k$ sú tie isté, ktoré by sme dostali použitím Broydenovho algoritmu (s optimálnou dĺžkou kroku a so vzťahom $\boldsymbol{s}^k = -\boldsymbol{H}_k\boldsymbol{g}^k$).

b) Vektor $\boldsymbol{s}^k$ bude po prvý krát nulový po takom istom počte iterácií, koľko by bolo potrebných na nájdenie bodu minima pri použití Broydenovho algoritmu (s optimálnou dĺžkou kroku a so vzťahom $\boldsymbol{s}^k = -\boldsymbol{H}_k \boldsymbol{g}^k$).

c) Posledný krok $\boldsymbol{p}^k = -\boldsymbol{H}_k\, \boldsymbol{g}^k$ dáva minimum kvadratickej funkcie (2.12), a to najneskôr pre $k = n$.

Nakoniec upravíme algoritmus 4, aby bol použiteľný pre nekvadratickú konvexnú funkciu.

ALGORITMUS 5

vstup: • funkcia s vlastnosťami uvedenými v časti 1.1.

• štartovací bod $\boldsymbol{x}^0 \in R^n$, príslušný gradient $\boldsymbol{g}^0 = \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}^0)$

• parameter požadovanej presnosti $\varepsilon > 0$.

krok 1: Test: ak $\left\| \boldsymbol{g}^0 \right\|_2 < \varepsilon$, tak bod $\boldsymbol{x}^0$ je ε-aproximácia bodu minima, stop.

krok 2: Položíme: $\boldsymbol{H}_0 = \boldsymbol{I}_n$, $\boldsymbol{v}^0 = \boldsymbol{0}_n$.

krok 3: Cyklus pre $k = 0, 1, ..., n$-1.

3.1: Vypočítame smer $\boldsymbol{s}^k = -\boldsymbol{H}_k\, \boldsymbol{g}^k + \boldsymbol{v}^k$.

3.2: Test: ak $-\boldsymbol{s}^{k\,\mathrm{T}} \boldsymbol{g}^k < \varepsilon^2$, tak ideme na krok 4.

3.3: Položíme $\lambda = 1$.

3.4: Položíme $\boldsymbol{p}^k = \lambda \boldsymbol{s}^k$ a označíme pomocný bod $\tilde{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{x}^k + \boldsymbol{p}^k$.

Test: ak $\|\boldsymbol{g}(\tilde{\boldsymbol{x}})\|_2 < \varepsilon$, tak bod $\tilde{\boldsymbol{x}}$ je ε-aproximácia bodu minima, stop.

Položíme $\boldsymbol{y}^k = \boldsymbol{g}(\tilde{\boldsymbol{x}}) - \boldsymbol{g}^k$.

3.5: Test: ak $\boldsymbol{p}^{k\,\mathrm{T}}\boldsymbol{y}^k \geq \varepsilon^2$, tak vzťahmi (2.14) a (2.15) skonštruujeme kladne definitnú maticu $\boldsymbol{H}_{k+1}$,

inak položíme $\lambda := 2*\lambda$ a ideme na bod 3.4.

3.6: Test: ak $f(\tilde{\boldsymbol{x}}) < f(\boldsymbol{x}^k)$, tak položíme:

a) $\boldsymbol{x}^{k+1} = \boldsymbol{x}^k + \boldsymbol{p}^k$, $\boldsymbol{g}^{k+1} = \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}^{k+1})$, inak

b) $\boldsymbol{x}^{k+1} = \boldsymbol{x}^k$, $\boldsymbol{g}^{k+1} = \boldsymbol{g}^k$.

Vypočítame $\boldsymbol{v}^{k+1} = \boldsymbol{v}^k + \dfrac{\boldsymbol{g}^{(k+1)\,\mathrm{T}}\boldsymbol{p}^k}{\boldsymbol{y}^{k\,\mathrm{T}}\boldsymbol{p}^k}\boldsymbol{p}^k$.

krok 4: Položíme $\boldsymbol{v}^k = \boldsymbol{0}_n$.

krok 5: Vypočítame smer $\boldsymbol{s}^k = -\boldsymbol{H}_k\boldsymbol{g}^k + \boldsymbol{v}^k$ $(= -\boldsymbol{H}_k\boldsymbol{g}^k)$.

krok 6: Test: ak $-\boldsymbol{s}^{k\,\mathrm{T}}\boldsymbol{g}^k < \varepsilon^2$, tak položíme $\boldsymbol{H}_k = \boldsymbol{I}_n$, a ideme na krok 5.

krok 7: Kvadratickou interpoláciou vypočítame dĺžku kroku λ takú, aby platil vzťah (2.5).

Položíme: $\boldsymbol{x}^{k+1} = \boldsymbol{x}^k + \lambda\,\boldsymbol{s}^k$, $\boldsymbol{g}^{k+1} = \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}^{k+1})$.

krok 8: Položíme $\boldsymbol{H}_0 = \boldsymbol{H}_k$, $\boldsymbol{g}^0 = \boldsymbol{g}^{k+1}$, $\boldsymbol{x}^0 = \boldsymbol{x}^{k+1}$, $\boldsymbol{v}^0 = \boldsymbol{v}^k$, $k = 0$. Ideme na krok 3.

Poznámka: (k predošlému algoritmu)

Algoritmus je možné ukončiť, ak bude prekročená istá zadaná horná hranica celkového počtu iterácií.

Ak je výraz $\boldsymbol{s}^{k\,\mathrm{T}}\boldsymbol{g}^k$ záporný, tak je podľa lemy 2.4 smer $\boldsymbol{s}^k$ spádový v bode $\boldsymbol{x}^k$. Preto ak $-\boldsymbol{s}^{k\,\mathrm{T}}\boldsymbol{g}^k < \varepsilon^2$, tak tento smer nepovažujeme za spádový a riešime to prechodom na krok 4. V reťazci krokov algoritmu v konečnom dôsledku vygenerujeme spádový smer.

(K bodu 3.4:) Keďže je účelová funkcia konvexná, tak pre každý nenulový krok $\boldsymbol{p}^k$ platí: $\boldsymbol{p}^{k\,\mathrm{T}}\boldsymbol{y}^k \geq 0$. Ak chceme použiť vzťahy (2.14) a (2.15) (na konštrukciu kladne definitnej matice $\boldsymbol{H}_{k+1}$), potom musíme zabezpečiť, aby platilo $\boldsymbol{p}^{k\,\mathrm{T}}\boldsymbol{y}^k > 0$ (vtedy je aj vektor $\boldsymbol{y}^k$ nenulový, čo s kladnou definitnosťou matice $\boldsymbol{H}_k$ dáva $\boldsymbol{y}^{k\,\mathrm{T}}\boldsymbol{H}_k\boldsymbol{y}^k > 0$).

