

ОБ ОДНОМ СПОСОБЕ ВЫБОРА ШАГА В МЕТОДЕ ДОВЕРИТЕЛЬНОЙ ОБЛАСТИ

Е. А. Котельников

Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН,
630090, Новосибирск, Россия

УДК 519.853

Предложено аналитическое представление параметров траектории шага в методе доверительной области при минимизации гладкой выпуклой функции. Вследствие сложности применения в практических вычислениях полученных результатов представлен вариант аппроксимации данной траектории.

Ключевые слова: оптимизация, доверительная область, траектория шага, квадратичная модель.

An analytical representation of the step trajectory parameters for a trust region method in smooth convex function minimization is proposed. Because of the complexity of results application in practical calculations the curve fitting variant is recommended.

Key words: optimization, trust region, step trajectory, the quadratic model.

Введение. Рассматривается задача безусловной минимизации дважды непрерывно дифференцируемой выпуклой функции $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$. В некоторой δ_k -окрестности точки $\mathbf{x}_k \in \mathbb{R}^n$ ($\|\mathbf{x}_k + \mathbf{s}\|_2 \leq \delta_k$) функцию f можно представить квадратичной моделью

$$m(\mathbf{x}_k + \mathbf{s}) = f(\mathbf{x}_k) + \mathbf{g}^T \mathbf{s} + \frac{1}{2} \mathbf{s}^T G \mathbf{s}, \quad (1)$$

где $\mathbf{g} = \nabla f(\mathbf{x}_k)$; $G = G(\mathbf{x}_k)$ — матрица Гессе в точке \mathbf{x}_k или некоторая ее оценка. При удачном выборе значения δ_k модель $m(\mathbf{x}_k + \mathbf{s})$ с хорошей точностью может аппроксимировать функцию f в δ_k -окрестности. Такая δ_k -окрестность называется доверительной областью, т. е. областью, в которой можно доверять модели $m(\mathbf{x}_k + \mathbf{s})$ в том, что она адекватно моделирует функцию f [1]. Имея такую область, при выборе вектора спуска \mathbf{s}_k из точки \mathbf{x}_k можно требовать, чтобы, во-первых, точка $\mathbf{x}_k + \mathbf{s}_k$ находилась в δ_k -окрестности, во-вторых, для всех \mathbf{s} , удовлетворяющих условию $\|\mathbf{s}\|_2 \leq \delta_k$, выполнялось неравенство $f(\mathbf{x}_k + \mathbf{s}_k) \leq f(\mathbf{x}_k + \mathbf{s})$. Следовательно, вектор \mathbf{s}_k должен являться решением задачи

$$\min m(\mathbf{x}_k + \mathbf{s}); \quad (2)$$

$$\|\mathbf{s}\|_2 \leq \delta_k. \quad (3)$$

Метод минимизации, на каждой итерации которого определяется δ_k и решается данная задача, называется методом доверительной области.

Согласно [1] решением задачи (2), (3) является вектор

$$\mathbf{s}(\mu) = -(G + \mu I)^{-1} \mathbf{g} \quad (4)$$

при единственном значении $\mu \geq 0$, таком что $\|\mathbf{s}(\mu)\|_2 = \delta_k$. В случае выполнения неравенства $\|\mathbf{s}(0)\|_2 < \delta_k$ решением задачи (2), (3) является вектор $\mathbf{s}(0) = \mathbf{s}^N = -G^{-1} \mathbf{g}$ — ньютоновское направление. При любом значении $\mu \geq 0$ $\mathbf{s}(\mu)$ является направлением спуска для функции f из точки \mathbf{x}_k .

Следует отметить, что использование квадратичной модели $m(\mathbf{x}_k + \mathbf{s})$ (1) для выбора вектора сдвига \mathbf{s}_k возможно и в случае, когда функция f не выпукла. Для этого, в случае если матрица $\nabla^2 f(\mathbf{x}_k)$ не является положительно-определенной, в гессиан модели вносится возмущение, т. е. находится μ такое, что матрица $G = \nabla^2 f(\mathbf{x}_k) + \mu I$ положительно определена. Получившийся таким образом квазиньютоновский шаг $\mathbf{s} = -G^{-1} \mathbf{g}$ есть шаг в точку минимума модели $m(\mathbf{x}_k + \mathbf{s})$ в некоторой окрестности точки \mathbf{x}_k [1].

В данном случае предполагается, что матрица G положительно определена. Кроме того, не рассматриваются способы пересчета размера доверительной области, а только вычисляются траектория $\mathbf{s}(\mu)$ и ее аппроксимация.

Существующие методы решения задачи (2), (3) являются приближенными. Например, в [1] описываются два вычислительных метода: метод с ограниченным криволинейным шагом и метод с шагом в виде плоской ломаной линии, в котором проводится кусочно-линейная аппроксимация траектории $\mathbf{s}(\mu)$.

В данной работе предлагается описание в явном виде траектории $\mathbf{s}(\mu)$, в котором формулы параметров траектории удобны для анализа поведения кривой при изменении значения μ , но неудобны для практического использования в силу высокой трудоемкости вычисления этих параметров. Поэтому в ущерб точности решения задачи (2), (3) вместо траектории $\mathbf{s}(\mu)$ предлагается использовать ее приближение, для вычисления которого требуется значительно меньшее число операций.

Алгоритм. Рассмотрим матрицу A размером $n \times n$, столбцами которой являются векторы

$$\mathbf{p}_1 = G^{-1} \mathbf{g}, \quad \mathbf{p}_2 = (G^{-1})^2 \mathbf{g}, \quad \dots, \quad \mathbf{p}_n = (G^{-1})^n \mathbf{g}, \quad (5)$$

и выясним, при каких условиях она является невырожденной. Обозначим через $\mathbf{z}_1, \mathbf{z}_2, \dots, \mathbf{z}_n$ систему ортонормированных собственных векторов матрицы G^{-1} и через $\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n$ набор соответствующих им собственных значений. Тогда матрицу G^{-1} можно представить в виде ZSZ^T , где $Z = (\mathbf{z}_1, \mathbf{z}_2, \dots, \mathbf{z}_n)$ — ортогональная матрица; $S = \text{diag}(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n)$. Пусть $\mathbf{h} = Z^T \mathbf{g}$ ($h_i = \mathbf{z}_i^T \mathbf{g}$, $i = 1, 2, \dots, n$), тогда столбцы \mathbf{p}_i матрицы A равны $\mathbf{p}_1 = ZSh$, $\mathbf{p}_2 = ZS^2 \mathbf{h}, \dots, \mathbf{p}_n = ZS^n \mathbf{h}$, или

$$A = ZDW, \quad (6)$$

где $D = \text{diag}(\sigma_1 h_1, \sigma_2 h_2, \dots, \sigma_n h_n)$,

$$W = \begin{bmatrix} 1 & \sigma_1 & \sigma_1^2 & \dots & \sigma_1^{n-1} \\ 1 & \sigma_2 & \sigma_2^2 & \dots & \sigma_2^{n-1} \\ \vdots & & & & \\ 1 & \sigma_n & \sigma_n^2 & \dots & \sigma_n^{n-1} \end{bmatrix}.$$

Отсюда, матрица A вырождена, если выполнено хотя бы одно из следующих условий:

1. Для некоторого j $h_j = 0$, т. е. вектор \mathbf{g} ортогонален хотя бы одному собственному вектору матрицы G^{-1} .

2. Матрица W вырождена, т. е. $\det W$ (определитель Вандермонда) равен нулю. Это возможно тогда и только тогда, когда $\sigma_i = \sigma_j$ хотя бы для одной пары индексов i, j ($i \neq j$) [2], что означает кратность собственных значений матрицы G^{-1} .

Случай, когда матрица A невырождена. Выберем в качестве базиса пространства \mathbb{R}^n векторы $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{p}_n$ из (5) и представим разложение вектора \mathbf{g} по этому базису в виде

$$\mathbf{g} = \sum_{i=1}^n \gamma_i \mathbf{p}_i. \quad (7)$$

Вектор $\gamma \in \mathbb{R}^n$ можно найти, решив систему линейных алгебраических уравнений $A\gamma = \mathbf{g}$.

Заметим, что $\gamma_n \neq 0$, так как в противном случае $\mathbf{g} - \sum_{i=1}^{n-1} \gamma_i \mathbf{p}_i = 0$ и $G^{-1}(\mathbf{g} - \sum_{i=1}^{n-1} \gamma_i \mathbf{p}_i) = \mathbf{p}_1 - \sum_{i=2}^n \gamma_i \mathbf{p}_i = 0$, что невозможно.

Утверждение 1. $\gamma_1 > 0, \gamma_2 < 0, \dots, (-1)^{n-1} \gamma_n > 0$.

Действительно, пусть (σ, \mathbf{z}) — произвольная собственная пара матрицы G^{-1} . Умножив обе части равенства (7) на \mathbf{z} , получаем $\mathbf{g}^T \mathbf{z} = \sum_{k=1}^n \gamma_k \sigma^k (\mathbf{g}^T \mathbf{z})$, так как $\mathbf{p}_k^T \mathbf{z} = (G^{-1})^k \mathbf{z} = \sigma^k \mathbf{z}$. Из условия $\mathbf{g}^T \mathbf{z} \neq 0$ находим

$$\sum_{k=1}^n \gamma_k \sigma^k = 1. \quad (8)$$

Последнее равенство верно для собственных значений $\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n$ и, следовательно, $\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_n$ можно рассматривать как единственное решение системы линейных алгебраических уравнений

$$\sum_{k=1}^n \sigma_j^k \gamma_k = 1, \quad j = 1, 2, \dots, n. \quad (9)$$

Единственность следует из того, что матрица этой системы уравнений невырождена и равна $\text{diag}(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n)W$, где матрица W определена в (6).

Запишем равенство (8) в виде

$$\sigma^n + \frac{\gamma_{n-1}}{\gamma_n} \sigma^{n-1} + \frac{\gamma_{n-2}}{\gamma_n} \sigma^{n-2} + \dots + \frac{\gamma_1}{\gamma_n} \sigma - \frac{1}{\gamma_n} = 0$$

и сравним его с характеристическим уравнением для матрицы G^{-1}

$$\sigma^n - \varphi_1 \sigma^{n-1} + \varphi_2 \sigma^{n-2} + \dots + (-1)^n \varphi_n = 0,$$

где $\varphi_1 = \sum_{i=1}^n \sigma_i$, $\varphi_2 = \sum_{i>j} \sigma_i \sigma_j$, \dots , $\varphi_n = \sigma_1 \sigma_2 \dots \sigma_n$ и $\varphi_i > 0$ при всех $i = 1, 2, \dots, n$. Тогда в силу единственности решения системы (9) имеем

$$\begin{aligned} -\frac{1}{\gamma_n} &= (-1)^n \varphi_n, \text{ или } (-1)^{n-1} \gamma_n > 0, \\ \frac{\gamma_1}{\gamma_n} &= (-1)^{n-1} \varphi_{n-1}, \text{ или } \gamma_1 = (-1)^{n-1} \gamma_n \varphi_{n-1} > 0, \\ \frac{\gamma_2}{\gamma_n} &= (-1)^{n-2} \varphi_{n-2}, \text{ или } \gamma_2 = (-1)^{n-2} \gamma_n \varphi_{n-2} < 0. \end{aligned}$$

Аналогично получаем

$$\frac{\gamma_{n-2}}{\gamma_n} = \varphi_2, \text{ или } \gamma_{n-2}(-1)^{n-3} = (-1)^{n-3}\gamma_n\varphi_2 > 0,$$

$$\frac{\gamma_{n-1}}{\gamma_n} = -\varphi_1, \text{ или } \gamma_{n-1}(-1)^{n-2} = (-1)^{n-1}\gamma_n\varphi_1 > 0.$$

Таким образом, утверждение о знакопеременности $\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_n$ доказано.

Используя коэффициенты $\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_n$, найдем коэффициенты $\eta_i = \eta_i(\mu), i = 1, 2, \dots, n$ разложения по базису $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{p}_n$ из (5) вектора $(G + \mu I)^{-1}\mathbf{g}$:

$$(G + \mu I)^{-1}\mathbf{g} = \sum_{i=1}^n \eta_i \mathbf{p}_i. \quad (10)$$

Умножив обе части этого равенства слева на $G + \mu I$, получаем $\mathbf{g} = \sum_{i=1}^n \eta_i G \mathbf{p}_i + \mu \sum_{i=1}^n \eta_i \mathbf{p}_i$, но $G \mathbf{p}_i = \mathbf{p}_{i-1}$, а $\mathbf{p}_0 = \mathbf{g}$, поэтому

$$\mathbf{g} = \sum_{i=1}^n \eta_i \mathbf{p}_{i-1} + \mu \sum_{i=1}^n \eta_i \mathbf{p}_i = \eta_1 \mathbf{g} + \sum_{i=1}^{n-1} (\eta_{i+1} + \mu \eta_i) \mathbf{p}_i + \mu \eta_n \mathbf{p}_n.$$

Заметим, что $\eta_1 \neq 1$ при $\mu > 0$, так как в противном случае $\eta_{i+1} + \mu \eta_i = 0, i = 1, 2, \dots, n-1$ и $\eta_n = 0$. Следовательно, $\eta_i = 0, i = 2, 3, \dots, n$ и $(G + \mu I)^{-1}\mathbf{g} = G^{-1}\mathbf{g}$ или $(G + \mu I)\mathbf{g} = G\mathbf{g}$ при $\mu > 0$, что невозможно. Тогда $\mathbf{g} = \sum_{i=1}^{n-1} \frac{\eta_{i+1} + \mu \eta_i}{1 - \eta_1} \mathbf{p}_i + \frac{\mu \eta_n}{1 - \eta_1} \mathbf{p}_n$ и согласно (7) $\gamma_i = \frac{\eta_{i+1} + \mu \eta_i}{1 - \eta_1}, i = 1, 2, \dots, n-1, \gamma_n = \frac{\mu \eta_n}{1 - \eta_1}$.