Smer $\boldsymbol{s}^k$ spĺňa: $-\boldsymbol{s}^{k\mathrm{T}}\boldsymbol{g}^k \geq \varepsilon^2 > 0.$

Potom: $\boldsymbol{s}^{k\mathrm{T}}\boldsymbol{y}^k = \boldsymbol{s}^{k\mathrm{T}}(\boldsymbol{g}^{k+1} - \boldsymbol{g}^k) = \boldsymbol{s}^{k\mathrm{T}}\boldsymbol{g}^{k+1} - \boldsymbol{s}^{k\mathrm{T}}\boldsymbol{g}^k \geq \boldsymbol{s}^{k\mathrm{T}}\boldsymbol{g}^{k+1} + \varepsilon^2.$

Pretože funkcia f je konvexná, tak gradient ako funkcia je monotónna, t.j. pre všetky $\lambda > \tilde{\lambda}$ platí: $\boldsymbol{s}^{k\mathrm{T}}\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}^k + \lambda\boldsymbol{s}^k) \geq \boldsymbol{s}^{k\mathrm{T}}\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}^k + \tilde{\lambda}\boldsymbol{s}^k)$

(Totiž pre konvexnú funkciu f a pre $\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2 \in R^n$ platí : $f(\boldsymbol{x}_2) - f(\boldsymbol{x}_1) \geq \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}_1)^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{x}_2 - \boldsymbol{x}_1)$.
Potom vyššie uvedenú nerovnosť pre gradient $\boldsymbol{g}$ možno jednoducho dokázať, ak za $\boldsymbol{x}_1$ a $\boldsymbol{x}_2$ striedavo volíme $(\boldsymbol{x}^k + \lambda\boldsymbol{s}^k)$ a $(\boldsymbol{x}^k + \tilde{\lambda}\boldsymbol{s}^k)$).

Naviac f je zdola ohraničená (ináč by nemela minimum) a smer $\boldsymbol{s}^k$ je z bodu $\boldsymbol{x}^k$ spádový. Preto nemôže funkcia z bodu $\boldsymbol{x}^k$ v spádovom smere $\boldsymbol{s}^k$ stále klesať, ale musí existovať konštanta $\tilde{\lambda} > 0$ taká, že $\boldsymbol{s}^{k\mathrm{T}}\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}^k + \tilde{\lambda}\boldsymbol{s}^k) \geq 0$

(t.j. v bode $(\boldsymbol{x}^k + \tilde{\lambda}\boldsymbol{s}^k)$ je funkcia f neklesajúca, lebo $\boldsymbol{s}^{k\mathrm{T}}\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}^k + \tilde{\lambda}\boldsymbol{s}^k)$ je derivácia funkcie f v bode $(\boldsymbol{x}^k + \tilde{\lambda}\boldsymbol{s}^k)$ a smere $\boldsymbol{s}^k$). Potom pre všetky $\lambda > \tilde{\lambda} > 0$ platí:

$$\boldsymbol{s}^{k\mathrm{T}}\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}^k + \lambda\boldsymbol{s}^k) \geq 0$$

(t.j. funkcia f je od bodu $(\boldsymbol{x}^k + \tilde{\lambda}\boldsymbol{s}^k)$v smere $\boldsymbol{s}^k$ neklesajúca). Preto ak budeme dostatočne dlho zväčšovať dĺžku kroku λ, tak docielime $\boldsymbol{s}^{k\mathrm{T}}\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}^k + \lambda\boldsymbol{s}^k) = \boldsymbol{s}^{k\mathrm{T}}\boldsymbol{g}^{k+1} \geq 0$. Takže bude platiť: $\boldsymbol{s}^{k\mathrm{T}}\boldsymbol{y}^k = \boldsymbol{s}^{k\mathrm{T}}(\boldsymbol{g}^{k+1} - \boldsymbol{g}^k) \geq \varepsilon^2.$

Potom:

$$\boldsymbol{p}^{k\mathrm{T}}\boldsymbol{y}^k = \lambda\boldsymbol{s}^{k\mathrm{T}}\boldsymbol{y}^k \geq \lambda\varepsilon^2 \geq \varepsilon^2 > 0.$$

7. Popis numerického experimentu

Na tomto mieste uvádzame najdôležitejšie pojmy, ktoré čitateľovi sprehľadnia štruktúru a výsledky numerického experimentu.

V experimente sme sa zamerali na testovanie nasledovných kvadratických a bikvadratických funkcií:

- $f(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{G}_2\boldsymbol{x} + \boldsymbol{h}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}$

- $f_b(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{4}\left(\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{G}_1\,\boldsymbol{x}\right)^2 + \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{G}_2\,\boldsymbol{x} + \boldsymbol{h}^T\boldsymbol{x}$,

kde $\boldsymbol{G}_2$ je kladne definitná a $\boldsymbol{G}_1$ je kladne semidefinitná $n\times n$ matica.

Testovanie kvadratických funkcií je (vzhľadom na spôsob odvodenia použitých kvázinewtonovských metód) samozrejmosťou. Dôvodom voľby bikvadratických funkcií bola najmä možnosť ich jednoduchého sériového generovania, či už pre rovnaké, alebo pre rôzne dimenzie n vektoru premenných.

Matice $\boldsymbol{G}_1$ a $\boldsymbol{G}_2$ boli generované v tvare:

$$\boldsymbol{G}_2 = \boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^T + \boldsymbol{B}, \qquad \text{resp.} \qquad \boldsymbol{G}_1 = \boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^T,$$

kde $\boldsymbol{A}$ bola náhodne vygenerovaná štvorcová matica, a $\boldsymbol{B}$ bola náhodne vygenerovaná kladne definitná štvorcová matica.

Vektor $\boldsymbol{h}$ bol dopočítaný v závislosti na (vopred zvolenom) bode minima $\boldsymbol{x}_{opt}$.

Efektívnosť jednotlivých metód bola testovaná na sérii 50 kvadratických a 20 bikvadratických funkcií, pričom sme zabezpečili rovnaké hodnoty štartovacích veličín pre všetky testované metódy.

Pritom sme svoju pozornosť upriamili na sledovanie:

- priemerného δ_{priem} a maximálneho δ_{max}, pripadajúceho na jednu konkrétnu sériu, kde

$$\delta = \left\|\boldsymbol{x}_L - \boldsymbol{x}_{opt}\right\|_2$$

je vzdialenosť poslednej dosiahnutej aproximácie $\boldsymbol{x}_L$ od bodu minima danej funkcie

- počtu iterácií, a u bikvadratických funkcií aj počtu vykonávaných (n+1)-cyklov
- dimenzie n vektoru premenných
- vzdialenosti $\xi = \left\|\boldsymbol{x}_0 - \boldsymbol{x}_{opt}\right\|_2$ štartovacieho bodu $\boldsymbol{x}_0$ od bodu optima $\boldsymbol{x}_{opt}$.

Posledným externe zadávaným parametrom bol parameter požadovanej presnosti ε, ktorým sme testovali druhú mocninu euklidovskej normy gradientu účelovej funkcie. Okrem toho parameter ε vystupoval:

- v Davidon-Powellovej a SR1 metóde pri testovaní nulovosti výrazov ($\boldsymbol{p}^{k\,\mathrm{T}}\boldsymbol{y}^{k}$), ($\boldsymbol{r}^{k\,\mathrm{T}}\boldsymbol{y}^{k}$)
- v Dixonovej a Goldfarbovej metóde pri testovaní nulovosti výrazu ($\boldsymbol{p}^{k\,\mathrm{T}}\boldsymbol{y}^{k}$), a pri zisťovaní spádovosti smeru.