Производя обратный отсчет от η_{k+1} к η_k , получаем

$$\eta_n = \frac{1 - \eta_1}{\mu} \gamma_1 = \frac{1 - \eta_1}{\mu} M_0(\mu),$$

где $M_0(\mu) = \gamma_n$,

$$\eta_{n-1} = \frac{1 - \eta_1}{\mu^2} (\mu \gamma_{n-1} - \gamma_n) = \frac{1 - \eta_1}{\mu^2} M_1(\mu),$$

где $M_1(\mu) = \mu \gamma_{n-1} - \gamma_n$,

$$\eta_{n-2} = \frac{1 - \eta_1}{\mu^3} (\mu^2 \gamma_{n-2} - \mu \gamma_{n-1} + \gamma_n) = \frac{1 - \eta_1}{\mu^3} M_2(\mu),$$

где $M_2(\mu) = \mu^2 \gamma_{n-2} - \mu \gamma_{n-1} + \gamma_n, \dots,$

$$\eta_k = \frac{1 - \eta_1}{\mu^{n-k+1}} (\mu^{n-k} \gamma_k - \mu^{n-k-1} \gamma_{k+1} + \dots + (-1)^{n-k-1} \gamma_{n-1} \mu + (-1)^{n-k} \gamma_n) = \frac{1 - \eta_1}{\mu^{n-k+1}} M_{n-k}(\mu),$$

$$\eta_2 = \frac{1 - \eta_1}{\mu^{n-1}} (\mu^{n-2} \gamma_2 - \mu^{n-3} \gamma_3 + \dots + (-1)^{n-3} \gamma_{n-1} \mu + (-1)^{n-2} \gamma_n) = \frac{1 - \eta_1}{\mu^{n-1}} M_{n-2}(\mu),$$

$$\eta_1 = \frac{1 - \eta_1}{\mu^n} (\mu^{n-1} \gamma_1 - \mu^{n-2} \gamma_2 + \mu^{n-3} \gamma_3 + \dots + (-1)^{n-2} \gamma_{n-1} \mu + (-1)^{n-1} \gamma_n) = \frac{1 - \eta_1}{\mu^n} M_{n-1}(\mu).$$

Из этих соотношений следует

$$\eta_1 = \frac{M_{n-1}(\mu)}{\mu^n + M_{n-1}(\mu)}, \quad \eta_2 = \mu \frac{M_{n-2}(\mu)}{\mu^n + M_{n-1}(\mu)}, \dots, \eta_n = \mu^{n-1} \frac{\gamma_n}{\mu^n + M_{n-1}(\mu)}. \quad (11)$$

Используя неравенства $\gamma_1 > 0, \gamma_2 < 0, \dots, (-1)^{n-1} \gamma_n > 0$, получаем неравенства для многочленов $M_k(\mu)$:

$$M_{n-1}(\mu) > 0, \quad M_{n-2}(\mu) < 0, \dots, M_1(\mu)(-1)^{n-2} > 0, \quad M_0(\mu)(-1)^{n-1} > 0 \quad \text{при } \mu \geq 0.$$

Следовательно, коэффициенты $\eta_k(\mu)$ в разложении (10) удовлетворяют неравенствам $(-1)^{k-1} \eta_k(\mu) > 0$ при $\mu > 0$. Кроме того:

— при $\mu = 0$ $\eta_1 = 1, \eta_k = 0, k > 1$;

$$\text{— при } \mu = 1 \quad \eta_1 = \frac{\sum_{i=1}^n |\gamma_i|}{1 + \sum_{i=1}^n |\gamma_i|}, \eta_2 = -\frac{\sum_{i=2}^n |\gamma_i|}{1 + \sum_{i=1}^n |\gamma_i|}, \dots, \eta_n = \frac{\gamma_n}{1 + \sum_{i=1}^n |\gamma_i|};$$

— при $\mu \rightarrow +\infty$ $\eta_k(\mu) \rightarrow 0, k = 1, 2, \dots, n$.

Вернемся к траектории $\mathbf{s}(\mu)$, определенной в (4), и запишем ее в виде

$$\mathbf{s}(\mu) = -\sum_{i=1}^n \eta_i(\mu) \mathbf{p}_i, \quad \mu > 0 \quad (12)$$

($\mathbf{s}(0) = \mathbf{s}^N = -G^{-1} \mathbf{g}$ — ньютоновское направление). Поскольку использование в вычислениях представления (12) для траектории $\mathbf{s}(\mu)$ существенно затруднено вследствие большой трудоемкости вычислений коэффициентов γ_k и невозможности вычислений многочленов $M_k(\mu)$ при больших значениях k , найдем функции, аппроксимирующие $\eta_k(\mu)$ с высокой точностью.

1. Рассмотрим поведение траектории $\mathbf{s}(\mu)$ при больших μ .

Представим функции $\eta_k(\mu), k = 1, 2, \dots, n$ в виде

$$\eta_k(\mu) = \frac{1}{\mu} \frac{\mu^{k-1} M_{n-k}(\mu)}{\mu^{n-1} + \frac{1}{\mu} M_{n-k}(\mu)}.$$

Отношение $R_k(\mu) = \frac{\mu^{k-1} M_{n-k}(\mu)}{\mu^{n-1} + \frac{1}{\mu} M_{n-k}(\mu)}$ стремится к γ_k при $\mu \rightarrow +\infty$, $R_k(\mu) \approx \gamma_k$ и $\eta_k(\mu) \approx \frac{\gamma_k}{\mu}$.

Тогда $\sum_{k=1}^n \eta_k(\mu) \mathbf{p}_k \approx \frac{1}{\mu} \sum_{k=1}^n \gamma_k \mathbf{p}_k = \frac{1}{\mu} \mathbf{g}$ и, следовательно, $\mathbf{s}(\mu) \approx -\frac{1}{\mu} \mathbf{g}$.

Для оценки точности такого представления зададим малое положительное число ε_1 — допуск на точность вычисления траектории $\mathbf{s}(\mu)$ при больших μ — и найдем нижнюю границу значений параметра μ , при которых выполнено неравенство $\|\mathbf{s}(\mu) + \frac{1}{\mu} \mathbf{g}\|_2 \leq \varepsilon_1$.

При $k = 1, 2, \dots, n-1$ имеем

$$\eta_k(\mu) - \frac{1}{\mu} \gamma_k = \frac{\mu^k M_{n-k}(\mu) - \gamma_k \mu^n - \gamma_k M_{n-1}(\mu)}{\mu(\mu^n + M_{n-1}(\mu))} = \frac{-(\gamma_{k-1} - \gamma_1 \gamma_k) \mu^{n-1} + \dots}{\mu(\mu^n + M_{n-1}(\mu))},$$

т. е. $\eta_k(\mu) - \frac{1}{\mu}\gamma_k$ есть отношение двух многочленов, в котором числитель — многочлен степени $n - 1$, а знаменатель — многочлен степени $n + 1$. Следовательно, $\eta_k(\mu) - \frac{1}{\mu}\gamma_k = O\left(\frac{1}{\mu^2}\right)$.

При $k = n$

$$\eta_n(\mu) - \frac{1}{\mu}\gamma_n = -\gamma_n \frac{M_{n-1}(\mu)}{\mu(\mu^n + M_{n-1}(\mu))} = O\left(\frac{1}{\mu^2}\right).$$

Тогда $\left\| \sum_{k=1}^n (\eta_k(\mu) - \frac{1}{\mu}\gamma_k) \mathbf{p}_k \right\|_2 = O\left(\frac{1}{\mu^2}\right)$ или $\|\mathbf{s}(\mu) + \frac{1}{\mu}\mathbf{g}\|_2 = O\left(\frac{1}{\mu^2}\right)$ и при $\mu > \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_1}}$ имеем $\|\mathbf{s}(\mu) + \frac{1}{\mu}\mathbf{g}\|_2 \leq a$, где a — число порядка ε_1 .

2. Рассмотрим поведение $\eta_k(\mu)$ при $0 < \mu < 1$.

При $k = 1$

$$1 - \eta_1(\mu) = 1 - \frac{M_{n-1}(\mu)}{\mu^n + M_{n-1}(\mu)} = \frac{\mu^n}{\mu^n + M_{n-1}(\mu)}.$$

При $\mu > 0$ $\mu^n + M_{n-1}(\mu) > |\gamma_n|$, поэтому $0 < 1 - \eta_1(\mu) < \frac{\mu^n}{|\gamma_n|}$, т. е. $1 - \frac{\mu^n}{|\gamma_n|} < \eta_1(\mu) < 1$ при $0 < \mu < 1$.

При $k = 2$

$$\eta_2(\mu) + \mu = \mu \frac{\mu^n + \mu^{n-1}\gamma_1}{\mu^n + M_{n-1}(\mu)} = \mu^n \frac{\mu + \gamma_1}{\mu^n + M_{n-1}(\mu)}.$$

Следовательно, при $0 < \mu < 1$ имеем $0 < \eta_2(\mu) + \mu < \mu^n \frac{1 + \gamma_1}{|\gamma_n|}$, т. е. $-\mu < \eta_2(\mu) < -\mu + \mu^n \frac{1 + \gamma_1}{|\gamma_n|}$.

При $k = 3$

$$-\eta_3(\mu) + \mu^2 = \mu^2 \frac{\mu^n + \gamma_1\mu^{n-1} - \gamma_2\mu^{n-2}}{\mu^n + M_{n-1}(\mu)},$$

тогда при $0 < \mu < 1$ имеем $0 < -\eta_3(\mu) + \mu^2 < \mu^n \frac{1 + \gamma_1 - \gamma_2}{|\gamma_n|}$, или $\mu^2 - \mu^n \frac{1 + \gamma_1 - \gamma_2}{|\gamma_n|} < \eta_3(\mu) < \mu^2$.

Действуя аналогично, можно получить оценки всех функций $\eta_k(\mu)$ при $0 < \mu < 1$.

Если пренебречь всеми нелинейностями по μ , то при $0 \leq \mu \leq 1$ можно получить представление

$$\mathbf{s}(\mu) = -G^{-1}\mathbf{g} + \mu(G^{-1})^2\mathbf{g}. \quad (13)$$

Это выражение задает плоскую кривую в подпространстве $\text{span}(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2)$ — линейной оболочке векторов $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2$ — и аппроксимирует значения $\mathbf{s}(\mu)$ с ошибкой порядка μ^2 . Учет еще одного члена в выражении (12) приводит к квадратичной аппроксимации

$$\mathbf{s}(\mu) = -G^{-1}\mathbf{g} + \mu(G^{-1})^2\mathbf{g} - \mu^2(G^{-1})^3\mathbf{g} \quad (14)$$

с ошибкой порядка μ^3 .

Приведем пример трехмерной кусочно-линейной траектории $\bar{\mathbf{s}}(\mu) \subset \text{span}(\mathbf{g}, \mathbf{s}^N, G^{-1}\mathbf{s}^N)$, аппроксимирующей кривую $\mathbf{s}(\mu)$. Траектория $\bar{\mathbf{s}}(\mu)$ представляет собой кривую с двойным изломом, один из отрезков которой (при $\mu < 1$) есть $\mathbf{s}(\mu)$ из (13), а другой отрезок (при

больших μ) есть вектор $-\frac{1}{\mu}\mathbf{g}$. Последний отрезок совпадает по направлению с одним из отрезков плоской кусочно-линейной кривой с двойным изломом из алгоритма доверительной области, предложенного М. Дж. Д. Пауэллом [1], но имеет другую длину.

Кривую $\bar{\mathbf{s}}(\mu)$ представим в виде трех участков.

1. При $\mu \leq 1$ в качестве $\bar{\mathbf{s}}(\mu)$ выберем линейную аппроксимацию (13) с некоторыми ограничениями. Необходимо, чтобы, во-первых, $\bar{\mathbf{s}}(\mu)$ хорошо приближало $\mathbf{s}(\mu)$; во-вторых, выполнялось условие $\mathbf{g}^T \bar{\mathbf{s}}(\mu) < 0$; в-третьих, функция $\|\bar{\mathbf{s}}(\mu)\|_2$ являлась убывающей. Для того чтобы эти требования были выполнены, найдем три величины $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$:

а) $\alpha_1 = \max \mu$ из условия $\mu^n \leq \varepsilon_2$, где $\varepsilon_2 > 0$ — малое число (допуск на точность вычисления траектории $\mathbf{s}(\mu)$ при малом μ);

б) $\alpha_2 = -\frac{\mathbf{g}^T \mathbf{s}^N}{\|\mathbf{s}^N\|_2^2}$ — величина, определяющая верхнюю границу значений параметра μ , при которых $\mathbf{g}^T \bar{\mathbf{s}}(\mu) \leq 0$;

в) $\alpha_3 = \frac{(\mathbf{s}^N)^T G^{-1} \mathbf{s}^N}{(\mathbf{s}^N)^T (G^{-1})^2 \mathbf{s}^N}$ — точка минимума функции $\|\bar{\mathbf{s}}(\mu)\|_2^2 = \|\mathbf{s}^N - \mu G^{-1} \mathbf{s}^N\|_2^2$.