V nasledovoných tabuľkách uvádzame napozorované hodnoty veličín δ_{priem} a δ_{max}, pri rôznych voľbách externe zadávaných parametrov. Z dôvodu veľkej voľnosti voľby spomínaných parametrov, obmedzili sme sa len na niektoré konkrétne „zostavy“:

- n = 5, 10, 15, 20, 25
- $\boldsymbol{x}_{opt}$ = $\mathbf{0}_n$, 10.$\boldsymbol{e}_1$, 100000.$\boldsymbol{e}_1$, resp. $\boldsymbol{x}_{opt}$ = (1,2, …, n)
- ξ = 1, 10, 100
- ε = 10^{-4} , 10^{-10}
- počet (n+1)-cyklov bol 3, resp. 10.

Program, ktorého výpis predkladáme v prílohe, bol vytvorený v prostredí Turbo Pascal 6.0.

8. Tabuľky numerických výsledkov

Bikvadratické funkcie.

Počet “ n+1 “ cyklov ………… 3.

$\boldsymbol{n}$ = 20	ε = E–10	Davidon – Powell		Dixon		Goldfarb		SR1	
ξ	$\boldsymbol{X}_{opt}$	δ_{priem}	δ_{max}	δ_{priem}	δ_{max}	δ_{priem}	δ_{max}	δ_{priem}	δ_{max}
	$\mathbf{0}_n$	2.73E -1	5.80E -1	1.48E -6	7.52E -6	2.08E 0	2.63E 0	2.59E -1	5.06E -1

1	$10.\boldsymbol{e}_1$	7.04E -1	1.30E 0	1.84E 1	7.36E 1	2.48E 0	4.15E 0	5.70E -1	1.24E 0
	$\boldsymbol{x}_i = i$	5.91E -1	1.47E 0	1.19E 2	6.62E 2	4.82E 0	5.05E 1	4.43E -1	1.08E 0
10	$\mathbf{0}_n$	7.07E 0	8.22E 0	1.46E -6	2.64E -6	9.34E 0	1.51E 1	7.07E 0	8.22E 0
	$10.\boldsymbol{e}_1$	8.26E 0	1.00E 1	1.34E 1	3.21E 1	1.06E 1	1.62E 1	8.29E 0	1.01E 1
	$\boldsymbol{x}_i = i$	1.31E 1	2.62E 1	2.07E 2	2.58E 3	2.02E 1	1.90E 2	1.27E 1	2.96E 1
100	$\mathbf{0}_n$	1.18E 2	2.79E 2	1.07E -6	2.94E -6	1.03E 2	2.03E 2	1.03E 2	2.17E 2
	$10.\boldsymbol{e}_1$	1.12E 2	1.80E 2	1.08E 1	2.16E 1	1.03E 2	2.06E 2	1.15E 2	2.16E 2
	$\boldsymbol{x}_i = i$	1.29E 2	2.05E 2	1.81E 2	2.38E 3	1.03E 2	2.20E 2	1.32E 2	2.19E 2

$\boldsymbol{n} = 20$	ε = E–4	Davidon – Powell		Dixon		Goldfarb		SR1	
ξ	$\boldsymbol{X}_{opt}$	δ_{priem}	δ_{max}	δ_{priem}	δ_{max}	δ_{priem}	δ_{max}	δ_{priem}	δ_{max}
1	$\mathbf{0}_n$	6.93E -1	9.04E -1	9.73E -4	2.02E -3	2.08E 0	2.63E 0	2.59E -1	5.06E -1
	$10.\boldsymbol{e}_1$	9.42E -1	1.28E 0	1.84E 1	7.36E 1	2.48E 0	4.15E 0	5.70E -1	1.24E 0
	$\boldsymbol{x}_i = i$	8.49E -1	9.71E -1	1.19E 2	6.62E 2	4.82E 0	5.05E 1	4.43E -1	1.08E 0
10	$\mathbf{0}_n$	8.51E 0	1.00E 1	1.00E -3	2.18E -3	9.34E 0	1.51E 1	7.07E 0	8.22E 0
	$10.\boldsymbol{e}_1$	9.11E 0	1.07E 1	1.34E 1	3.21E 1	1.06E 1	1.62E 1	8.29E 0	1.01E 1
	$\boldsymbol{x}_i = i$	9.42E 0	1.49E 1	8.13E 1	6.02E 2	2.02E 1	1.90E 2	1.27E 1	2.96E 1
100	$\mathbf{0}_n$	1.00E 2	2.30E 2	2.00E -4	1.34E -3	1.03E 2	2.03E 2	1.03E 2	2.17E 2
	$10.\boldsymbol{e}_1$	9.40E 1	1.03E 2	1.32E 1	3.18E 1	1.03E 2	2.06E 2	1.15E 2	2.16E 2
	$\boldsymbol{x}_i = i$	1.53E 2	3.75E 2	1.61E 2	2.16E 3	1.03E 2	2.20E 2	1.32E 2	2.19E 2

$\boldsymbol{n} = 10$	ε = E–10	Davidon - Powell		Dixon		Goldfarb		SR1	
ξ	$\boldsymbol{X}_{opt}$	δ_{priem}	δ_{max}	δ_{priem}	δ_{max}	δ_{priem}	δ_{max}	δ_{priem}	δ_{max}
1	$\mathbf{0}_n$	2.81E -1	4.72E -1	2.64E -6	8.15E -6	1.43E 0	1.89E 0	3.02E -1	7.86E -1
	$10.\boldsymbol{e}_1$	5.80E -1	1.69E 0	1.65E 1	4.63E 1	1.75E 0	3.25E 0	5.05E -1	1.65E 0
	$\boldsymbol{x}_i = i$	3.42E -1	1.02E 0	4.28E 1	1.55E 2	1.57E 0	3.52E 0	3.81E -1	1.05E 0
10	$\mathbf{0}_n$	7.02E 0	8.47E 0	1.06E -6	3.43E -6	8.85E 0	1.59E 1	7.04E 0	8.47E 0
	$10.\boldsymbol{e}_1$	8.44E 0	9.96E 0	1.16E 1	2.31E 1	9.12E 0	1.96E 1	8.21E 0	9.95E 0

	$\boldsymbol{x}_i = i$	7.47E 0	9.61E 0	2.81E 1	1.28E 2	9.84E 0	2.24E 1	7.12E 0	9.10E 0
100	$\mathbf{0}_n$	8.36E 1	1.33E 2	1.11E -6	2.95E -6	9.75E 1	1.01E 2	8.57E 1	1.74E 2
	$10.\boldsymbol{e}_1$	8.16E 1	9.41E 1	1.21E 1	2.96E 1	9.74E 1	1.01E 2	8.25E 1	1.10E 2
	$\boldsymbol{x}_i = i$	8.55E 1	1.25E 2	3.48E 1	2.49E 2	9.78E 1	1.00E 2	8.38E 1	9.66E 1

$\boldsymbol{n} = 10$	ε = E–4	Davidon - Powell		Dixon		Goldfarb		SR1	
ξ	$\boldsymbol{X}_{\text{opt}}$	δ_{priem}	$\delta_{\max}$	δ_{priem}	$\delta_{\max}$	δ_{priem}	$\delta_{\max}$	δ_{priem}	$\delta_{\max}$
1	$\mathbf{0}_n$	5.06E -1	8.85E -1	1.12E -3	2.44E -3	1.43E 0	1.89E 0	3.02E -1	7.86E -1
	$10.\boldsymbol{e}_1$	8.84E -1	1.21E 0	1.65E 1	4.63E 1	1.75E 0	3.25E 0	5.04E -1	1.65E 0
	$\boldsymbol{x}_i = i$	8.08E -1	1.02E 0	3.51E 1	8.31E 1	1.57E 0	3.52E 0	3.81E -1	1.05E 0
10	$\mathbf{0}_n$	7.82E 0	9.05E 0	7.14E -4	1.83E -3	8.85E 0	1.59E 1	7.04E 0	8.47E 0
	$10.\boldsymbol{e}_1$	9.09E 0	1.05E 1	1.10E 1	1.78E 1	9.12E 0	1.96E 1	8.21E 0	9.95E 0
	$\boldsymbol{x}_i = i$	8.77E 0	9.82E 0	3.97E 1	2.33E 2	9.84E 0	2.24E 1	7.12E 0	9.10E 0
100	$\mathbf{0}_n$	9.10E 1	9.94E 1	2.14E -4	1.29E -3	9.75E 1	1.01E 2	8.57E 1	1.74E 2
	$10.\boldsymbol{e}_1$	9.11E 1	9.95E 1	1.15E 1	3.04E 1	9.74E 1	1.01E 2	8.25E 1	1.10E 2
	$\boldsymbol{x}_i = i$	9.23E 1	9.94E 1	6.60E 1	4.99E 2	9.78E 1	1.00E 2	8.38E 1	9.65E 1

$\boldsymbol{n} = 5$	ε = E–10	Davidon - Powell		Dixon		Goldfarb		SR1	
ξ	$\boldsymbol{X}_{\text{opt}}$	δ_{priem}	$\delta_{\max}$	δ_{priem}	$\delta_{\max}$	δ_{priem}	$\delta_{\max}$	δ_{priem}	$\delta_{\max}$
1	$\mathbf{0}_n$	2.30E -1	8.50E -1	5.43E -6	3.98E -5	1.10E 0	1.35E 0	1.92E -1	4.90E -1
	$10.\boldsymbol{e}_1$	4.85E -1	1.71E 0	1.43E 1	8.84E 1	1.06E 0	1.52E 0	4.68E -1	1.72E 0
	$\boldsymbol{x}_i = i$	2.24E -1	1.04E 0	1.08E 1	4.51E 1	1.07E 0	1.52E 0	2.11E -1	1.05E 0
10	$\mathbf{0}_n$	4.76E 0	8.46E 0	1.26E -4	2.50E -3	7.56E 0	9.14E 0	4.85E 0	8.46E 0
	$10.\boldsymbol{e}_1$	6.75E 0	1.27E 1	1.47E 1	7.71E 1	7.11E 0	8.82E 0	7.54E 0	1.96E 1

	$x_i = i$	4.80E 0	8.75E 0	1.29E 1	5.38E 1	7.48E 0	9.83E 0	4.64E 0	8.74E 0
100	$\mathbf{0}_n$	6.35E 1	9.44E 1	3.92E -7	1.48E -6	9.65E 1	9.90E 1	6.39E 1	9.49E 1
	$10.\boldsymbol{e}_1$	6.48E 1	9.45E 1	2.60E 1	2.72E 2	9.66E 1	9.89E 1	6.47E 1	9.67E 1
	$x_i = i$	6.33E 1	9.58E 1	1.27E 1	5.17E 1	9.67E 1	9.89E 1	6.39E 1	9.99E 1

$\boldsymbol{n} = 5$	ε = E–4	Davidon - Powell		Dixon		Goldfarb		SR1	
ξ	$\boldsymbol{X}_{\text{opt}}$	δ_{priem}	$\delta_{\max}$	δ_{priem}	$\delta_{\max}$	δ_{priem}	$\delta_{\max}$	δ_{priem}	$\delta_{\max}$
1	$\mathbf{0}_n$	4.58E -1	8.57E -1	1.15E -3	3.06E -3	1.10E 0	1.35E 0	1.95E -1	4.90E -1
	$10.\boldsymbol{e}_1$	8.06E -1	1.72E 0	1.43E 1	8.84E 1	1.06E 0	1.52E 0	4.68E -1	1.72E 0
	$x_i = i$	5.86E -1	1.04E 0	1.09E 1	4.23E 1	1.07E 0	1.52E 0	2.10E -1	1.05E 0
10	$\mathbf{0}_n$	6.20E 0	1.00E 1	7.50E -4	2.53E -3	7.56E 0	9.14E 0	4.85E 0	8.46E 0
	$10.\boldsymbol{e}_1$	7.61E 0	1.38E 1	1.87E 1	1.59E 2	7.11E 0	8.82E 0	7.54E 0	1.96E 1
	$x_i = i$	7.23E 0	1.38E 1	1.29E 1	7.50E 1	7.48E 0	9.83E 0	4.64E 0	8.74E 0
100	$\mathbf{0}_n$	7.63E 1	1.08E 2	4.47E -4	3.04E -3	9.65E 1	9.90E 1	6.40E 1	9.49E 1
	$10.\boldsymbol{e}_1$	7.51E 1	1.08E 2	1.20E 1	2.76E 1	9.66E 1	9.89E 1	6.47E 1	9.67E 1
	$x_i = i$	7.78E 1	1.08E 2	1.08E 1	3.66E 1	9.67E 1	9.89E 1	6.38E 1	9.99E 1

Počet “ n+1 “ cyklov ………… 10.

$\boldsymbol{n} = 20$	ε = E–10	Davidon - Powell		Dixon		Goldfarb		SR1	
ξ	$\boldsymbol{X}_{\text{opt}}$	δ_{priem}	$\delta_{\max}$	δ_{priem}	$\delta_{\max}$	δ_{priem}	$\delta_{\max}$	δ_{priem}	$\delta_{\max}$
1	$\mathbf{0}_n$	1.21E -6	2.82E -6	2.27E -7	2.04E -6	2.09E 0	2.64E 0	2.61E -7	8.53E -7
	$10.\boldsymbol{e}_1$	4.92E -1	1.28E 0	1.09E 1	1.55E 1	2.61E 0	4.18E 0	1.15E -10	6.87E -10
	$x_i = i$	1.32E -1	8.41E -1	2.02E 2	1.82E 3	2.85E 0	8.21E 0	9.21E -13	1.22E -11
10	$\mathbf{0}_n$	2.13E -3	6.59E -3	1.58E -7	1.57E -6	2.68E 0	5.46E 0	2.19E -7	1.19E -6
	$10.\boldsymbol{e}_1$	4.36E 0	8.22E 0	1.21E 1	2.19E 1	6.73E 0	2.80E 1	3.92E -10	1.95E -9