При $\mu \leq \mu_1 = \min(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$ $\bar{\mathbf{s}}(\mu)$ удовлетворяет всем указанным выше требованиям, при этом функция $m(\mathbf{x}_k + \bar{\mathbf{s}}(\mu))$, определенная в (1), равна $m(\mathbf{x}_k + \mathbf{s}^N) + \frac{1}{2}\mu^2(\mathbf{s}^N)^T G^{-1} \mathbf{s}^N$ и, следовательно, растет при увеличении μ .

2. При больших μ найдем точку минимума λ^* модели $m(\mathbf{x}_k + \mathbf{s})$ в направлении наискорейшего спуска: $\lambda^* = \frac{\|\mathbf{g}\|_2^2}{\mathbf{g}^T G \mathbf{g}}$ и величину $\mu'_2 = \max(\frac{1}{\lambda^*}, \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_1}})$. Тогда при $\mu \geq \mu'_2$ функция $\bar{\mathbf{s}}(\mu)$ с точностью ε_1 аппроксимируется функцией $-\frac{1}{\mu}\mathbf{g}$, а функция $m(\mathbf{x}_k - \frac{1}{\mu}\mathbf{g})$ монотонно возрастает с увеличением μ .

Вычислим величины $\alpha_4 = \frac{\|\mathbf{g}\|_2}{\|\bar{\mathbf{s}}(\alpha_3)\|_2}$, $\alpha_5 = -\frac{\|\mathbf{g}\|_2^2}{\mathbf{g}^T \bar{\mathbf{s}}(\mu_1)}$, $\alpha_6 = -\frac{\mathbf{g}^T \mathbf{s}^N}{\bar{\mathbf{s}}(\mu_1)^T \mathbf{s}^N}$, которые удовлетворяют следующим условиям:

— при $\mu \geq \alpha_4$ $\|\mathbf{s}(\mu)\|_2 = \frac{1}{\mu}\|\mathbf{g}\|_2 \leq \|\bar{\mathbf{s}}(\alpha_3)\|_2 \leq \|\bar{\mathbf{s}}(\mu_1)\|_2$;

— при $\mu \geq \alpha_5$ $\bar{\mathbf{s}}(\mu)^T (\bar{\mathbf{s}}(\mu_1) - \bar{\mathbf{s}}(\mu)) = -\frac{1}{\mu}\mathbf{g}^T (\bar{\mathbf{s}}(\mu_1) + \frac{1}{\mu}\mathbf{g}) = \frac{1}{\mu}(-\mathbf{g}^T \bar{\mathbf{s}}(\mu_1) - \frac{1}{\mu}\|\mathbf{g}\|_2^2) \geq 0$;

— при $\mu \geq \alpha_6$ $(\bar{\mathbf{s}}(\mu_1) - \bar{\mathbf{s}}(\mu))^T \mathbf{s}^N = \left(\bar{\mathbf{s}}(\mu_1) + \frac{1}{\mu}\mathbf{g}\right)^T \mathbf{s}^N = \bar{\mathbf{s}}(\mu_1)^T \mathbf{s}^N - \frac{1}{\mu}(-\mathbf{g}^T \mathbf{s}^N) \geq \bar{\mathbf{s}}(\mu_1)^T \mathbf{s}^N - \frac{\bar{\mathbf{s}}(\mu_1)^T \mathbf{s}^N}{-\mathbf{g}^T \mathbf{s}^N} (-\mathbf{g}^T \mathbf{s}^N) = 0$.

Два последних условия потребуются в дальнейшем. Определим величину $\mu_2 = \max(\mu'_2, \alpha_4, \alpha_5, \alpha_6)$.

3. Соединим точки $\bar{\mathbf{s}}(\mu_1)$ и $\bar{\mathbf{s}}(\mu_2)$ отрезком $\bar{\mathbf{s}}(\mu) = \bar{\mathbf{s}}(\mu_1) + \frac{\mu - \mu_1}{\mu_2 - \mu_1}(\bar{\mathbf{s}}(\mu_2) - \bar{\mathbf{s}}(\mu_1))$, который выберем в качестве участка искомой траектории при $\mu_1 \leq \mu \leq \mu_2$. Введем следующие обозначения: $\mathbf{s}_1 = \bar{\mathbf{s}}(\mu_1)$, $\mathbf{s}_2 = \bar{\mathbf{s}}(\mu_2)$, $\beta = \beta(\mu) = \frac{\mu - \mu_1}{\mu_2 - \mu_1}$. Тогда $\beta \in [0, 1]$, $\beta = 0$ при $\mu = \mu_1$ и $\beta = 1$ при $\mu = \mu_2$. Определим функцию $\psi(\beta) = \mathbf{s}_1 + \beta(\mathbf{s}_2 - \mathbf{s}_1)$, т. е. $\psi(\beta(\mu)) = \bar{\mathbf{s}}(\mu)$, $\mu \in [\mu_1, \mu_2]$.

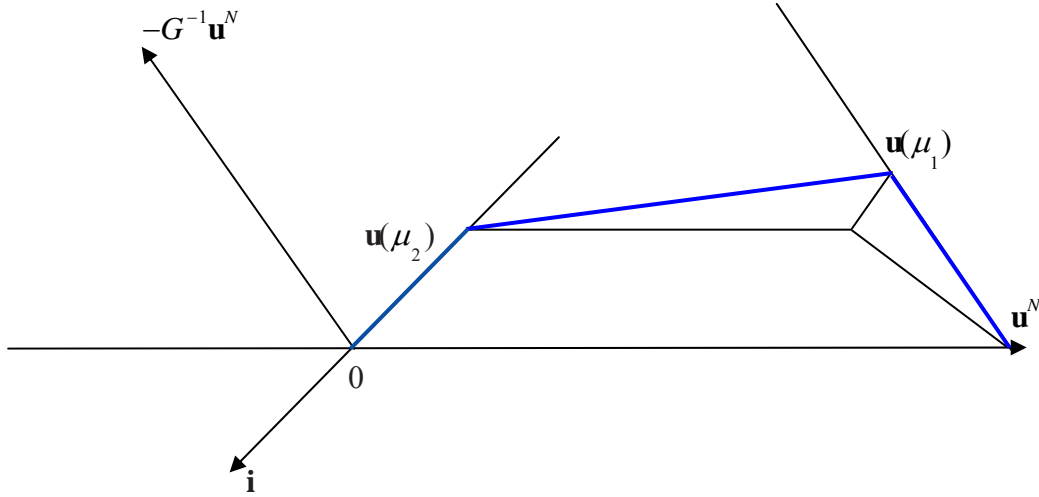


Рис. 1. Кривая $\bar{\mathbf{s}}(\mu)$ с двойным изломом $\mathbf{s}^N \rightarrow \mathbf{s}(\mu_1) \rightarrow \mathbf{s}(\mu_2) \rightarrow 0$

Для функции $\psi(\beta)$, $\beta \in [0, 1]$ верны следующие утверждения:

- 1) $\mathbf{g}^T \psi(\beta) < 0$ для всех $\beta \in [0, 1]$;
- 2) $\|\psi(\beta)\|_2$ убывает на отрезке $[0, 1]$;
- 3) функция $m(\mathbf{x}_k + \psi(\beta))$, определенная в (1), растет на отрезке $[0, 1]$.

Покажем, что условия 1–3 выполнены.

1. Скалярное произведение $\mathbf{g}^T \psi(\beta) = (\mathbf{g}^T \mathbf{s}_1)(1 - \beta) + \beta(\mathbf{g}^T \mathbf{s}_2) < 0$ для всех $\beta \in [0, 1]$, так как $\mathbf{g}^T \mathbf{s}_1 < 0$ и $\mathbf{g}^T \mathbf{s}_2 < 0$.

2. Функция $\|\psi(\beta)\|_2^2 = \|\mathbf{s}_1\|^2 + 2\beta \mathbf{s}_1^T(\mathbf{s}_2 - \mathbf{s}_1) + \beta^2 \|\mathbf{s}_2 - \mathbf{s}_1\|_2^2$ достигает минимума в точке $\beta_0 = \frac{\mathbf{s}_1^T(\mathbf{s}_1 - \mathbf{s}_2)}{\|\mathbf{s}_1 - \mathbf{s}_2\|_2^2}$. Значение β_0 больше единицы, так как $\beta_0 - 1 = \frac{\mathbf{s}_2^T(\mathbf{s}_1 - \mathbf{s}_2)}{\|\mathbf{s}_1 - \mathbf{s}_2\|_2^2}$, а $\mathbf{s}_2^T(\mathbf{s}_1 - \mathbf{s}_2) \geq 0$ в силу выбора $\mu_2 \geq \alpha_5$. Следовательно, $\|\psi(0)\|_2 > \|\psi(1)\|_2$ и $\beta_0 \geq 1$, т. е. $\|\psi(\beta)\|_2$ — убывающая на отрезке $[0, 1]$ функция.

3. Функция $m(\mathbf{x}_k + \psi(\beta)) = m(\mathbf{x}_k + \mathbf{s}_1) + \beta(\mathbf{s}_2 - \mathbf{s}_1)^T(\mathbf{g} + G\mathbf{s}_1) + \frac{1}{2}\beta^2(\mathbf{s}_2 - \mathbf{s}_1)^T G(\mathbf{s}_2 - \mathbf{s}_1)$. Так как $\mathbf{g} + G\mathbf{s}_1 = \mathbf{g} + G(\mathbf{s}^N - \mu_1 G^{-1} \mathbf{s}^N) = \mathbf{g} - \mathbf{g} - \mu_1 \mathbf{s}^N = -\mu_1 \mathbf{s}^N$, то $m(\mathbf{x}_k + \psi(\beta)) = m(\mathbf{x}_k + \mathbf{s}_1) - \beta \mu_1 (\mathbf{s}_2 - \mathbf{s}_1)^T \mathbf{s}^N + \frac{1}{2}\beta^2 (\mathbf{s}_2 - \mathbf{s}_1)^T G(\mathbf{s}_2 - \mathbf{s}_1)$. Минимум функции $m(\mathbf{x}_k + \psi(\beta))$ достигается в точке $\beta_1 = \mu_1 \frac{(\mathbf{s}_2 - \mathbf{s}_1)^T \mathbf{s}^N}{(\mathbf{s}_2 - \mathbf{s}_1)^T G(\mathbf{s}_2 - \mathbf{s}_1)}$. Величина $\beta_1 \leq 0$, так как $(\mathbf{s}_1 - \mathbf{s}_2)^T \mathbf{s}^N \geq 0$ в силу выбора $\mu_2 \geq \alpha_6$. Следовательно, функция $m(\mathbf{x}_k + \psi(\beta))$ возрастает на отрезке $[0, 1]$.

Построенная таким образом траектория $\bar{\mathbf{s}}(\mu)$ при $\mu \geq 0$ удовлетворяет условию $\mathbf{g}^T \bar{\mathbf{s}}(\mu) \leq 0$ для всех μ , с увеличением μ функция $\|\bar{\mathbf{s}}(\mu)\|_2$ убывает, а функция $m(\mathbf{x}_k + \bar{\mathbf{s}}(\mu))$ возрастает. На рис. 1 показана кривая $\bar{\mathbf{s}}(\mu)$, $0 \leq \mu < +\infty$.

Случай, когда векторы $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{p}_n$, определенные в (5), являются линейно зависимыми. Предварительно определим влияние спектрального разложения матрицы G^{-1} и выбора вектора \mathbf{g} на максимальное значение k , при котором векторы $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{p}_k$ линейно независимы.

Пусть B — симметричная положительно-определенная матрица размером $n \times n$; $\lambda[B]$ — множество собственных значений матрицы B ; $\mathbf{f} \in \mathbb{R}^n$ — вектор, не являющийся собственным вектором матрицы B .

Приведем ряд определений и утверждений из [3].

1. N_α — собственное подпространство, соответствующее $\alpha \in \lambda[B]$, т. е. $N_\alpha = \{\mathbf{x} : (B - \alpha I)\mathbf{x} = 0\}$. Кратность α есть размерность N_α .

2. $H_\alpha = \sum \mathbf{z}_i \mathbf{z}_i^T$ — спектральный проектор, где $\{\mathbf{z}_i\}$ — произвольный ортонормированный базис подпространства N_α ; $\mathbf{f}_\alpha = H_\alpha \mathbf{f}$ — ортогональная проекция вектора \mathbf{f} на N_α . $B\mathbf{f}_\alpha = \alpha \mathbf{f}_\alpha$, так как $\mathbf{f}_\alpha \in N_\alpha$; вектор \mathbf{f}_α определен единственным образом для вектора \mathbf{f} .

3. Пусть $\sum(\mathbf{f}) = \{\alpha : \alpha \in \lambda[B], \mathbf{f}_\alpha \neq 0\}$. Тогда $L(\mathbf{f}) = \text{span}\{\mathbf{f}_\alpha : \alpha \in \sum(\mathbf{f})\}$ — наименьшее инвариантное относительно B подпространство из \mathbb{R}^n , содержащее \mathbf{f} .

4. Матрица $B_f = \sum_{\alpha \in \sum(\mathbf{f})} \alpha \frac{\mathbf{f}_\alpha \mathbf{f}_\alpha^T}{\|\mathbf{f}_\alpha\|^2}$ — сужение матрицы B на $L(\mathbf{f})$. Действие B_f совпадает с действием B , но областью определения B_f является подпространство $L(\mathbf{f})$. Матрица B_f имеет простые собственные значения $\alpha \in \sum(\mathbf{f})$.

5. Подпространства Крылова $K^i(\mathbf{f}; B) = \text{span}(\mathbf{f}, B\mathbf{f}, \dots, B^{i-1}\mathbf{f})$ полностью покрывают подпространство $L(\mathbf{f})$ в том смысле, что $\text{span} \mathbf{f} \subset K^2(\mathbf{f}; B) \subset \dots \subset K^m(\mathbf{f}; B) = K^{m+1}(\mathbf{f}; B) = L(\mathbf{f})$ для некоторого $m < n$.