	$x_i = i$	7.62E 0	7.19E 1	5.51E 1	7.18E 1	3.39E 1	4.94E 2	1.35E -12	9.06E -12
100	$\mathbf{0}_n$	6.34E 0	9.51E 1	2.41E -7	1.58E -6	1.21E 2	5.91E 2	3.48E -2	2.69E -1
	$10.\boldsymbol{e}_1$	2.92E 0	2.37E 1	1.18E 1	4.88E 1	1.22E 2	6.04E 2	4.24E -10	2.34E -9
	$x_i = i$	6.94E 1	1.58E 2	7.44E 1	4.45E 2	1.26E 2	6.68E 2	2.41E -12	2.22E -11

$\boldsymbol{n}$ = 20	ε = E–4	Davidon - Powell		Dixon		Goldfarb		SR1	
ξ	$\boldsymbol{x}_{\mathrm{opt}}$	δ_{priem}	$\delta_{\max}$	δ_{priem}	$\delta_{\max}$	δ_{priem}	$\delta_{\max}$	δ_{priem}	$\delta_{\max}$
1	$\mathbf{0}_n$	7.01E -1	1.00E 0	5.17E -5	2.44E -4	2.09E 0	2.64E 0	1.22E -3	2.59E -3
	$10.\boldsymbol{e}_1$	9.83E -1	1.46E 0	1.09E 1	1.55E 1	2.61E 0	4.18E 0	1.36E -7	7.16E -7
	$x_i = i$	8.42E -1	9.81E -1	2.31E 2	1.81E 3	2.85E 0	8.21E 0	2.21E -11	1.53E -10
10	$\mathbf{0}_n$	8.31E 0	9.74E 0	2.12E -4	2.18E -3	2.68E 0	5.46E 0	1.26E -3	2.84E -3
	$10.\boldsymbol{e}_1$	9.06E 0	1.03E 1	1.25E 1	2.19E 1	6.73E 0	2.80E 1	6.14E -7	1.57E -6
	$x_i = i$	9.24E 0	1.24E 1	5.36E 1	5.41E 1	3.39E 1	4.94E 2	4.17E -9	4.05E -8
100	$\mathbf{0}_n$	9.80E 1	1.69E 2	5.52E -5	1.68E -4	1.21E 2	5.91E 2	4.87E -2	3.02E -1
	$10.\boldsymbol{e}_1$	9.37E 1	1.03E 2	1.58E 1	8.33E 1	1.22E 2	6.04E 2	2.51E -7	1.05E -6
	$x_i = i$	1.16E 2	2.35E 2	5.44E 1	6.05E 1	1.26E 2	6.68E 2	1.10E -9	7.17E -9

$\boldsymbol{n}$ = 10	ε = E–10	Davidon - Powell		Dixon		Goldfarb		SR1	
ξ	$\boldsymbol{x}_{\mathrm{opt}}$	δ_{priem}	$\delta_{\max}$	δ_{priem}	$\delta_{\max}$	δ_{priem}	$\delta_{\max}$	δ_{priem}	$\delta_{\max}$
1	$\mathbf{0}_n$	1.88E -7	8.88E -7	4.59E -7	1.12E -6	1.44E 0	1.76E 0	1.02E -7	7.68E -7
	$10.\boldsymbol{e}_1$	3.04E -2	6.08E -1	1.55E 1	6.20E 1	1.84E 0	3.31E 0	2.63E -10	1.36E -9
	$x_i = i$	5.91E -2	4.11E -1	3.64E 1	1.56E 2	1.75E 0	3.45E 0	1.49E -11	1.37E -10
10	$\mathbf{0}_n$	7.97E -4	2.79E -3	1.94E -7	1.23E -6	3.90E 0	1.02E 1	1.49E -7	5.92E -7
	$10.\boldsymbol{e}_1$	1.71E 0	8.58E 0	1.09E 1	2.14E 1	6.03E 0	3.36E 1	1.33E -9	9.24E -9

	$x_i = i$	2.74E 0	9.59E 0	2.39E 1	6.18E 1	8.11E 0	4.34E 1	4.21E -11	2.68E -10
100	$\mathbf{0}_n$	6.80E -1	7.62E 0	4.69E -7	2.05E -6	9.48E 1	1.18E 2	8.17E -2	8.55E-1
	$10.\boldsymbol{e}_1$	5.18E 0	3.45E 1	1.08E 1	2.15E 1	9.45E 1	1.19E 2	1.34E -9	1.31E -8
	$x_i = i$	4.67E 0	4.12E 1	2.32E 1	4.23E 1	9.57E 1	1.14E 2	2.38E -11	7.29E -11

$\boldsymbol{n}$ = 10	ε = E–4	Davidon - Powell		Dixon		Goldfarb		SR1	
ξ	$\boldsymbol{x}_{opt}$	δ_{priem}	δ_{max}	δ_{priem}	δ_{max}	δ_{priem}	δ_{max}	δ_{priem}	δ_{max}
1	$\mathbf{0}_n$	5.10E -1	1.20E 0	4.36E -4	2.12E -3	1.44E 0	1.76E 0	9.28E -4	3.05E -3
	$10.\boldsymbol{e}_1$	9.38E -1	1.68E 0	1.57E 1	6.20E 1	1.84E 0	3.31E 0	1.97E -7	1.62E -6
	$x_i = i$	7.89E -1	1.06E 0	3.75E 1	1.60E 2	1.75E 0	3.45E 0	3.18E -9	2.79E -8
10	$\mathbf{0}_n$	7.48E 0	8.89E 0	2.93E -4	1.37E -3	3.90E 0	1.02E 1	1.00E -3	3.14E -3
	$10.\boldsymbol{e}_1$	8.82E 0	1.06E 1	1.23E 1	2.76E 1	6.03E 0	3.36E 1	2.05E -6	5.98E -6
	$x_i = i$	8.70E 0	9.83E 0	2.95E 1	1.34E 2	8.11E 0	4.34E 1	2.99E -7	5.43E -6
100	$\mathbf{0}_n$	9.10E 1	9.95E 1	1.97E -4	1.29E -3	9.48E 1	1.18E 2	8.57E -2	8.45E -1
	$10.\boldsymbol{e}_1$	9.11E 1	9.95E 1	1.23E 1	4.55E 1	9.45E 1	1.19E 2	1.19E -6	4.29E -6
	$x_i = i$	9.13E 1	9.96E 1	3.65E 1	2.81E 2	9.57E 1	1.14E 2	6.86E -8	2.66E -7

$\boldsymbol{n}$ = 5	ε = E–10	Davidon - Powell		Dixon		Goldfarb		SR1	
ξ	$\boldsymbol{x}_{opt}$	δ_{priem}	δ_{max}	δ_{priem}	δ_{max}	δ_{priem}	δ_{max}	δ_{priem}	δ_{max}
1	$\mathbf{0}_n$	8.01E -2	8.56E -1	9.22E -7	7.80E -6	1.22E 0	1.46E 0	4.58E -7	2.39E -6
	$10.\boldsymbol{e}_1$	7.89E -2	9.86E -1	1.06E 1	2.23E 1	1.30E 0	1.71E 0	2.07E -9	8.65E -9
	$x_i = i$	1.84E 0	3.68E 1	9.16E 0	2.06E 1	1.32E 0	1.69E 0	9.57E -10	7.82E -9
10	$\mathbf{0}_n$	4.47E -1	8.46E 0	5.56E -7	4.11E -6	2.62E 0	6.68E 0	1.98E -7	7.15E -7
	$10.\boldsymbol{e}_1$	4.73E -1	9.47E 0	1.12E 1	2.64E 1	2.96E 0	1.11E 1	1.24E -9	1.07E -8