Утверждение 2. Пусть m — число, определенное в п. 5. Тогда векторы $\mathbf{f}, B\mathbf{f}, \dots, B^{m-1}\mathbf{f}$ линейно независимы и размерность подпространства $K^k(\mathbf{f}; B)$, $k = 2, 3, \dots, m$ равна k .

Доказательство. При $k = 2$ векторы \mathbf{f} и $B\mathbf{f}$ не могут быть линейно зависимыми, поскольку \mathbf{f} не является собственным вектором матрицы B . Очевидно, что размерность $K^2(\mathbf{f}; B) = \text{span}(\mathbf{f}, B\mathbf{f})$ равна 2.

Будем считать, что при $2 < k \leq m - 1$ векторы $\mathbf{f}, B\mathbf{f}, \dots, B^{k-1}\mathbf{f}$ линейно независимы; $K^k(\mathbf{f}; B) \subset K^{k+1}(\mathbf{f}; B)$; размерность подпространства $K^k(\mathbf{f}; B)$ равна k . Если предположить, что векторы $\mathbf{f}, B\mathbf{f}, \dots, B^k\mathbf{f}$ линейно зависимы, то существуют коэффициенты $\lambda_i, i = 0, \dots, k - 1$ и $\lambda_j \neq 0$ хотя бы для одного j , такие что $B^k\mathbf{f} = \sum_{i=0}^{k-1} \lambda_i B^i\mathbf{f}$. Тогда для любого $\mathbf{x} \in K^{k+1}(\mathbf{f}; B)$

имеем $\mathbf{x} = \sum_{i=0}^k \xi_i B^i\mathbf{f}$ для некоторых чисел $\xi_i, i = 0, 1, \dots, k$ или $\mathbf{x} = \sum_{i=0}^{k-1} (\xi_i + \xi_n \lambda_i) B^i\mathbf{f}$, т. е. $\mathbf{x} \in K^k(\mathbf{f}; B)$. Следовательно, верно включение $K^{k+1}(\mathbf{f}; B) \subset K^k(\mathbf{f}; B)$, что противоречит предварительному условию $K^k(\mathbf{f}; B) \subset K^{k+1}(\mathbf{f}; B)$.

Очевидно, что размерность подпространства $K^{k+1}(\mathbf{f}; B)$ увеличится по сравнению с размерностью $K^k(\mathbf{f}; B)$ на единицу и станет равной $k + 1$. Утверждение доказано.

Из равенства $L(\mathbf{f}) = K^m(\mathbf{f}; B)$ следует равенство $m = |\sum(\mathbf{f})|$.

Заметим, что, поскольку матрица B невырождена, векторы $B\mathbf{f}, B^2\mathbf{f}, \dots, B^m\mathbf{f}$ являются линейно независимыми.

Вернемся к системе векторов $\mathbf{p}_i = (G^{-1})^i \mathbf{g}, i = 1, 2, \dots, m$. Пусть m — максимальный индекс, при котором векторы $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{p}_m$ линейно независимы. Выберем эти векторы в качестве базиса подпространства $K^m(\mathbf{g}; G^{-1})$. Тогда вектор \mathbf{g} можно единственным образом представить в виде

$$\mathbf{g} = \gamma_1 G^{-1}\mathbf{g} + \gamma_2 (G^{-1})^2\mathbf{g} + \dots + \gamma_m (G^{-1})^m \mathbf{g}. \quad (15)$$

Если в этом равенстве при тех же коэффициентах γ_i заменить матрицу G^{-1} на ее сужение G_g^{-1} на подпространстве $K^m(\mathbf{g}; G^{-1})$, то равенство сохранится (в силу определения G_g^{-1}). Тогда

$$\frac{\gamma_1}{\gamma_m} = - \sum_{\alpha \in \sum(\mathbf{f})} \alpha, \quad \frac{\gamma_2}{\gamma_m} = \sum_{i>j} \alpha_i \alpha_j, \quad \alpha_i, \alpha_j \in \sum(\mathbf{f}), \dots, \quad (-1)^m \gamma_m = - \prod_{\alpha_i \in \sum(\mathbf{f})} \alpha_i.$$

Это значит, что, как и в предыдущем случае, $\gamma_1 > 0$, $\gamma_2 < 0, \dots, (-1)^{m-1}\gamma_m > 0$.

Утверждение 3. $(G + \mu I)^{-1}\mathbf{g} \in K^m(\mathbf{g}; G^{-1})$ при $\mu > 0$.

Пусть при произвольном значении $\mu > 0$

$$(G + \mu I)^{-1}\mathbf{g} = \eta_1 G^{-1}\mathbf{g} + \eta_2 (G^{-1})^2\mathbf{g} + \dots + \eta_m (G^{-1})^m\mathbf{g} + \mathbf{d}, \quad (16)$$

где \mathbf{d} принадлежит \bar{K}^m — ортогональному дополнению $K^m(\mathbf{g}; G^{-1})$. Тогда

$$\mathbf{d}^T (G^{-1})^k \mathbf{g} = 0, \quad k = 0, 1, \dots, m. \quad (17)$$

Умножая равенство (16) слева на $G + \mu I$, получаем

$$(1 - \eta_1)\mathbf{g} = (\eta_2 + \mu\eta_1)G^{-1}\mathbf{g} + \dots + (\eta_m + \mu\eta_{m-1})(G^{-1})^{m-1}\mathbf{g} + \mu\eta_m(G^{-1})^m\mathbf{g} + (G + \mu I)\mathbf{d}. \quad (18)$$

Из этого равенства следует $(G + \mu I)\mathbf{d} \in K^m(\mathbf{g}; G^{-1})$. В то же время $(G + \mu I)\mathbf{d} \in \bar{K}^m$, так как при $k = 1, 2, \dots, m$ имеем $\mathbf{d}^T (G + \mu I)(G^{-1})^k \mathbf{g} = \mathbf{d}^T (G^{-1})^{k-1} \mathbf{g} + \mu \mathbf{d}^T (G^{-1})^k \mathbf{g}$ и согласно (17) оба слагаемых в правой части последнего равенства равны нулю. Следовательно, $(G + \mu I)\mathbf{d} = 0$, а в силу невырожденности матрицы $G + \mu I$ получаем $\mathbf{d} = 0$. Тогда из (16) следует, что $(G + \mu I)^{-1}\mathbf{g} \in K^m(\mathbf{g}; G^{-1})$. Утверждение доказано.

Из равенств (15), (18) получаем соотношения

$$\gamma_1 = \frac{\eta_2 + \mu\eta_1}{1 - \eta_1}, \quad \gamma_2 = \frac{\eta_3 + \mu\eta_2}{1 - \eta_1}, \dots, \gamma_{m-1} = \frac{\eta_m + \mu\eta_{m-1}}{1 - \eta_1}, \quad \gamma_m = \frac{\mu\eta_m}{1 - \eta_1},$$

из которых в свою очередь находим выражения для η_i , $i = 1, 2, \dots, m$, аналогичные выражениям (11) с той лишь разницей, что в данном случае степени многочленов $M_k(\mu)$ не должны превышать m .