	$x_i = i$	3.60E -1	7.21E 0	9.78E 0	2.71E 1	3.37E 0	1.05E 1	6.91E -10	3.80E -9
100	$\mathbf{0}_n$	3.40E -1	4.25E 0	3.17E -7	1.18E -6	8.87E 1	9.51E 1	8.65E -2	3.94E -1
	$10.\boldsymbol{e}_1$	1.08E -1	9.45E 1	1.40E 1	7.58E 1	8.88E 1	9.51E 1	2.90E -10	3.61E -9
	$x_i = i$	1.12E 0	1.63E 1	8.78E 0	1.62E 1	8.91E 1	9.63E 1	1.13E -6	2.26E -5

$\boldsymbol{n}$ = 5	ε = E–4	Davidon - Powell		Dixon		Goldfarb		SR1	
ξ	$\boldsymbol{x}_{opt}$	δ_{priem}	δ_{max}	δ_{priem}	δ_{max}	δ_{priem}	δ_{max}	δ_{priem}	δ_{max}
1	$\mathbf{0}_n$	4.23E -1	9.03E -1	9.98E -4	3.06E -3	1.22E 0	1.46E 0	9.67E -4	4.77E -3
	$10.\boldsymbol{e}_1$	7.32E -1	1.79E 0	1.05E 1	2.23E 1	1.30E 0	1.71E 0	3.14E -6	3.31E -5
	$x_i = i$	5.18E -1	1.45E 0	8.78E 0	2.06E 1	1.32E 0	1.69E 0	3.74E -7	1.70E -6
10	$\mathbf{0}_n$	5.41E 0	1.10E 1	6.04E -4	1.74E -3	2.62E 0	6.68E 0	8.81E -4	5.21E -3
	$10.\boldsymbol{e}_1$	6.75E 0	1.02E 1	1.19E 1	2.78E 1	2.96E 0	1.11E 1	1.74E -6	7.23E -6
	$x_i = i$	6.28E 0	1.90E 1	1.35E 1	9.36E 1	3.37E 0	1.05E 1	1.96E -6	1.95E -5
100	$\mathbf{0}_n$	7.10E 1	1.53E 2	4.15E -4	3.04E -3	8.87E 1	9.51E 1	8.18E -2	3.25E -1
	$10.\boldsymbol{e}_1$	8.06E 1	1.44E 2	1.00E 1	1.65E 1	8.88E 1	9.51E 1	2.25E -6	1.31E -5
	$x_i = i$	7.65E 1	1.53E 2	9.65E 0	2.42E 1	8.91E 1	9.63E 1	5.97E -4	1.19E -2

Kvadratické funkcie.

$\boldsymbol{n}$ = 25	ε = E–10	Davidon - Powell			Dixon		Goldfarb		SR1	
ξ	$\boldsymbol{x}_{opt}$	δ_{priem}	δ_{max}	PPI	δ_{priem}	δ_{max}	δ_{priem}	δ_{max}	δ_{priem}	δ_{max}
1	$\mathbf{0}_n$	1.70E -8	1.10E -7	34.60	3.58E -3	6.92E -2	2.95E -18	9.80E -18	3.81E -4	7.37E -3
	10E5 $.\boldsymbol{e}_1$	2.54E -8	1.40E -7	34.86	3.96E -3	6.45E -2	3.53E -13	7.54E -13	3.18E -4	4.83E -3
	$x_i = i$	1.70E -8	1.10E -7	34.60	3.58E -3	6.92E -2	3.10E -16	1.01E -15	3.37E -4	5.39E -3
10	$\mathbf{0}_n$	2.05E -8	8.04E -8	35.22	3.54E -2	7.17E -1	1.30E -16	6.16E -16	2.07E -3	1.62E -2
	10E5 $.\boldsymbol{e}_1$	2.17E -8	1.28E -7	35.42	6.73 E -2	1.04E 0	2.54E -12	7.60E -12	2.09E -3	1.63E -2

	$x_i = i$	2.05E -8	8.04E -8	35.22	3.54E -2	7.17E -1	2.27E -15	5.25E -15	2.08E -3	1.63E -2
100	$\mathbf{0}_n$	2.19E -8	1.22E -7	35.86	7.84E -1	1.17E 1	1.50E -14	4.34E -14	2.18E -2	2.05E -1
	10E5 .$\boldsymbol{e}_1$	2.76E -8	1.22E -7	35.94	8.26E -1	1.17E 1	2.93E -11	5.85E -11	2.18E -2	2.01E -1
	$x_i = i$	2.19E -8	1/22E -7	35.86	7.84E -1	1.17E 1	3.57E -14	1.41E -13	2.13E -2	1.83E -1

$\boldsymbol{n}$ = 25	ε = E–4	Davidon - Powell			Dixon		Goldfarb		SR1	
ξ	x_{opt}	δ_{priem}	δ_{max}	PPI	δ_{priem}	δ_{max}	δ_{priem}	δ_{max}	δ_{priem}	δ_{max}
1	$\mathbf{0}_n$	1.53E -5	1.00E -4	32.60	1.90E -2	4.42E -2	2.95E -18	9.80E -18	1.37E -4	1.12E -3
	10E5 .$\boldsymbol{e}_1$	1.53E -5	1.00E -4	32.60	1.88E -2	4.42E -2	3.53E -13	7.54E -13	1.32E -4	1.11E -3
	$x_i = i$	1.53E -5	1.00E -4	32.60	1.90E -2	4.42E -2	3.10E -16	1.01E -15	1.36E -4	1.11E -3
10	$\mathbf{0}_n$	2.45E -5	1.25E -4	33.30	7.52E -2	8.38E -1	1.30E -16	6.16E -16	2.04E -3	1.62E -2
	10E5 .$\boldsymbol{e}_1$	2.45E -5	1.25E -4	33.30	9.02E -2	1.04E 0	2.54E -12	7.60E -12	2.04E -3	1.63E -2
	$x_i = i$	2.45E -5	1.25E -4	33.30	7.52E -2	8.38E -1	2.27E -15	5.25E -15	2.04E -3	1.63E -2
100	$\mathbf{0}_n$	2.44E -5	1.92E -4	34.00	7.91E -1	1.17E 1	1.50E -14	4.34E -14	2.18E -2	2.05E -1
	10E5 .$\boldsymbol{e}_1$	2.44E -5	1.92E -4	34.00	8.33E -1	1.17E 1	2.93E -11	5.85E -11	2.18E -2	2.01E -1
	$x_i = i$	2.44E -5	1.92E -4	34.00	7.91E -1	1.17E 1	3.57E -14	1.41E -13	2.13E -2	1.83E -1

$\boldsymbol{n}$ = 15	ε = E–10	Davidon - Powell			Dixon		Goldfarb		SR1	
ξ	x_{opt}	δ_{priem}	δ_{max}	PPI	δ_{priem}	δ_{max}	δ_{priem}	δ_{max}	δ_{priem}	δ_{max}
1	$\mathbf{0}_n$	1.28E -8	1.12E -7	23.18	1.63E -3	3.41E -2	1.47E -18	2.74E -18	2.26E -5	1.55E -4
	10E5 .$\boldsymbol{e}_1$	1.82E -8	1.06E -7	23.32	2.24E -3	3.41E -2	1.65E -13	4.38E -13	2.26E -5	1.47E -4
	$x_i = i$	1.28E -8	1.12E -7	23.18	1.63E -3	3.41E -2	1.08E -16	2.25E -16	2.23E -5	1.57E -4
10	$\mathbf{0}_n$	2.08E -8	9.40E -8	23.56	2.53E -2	3.21E -1	8.12E -17	1.99E -16	2.39E -4	2.32E -3
	10E5 .$\boldsymbol{e}_1$	3.15E -8	1.70E -7	23.68	2.65E -2	3.21E -1	1.50E -12	4.84E -12	2.39E -4	2.32E -3

	$\boldsymbol{x}_i = i$	2.08E -8	9.40E -8	23.56	2.53E -2	3.21E -1	9.01E -16	1.79E -15	2.39E -4	2.32E -3
100	$\mathbf{0}_n$	1.61E -8	7.73E -8	24.26	3.00E -1	3.03E 0	9.72E -15	2.56E -14	4.78E -3	1.08E -1
	10E5 .$\boldsymbol{e}_1$	1.88E -8	8.17E -8	24.32	3.00E -1	3.03E 0	1.68E -11	3.45E -11	4.86E -3	1.09E -1
	$\boldsymbol{x}_i = i$	1.61E -8	7.73E -8	24.26	3.00E -1	3.03E 0	1.48E -14	7.68E -14	4.79E -3	1.08E -1

$\boldsymbol{n}$ = 15	ε = E–4	Davidon – Powell			Dixon		Goldfarb		SR1	
ξ	$\boldsymbol{x}_{opt}$	δ_{priem}	δ_{max}	PPI	δ_{priem}	δ_{max}	δ_{priem}	δ_{max}	δ_{priem}	δ_{max}
1	$\mathbf{0}_n$	1.69E -5	1.66E -4	21.22	8.14E -2	7.98E -1	1.47E -18	2.74E -18	3.04E -5	1.70E -4
	10E5 .$\boldsymbol{e}_1$	1.69E -5	1.66E -4	21.22	8.14E -2	7.98E -1	1.65E -13	4.38E -13	3.06E -5	1.70E -4
	$\boldsymbol{x}_i = i$	1.69E -5	1.66E -4	21.22	8.14E -2	7.98E -1	1.08E -16	2.25E -16	3.03E -5	1.70E -4
10	$\mathbf{0}_n$	2.94E -5	1.81E -4	21.78	1.09E -1	4.14E -1	8.12E -17	1.99E -16	2.27E -4	2.32E -3
	10E5 .$\boldsymbol{e}_1$	2.94E -5	1.81E -4	21.78	1.09E -1	4.14E -1	1.50E -12	4.84E -12	2.29E -4	2.32E -3
	$\boldsymbol{x}_i = i$	2.94E -5	1.81E -4	21.78	1.09E -1	4.14E -1	9.01E -16	1.79E -15	2.28E -4	2.32E -3
100	$\mathbf{0}_n$	3.25E -5	1.30E -4	22.38	3.00E -1	3.03E 0	9.72E -15	2.56E -14	4.78E -3	1.08E -1
	10E5 .$\boldsymbol{e}_1$	3.25E -5	1.30E -4	22.38	3.00E -1	3.03E 0	1.68E -11	3.45E -11	4.86E -3	1.09E -1
	$\boldsymbol{x}_i = i$	3.25E -5	1.30E -4	22.38	3.00E -1	3.03E 0	1.48E -14	7.68E -14	4.79E -3	1.08E -1

$\boldsymbol{n}$ = 5	ε = E–10	Davidon - Powell			Dixon		Goldfarb		SR1	
ξ	$\boldsymbol{x}_{opt}$	δ_{priem}	δ_{max}	PPI	δ_{priem}	δ_{max}	δ_{priem}	δ_{max}	δ_{priem}	δ_{max}
1	$\mathbf{0}_n$	1.97E -8	1.44E -7	10.22	1.20E -10	2.93E -10	1.79E -19	8.27E -19	1.50E -8	3.90E -7
	10E5 .$\boldsymbol{e}_1$	2.05E -8	1.44E -7	10.22	1.19E -10	2.92E -10	2.95E -14	1.29E -13	1.50E -8	3.90E -7
	$\boldsymbol{x}_i = i$	1.97E -8	1.44E -7	10.22	1.20E -10	2.93E -10	2.26E -18	7.60E -18	1.50E -8	3.90E -7
10	$\mathbf{0}_n$	2.18E -8	1.89E -7	10.74	1.05E -9	2.99E -9	1.89E -17	6.52E -17	9.33E -8	1.22E -6
	10E5 .$\boldsymbol{e}_1$	2.23E -8	1.89E -7	10.74	1.05E -9	2.99E -9	2.43E -13	1.20E -12	9.37E -8	1.23E -6

	$\boldsymbol{x}_i = i$	2.18E -8	1.89E -7	10.74	1.05E -9	2.99E -9	3.43E -17	1.34E -16	9.33E -8	1.22E -6
100	$\mathbf{0}_n$	1.28E -8	1.29E -7	11.12	1.22E -8	3.92E -8	1.96E -15	7.40E -15	1.95E -6	1.21E -5
	10E5 .$\boldsymbol{e}_1$	1.41E -8	1.29E -7	11.12	1.22E -8	3.92E -8	2.73E -12	1.50E -11	1.95E -6	1.21E -5
	$\boldsymbol{x}_i = i$	1.28E -8	1.29E -7	11.12	1.22E -8	3.92E -8	2.26E -15	6.94E -15	1.95E -6	1.21E -5

$\boldsymbol{n} = 5$	ε = E–4	Davidon - Powell			Dixon		Goldfarb		SR1	
ξ	$\boldsymbol{x}_{\mathrm{opt}}$	δ_{priem}	$\delta_{\max}$	PPI	δ_{priem}	$\delta_{\max}$	δ_{priem}	$\delta_{\max}$	δ_{priem}	$\delta_{\max}$
1	$\mathbf{0}_n$	1.59E -5	1.13E -4	8.90	2.99E -2	1.41E 0	1.79E -19	8.27E -19	1.50E -8	3.90E -7
	10E5 .$\boldsymbol{e}_1$	1.59E -5	1.13E -4	8.90	2.99E -2	1.41E 0	2.95E -14	1.29E -13	1.50E -8	3.90E -7
	$\boldsymbol{x}_i = i$	1.59E -5	1.13E -4	8.90	2.99E -2	1.41E 0	2.26E -18	7.60E -18	1.50E -8	3.90E -7
10	$\mathbf{0}_n$	2.44E -5	2.10E -4	9.32	1.05E -9	2.99E -9	1.89E -17	6.52E -17	9.33E -8	1.22E -6
	10E5 .$\boldsymbol{e}_1$	2.44E -5	2.10E -4	9.32	1.05E -9	2.99E -9	2.43E -13	1.20E -12	9.37E -8	1.23E -6
	$\boldsymbol{x}_i = i$	2.44E -5	2.10E -4	9.32	1.05E -9	2.99E -9	3.43E -17	1.34E -16	9.33E -8	1.22E -6
100	$\mathbf{0}_n$	2.30E -5	1.43E -4	9.84	1.22E -8	3.92E -8	1.96E -15	7.40E -15	1.95E -6	1.21E -5
	10E5 .$\boldsymbol{e}_1$	2.30E -5	1.43E -4	9.84	1.22E -8	3.92E -8	2.73E -12	1.50E -11	1.95E -6	1.21E -5
	$\boldsymbol{x}_i = i$	2.30E -5	1.43E -4	9.84	1.22E -8	3.92E -8	2.26E -15	6.94E -15	1.95E -6	1.21E -5

9. Vyhodnotenie tabuliek

Kvadratické funkcie.