Приведем примеры траекторий $\mathbf{s}(\mu)$ при значениях m , равных 1 или 2.

1. В случае $m = 1$ \mathbf{g} — собственный вектор G^{-1} , т. е. $G^{-1}\mathbf{g} = \sigma\mathbf{g}$. Тогда $\mathbf{s}(\mu) = -(G + \mu I)^{-1}\mathbf{g} = -\frac{\sigma}{1 + \sigma\mu}\mathbf{g}$.

2. В случае $m = 2$ $\mathbf{g} = \gamma_1 G^{-1}\mathbf{g} + \gamma_2 (G^{-1})^2\mathbf{g}$. Значения γ_1, γ_2 можно найти методом исключения Гаусса, при этом должны быть верны неравенства $\gamma_1 > 0$, $\gamma_2 < 0$.

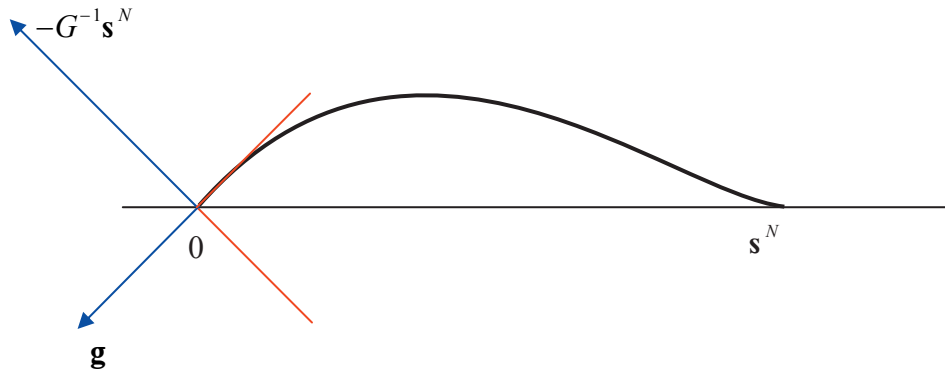
Из соотношений $\gamma_1 = \frac{\eta_2 + \mu\eta_1}{1 - \eta_1}$, $\gamma_2 = \frac{\mu\eta_2}{1 - \eta_1}$ вычислим η_1 и η_2 :

$$\eta_1 = \frac{\gamma_1\mu - \gamma_2}{\mu^2 + \gamma_1\mu - \gamma_2}, \quad \eta_2 = \frac{\mu\gamma_2}{\mu^2 + \gamma_1\mu - \gamma_2}.$$

Следовательно, $\mathbf{s}(\mu) = -\frac{\gamma_1\mu - \gamma_2}{\mu^2 + \gamma_1\mu - \gamma_2} (G^{-1})\mathbf{g} - \frac{\mu\gamma_2}{\mu^2 + \gamma_1\mu - \gamma_2} (G^{-1})^2\mathbf{g}$.

Кривую $\mathbf{s}(\mu)$ нетрудно представить в графическом виде. Пусть $\zeta_1(\mu) = \frac{\gamma_1\mu - \gamma_2}{\mu^2 + \gamma_1\mu - \gamma_2}$, $\zeta_2(\mu) = -\frac{\mu\gamma_2}{\mu^2 + \gamma_1\mu - \gamma_2}$, тогда $\mathbf{s}(\mu) = \zeta_1(\mu)\mathbf{s}^N + \zeta_2(\mu)(-G^{-1}\mathbf{s}^N)$. Обозначим через $t(\mu)$ отношение $\frac{\zeta_2(\mu)}{\zeta_1(\mu)}$, т. е. $t(\mu) = -\frac{\mu\gamma_2}{\gamma_1\mu - \gamma_2}$. Тогда $t(\mu) \rightarrow 0$ при $\mu \rightarrow 0$ и $t(\mu) \rightarrow -\frac{\gamma_2}{\gamma_1}$ при $t \rightarrow +\infty$. Максимум функции $\zeta_2(\mu)$ достигается в точке $\mu_0 = \sqrt{-\gamma_2}$. Для этого случая кривая $\mathbf{s}(\mu)$ представлена на рис. 2.

Приведем алгоритм определения размерности минимального инвариантного относительно G^{-1} подпространства Крылова, содержащего \mathbf{g} . Как и выше, $\mathbf{p}_i = (G^{-1})^i\mathbf{g}$.

Рис. 2. Кривая $\mathbf{s}(\mu)$ при $m = 2$

Найдем проекцию вектора \mathbf{g} на \mathbf{p}_1 , т. е. найдем $r_1 = \min_{\lambda} \|\mathbf{g} - \lambda \mathbf{p}_1\|_2^2$. Если $r_1 = 0$, то $m = 1$.

Найдем проекцию вектора \mathbf{g} на $\text{span}(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2)$ при $r_1 > 0$, т. е. найдем $r_2 = \min_{\lambda_1, \lambda_2} \|\mathbf{g} - \lambda_1 \mathbf{p}_1 - \lambda_2 \mathbf{p}_2\|_2^2$. Если $r_2 = 0$, то $m = 2$. В этом случае используем представление $\mathbf{s}(\mu)$ в явном виде.

Если $r_2 > 0$, то $m \geq 3$. В этом случае рекомендуется использовать кусочно-линейную аппроксимацию $\bar{\mathbf{s}}(\mu)$.

В заключение заметим, что представление траектории $\mathbf{s}(\mu)$ в виде (12) позволит построить другие ее приближения. Например, если при $\mu \leq \mu_1$ в качестве $\bar{\mathbf{s}}(\mu)$ использовать квадратичную аппроксимацию (14), а при $\mu_1 \leq \mu \leq \mu_2$ и $\mu \geq \mu_2$ участки кривой $\bar{\mathbf{s}}(\mu)$ построить так же, как в предыдущем случае, то получим функцию $\bar{\mathbf{s}}(\mu) \subset \text{span}(\mathbf{g}, \mathbf{s}^N, G^{-1}\mathbf{s}^N, (G^{-1})^2\mathbf{s}^N)$, которая будет частично-линейной.

Список литературы

1. Дэннис Дж. Численные методы безусловной оптимизации и решения нелинейных уравнений / Дж. Дэннис, Р. Шнабель. М.: Мир, 1988.
2. БЕЛЛМАН Р. Введение в теорию матриц. М.: Наука, 1969.
3. ПАРЛЕТТ Б. Симметричная проблема собственных значений. Численные методы. М.: Мир, 1983.

Котельников Евгений Алексеевич — ст. науч. сотр. Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН; тел.: (383) 330-60-66

Дата поступления — 30.11.12