Všetky štyri testované metódy vykazujú či už viac alebo menej uspokojivú konvergenciu pre kvadratickú funkciu.

Najviac vyniká Goldfarbova metóda, ktorá pri všetkých použitých voľbách parametrov dosahovala výrazne najväčšiu presnosť.

Možno si všimnúť, že pri nižších dimenziách konvergujú takmer všetky metódy s väčšou presnosťou. Výnimku tvorí Davidon-Powellova metóda, u ktorej je zlepšenie konvergencie pri zmenšení dimenzie zanedbateľné.

Zaujímavá je aj citlivosť Goldfarbovej metódy vzhľadom na bod optima. Rozdiely v dosahovanej presnosti sú pri zmene vzdialenosti bodu optima od počiatku rádovo až 10^{5}. Pri ostatných troch metódach sú rozdiely v presnosti (vzhľadom na uvedenú vzdialenosť) pri danom ξ takmer nulové.

Podľa očakávania pozorujeme, že s narastajúcou vzdialenosťou štartovacieho bodu od bodu optima, výraznejšie klesá presnosť metódy. Tu je opäť výnimkou Davidon-Powellova metóda, u ktorej je tento jav minimálny.

Zmena parametra ε nemala okrem Davidon-Powellovej metódy badateľný vplyv na konvergenciu. Pri zväčšení ε síce v Davidon-Powellovej metóde klesala výsledná presnoť, ale tento pokles v presnosti bol vykompenzovaný poklesom v počte iterácií.

Je nutné pripomenúť, že Davidon-Powellova metóda vyžadovala na nájednie aproximácie bodu minima o niekoľko iterácii viac ako ostatné metódy (to je dôsledok tzv. slabých iterácií, ktoré nezaručujú konvergenciu k bodu optima). Napríklad pri dimenzii $n = 25$ bolo potrebných 32 až 35 iterácií, kým zvyšné tri metódy “vystačili“ s (n+1), t.j. s 26 iteráciami. Avšak nemožno si nevšimnúť výrazné rozdiely v presnosti (pri väčších dimenziách) v porovnaní s Dixonovou a SR1 metódou. Preto azda stojí za zamyslenie, či by sme neboli ochotní akceptovať o niekoľko iterácií viac a použiť namiesto Dixonovej alebo SR1 metódy radšej Davidon-Powellovu metódu.

Bikvadratické funkcie.

V prípade bikvadratických funkcií sú žiaľ výsledky skeptickejšie. Jedine u Dixonovej metódy s nulovým bodom optima, a SR1 metódy pri väčšom počte použitých (n+1)-cyklov, možno hovoriť o uspokojivej konvergencii. Ostatné metódy nielenže nekonvergujú, ba v niektorých prípadoch je vzdialenosť výsledného bodu od bodu optima výrazne väčšia, ako bola štartovacia vzdialenosť. Ak si však uvedomíme, že ani "klasická" newtonová metóda (s jednotkovou dĺžkou kroku) nezaručuje konvergenciu, tak uvedené zistenie nie je až také prekvapivé (žiaľ v literatúre sa na to zabúda explicitne upozorniť).

Napriek tomu možno konštatovať, že pri zvýšení počtu (n+1)-cyklov majú všetky metódy tendenciu zlepšovať konvergenciu (v niektorých prípadoch je síce rozdiel nebadateľný, alebo až opačný, ale takých prípadov je výrazne menej). V tomto prípade viniká SR1 metóda, ktorá pri zvýšení počtu (n+1)-cyklov z trojky na desiatku dosahovala zlepšenie presnosti konvergencie rádovo až 10^{11}.

Podobne ako pri kvadratických funkciách, aj tu pozorujeme viditeľné zhoršenie konvergenčnej presnosti pri zväčšení vzdialenosti štartovacieho bodu a bodu optima.

Všetky metódy (okrem Dixonovej) sú takmer invariantné vzhľadom na vzdialenosť bodu optima od počiatku.

Záver

Diplomová práca pojednáva o špeciálnej skupine kvázinewtonovských metód, ktoré nepožadujú (v každej iterácii) optimálnu dĺžku kroku.

Prezentujeme štyri najznámejšie metódy uvedenej skupiny. Všetky štyri metódy sme podrobne popísali. Najpracnejšie bolo zvládnutie Davidonovej metódy, ktorá je v originálnom článku veľmi ťažkopádne popísaná a mnohé tvrdenia bolo potrebné korigovať, resp. príslušné dôkazy dopĺňať množstvom technických detailov. (Táto časť trvala takmer celý štvrtý ročník).

Všetky štyri metódy sme naprogramovali v jazyku Pascal a realizovali sme pomerne rozsiahli numerický experiment (až do rozmeru n = 25 s náhodne generovanými sériami úloh dĺžky 50).

Naše numerické experimenty vyjavili závažné nedostatky uvedenej skupiny kvázinewtonovských metód, o ktorých nebola zmienka v existujúcej literatúre.

Numerický experiment potvrdzuje (n+1)-krokovú konvergenciu týchto metód pri aplikácii na kvadratickú funkciu. Avšak tiež naznačuje, že pri aplikovaní spomínaných metód s konštantnou dĺžkou kroku na bikvadratickú funkciu, nemožno očakávať dobrú konvergenciu k bodu minima.

Vysvetlenie možno hľadať už pri samotnom odvodzovaní kvázinewtonovských formúl. Totiž tieto metódy vychádzajú z tzv. modifikovanej newtonovej iteračnej metódy. Newtonova metóda je založená na lokálnej aproximácii účelovej funkcie kvadratickou funkciou, a je známa jej nedobrá konvergencia k bodu minima nekvadratickej funkcie (za predpokladu, že sa nenachádzame "dostatočne blízko" bodu minima). Tento nedostatok newtonovej metódy je možné odstrániť voľbou optimálnej dĺžky kroku. Takáto modifikovaná metóda je základom kvázinewtonovských metód, ktoré vo všeobecnosti používajú optimálnu dĺžku kroku. Experiment naznačuje, že použitie konštantnej dĺžky kroku nezaručuje konvergenciu kvázinewtonovských metód.

Výnimkou je SR1 metóda, ktorá je z teoretického hľadiska nestabilná a vo všeobecnosti môže generovať indefinitné matice. Avšak v nami použitom experimente nielen že nedošlo k jej zlyhaniu, ale jej konvergencia pre bikvadratické funkcie bola výborná a výrazne lepšia ako u zvyšných štyroch metód.