А. П. Буланый, Ю. М. Данилин, Квазиньютоновские алгоритмы минимизации, основанные на построении систем сопряженных векторов, *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.*, 1978, том 18, номер 4, 877–885

ЖУРНАЛ
ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ И МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Том 18 Июль 1978 Август № 4

УДК 518:517.948

КВАЗИНЬЮТОНОВСКИЕ АЛГОРИТМЫ МИНИМИЗАЦИИ, ОСНОВАННЫЕ НА ПОСТРОЕНИИ СИСТЕМ СОПРЯЖЕННЫХ ВЕКТОРОВ

А. П. БУЛАНЫЙ, Ю. М. ДАНИЛИН

(Киев)

Изучаются квазиньютоновские алгоритмы для минимизации гладкой выпуклой функции $f(x)$, $x \in E^n$. Особенностью алгоритмов является то, что построение матрицы $A_k^{-1} \to [f''(x_k)]^{-1}$ осуществляется с помощью системы сопряженных векторов, получаемых из произвольной линейно-независимой системы.

1. В настоящей работе изучаются алгоритмы для минимизации гладких выпуклых функций, в которых вектор p_k, определяющий направление движения, строится в виде $p_k = -A_k^{-1} f'(x_k)$, а матрица A_k^{-1} обладает следующим свойством: $A_k^{-1} \to [f''(x_k)]^{-1}$ при $k \to \infty$. Построение матрицы A_k^{-1} осуществляется с помощью систем векторов, для которых с определенной степенью точности выполняются условия сопряженности. Такие системы векторов строятся путем ортогонализации некоторой линейно-независимой системы векторов. При этом в вычислениях используются лишь первые производные функции. Алгоритмы такого типа рассматривались в [1]. Предлагаемые в настоящей работе модификации методов позволяют сократить количество вычислений, не уменьшая скорости сходимости. Наиболее интересный алгоритм изучается в п. 4: для его реализации требуется вычислять $\sim {}^3/_2 n$ частных производных функции. В отличие от алгоритмов с переменной метрикой (например, [2]), в которых также используются системы сопряженных векторов, предлагаемые методы не требуют решения одномерных задач минимизации для выбора длины шага. При этом оценки скорости сходимости изучаемых методов выше, чем у алгоритмов с переменной метрикой. В отличие от алгоритмов из [3] предлагаемые ниже методы не требуют построения двойственных базисов.

Отметим работы [4–6], посвященные разработке эффективных алгоритмов для минимизации гладких выпуклых функций. Однако авторам неизвестны алгоритмы, подобные по своим характеристикам изучаемым ниже.

2. Пусть $f(x)$ — строго выпуклая квадратичная функция, определенная на n-мерном пространстве E^n:

$$f(x) = (Ax, x)/2 + (b, x) + c,$$

где A — симметричная положительно-определенная матрица, b — вектор, c — скаляр. Через v_j будет обозначаться орт j-й оси координат.

Определим систему векторов $\{r_j\}$ следующим образом:

$$r_1=w_1,\qquad r_i=w_i-\sum_{j=1}^{i-1}\frac{(w_i,e_j)}{(w_j,e_j)}r_j,\qquad 2\leqslant i\leqslant n,$$

где $e_j=f'(x+r_j)-f'(x)=Ar_j$, а

(2.1) $\qquad w_i=\lambda_i v_i,\qquad \lambda_i\neq 0.$

Метод, которым строится система векторов $\{r_i\}$, обеспечивает их A-ортогональность (см., например, [7]), т. е.

(2.2) $\qquad (Ar_i,r_j)=0,\qquad (Ar_i,r_i)>0$

для всех $1\leqslant i,\ j\leqslant n,\ i\neq j$. При выборе w_i в виде (2.1) оказывается, что $r_i^j=0$ при всех $1\leqslant i<j\leqslant n$ (здесь и далее верхние индексы указывают, что рассматривается соответствующая верхнему индексу координата вектора). Используя этот факт, легко показать, что $e_i^j=0$ при всех $1\leqslant j<i\leqslant n$ и

(2.3) $\qquad (w_i,e_i)=(r_i,e_i)=(w_i,Ar_i).$

Определим матрицу

$$B=\sum_{i=1}^{n}\frac{r_ir_i^*}{(w_i,e_i)}$$

(символ * обозначает операцию транспонирования). С учетом (2.3)

$$BA=\sum_{i=1}^{n}\frac{r_ir_i^*}{(w_i,e_i)}A=\sum_{i=1}^{n}\frac{r_ie_i^*}{(w_i,e_i)}=E.$$

Таким образом, $B=A^{-1}$ и можно найти точку минимума функции $f(x)$ по формуле

$$x_*=x_0-Bf'(x_0)=x_0-\sum_{i=1}^{n}\frac{(f_0',r_i)}{(w_i,e_i)}r_i.$$

Как будет показано ниже, в случае неквадратичных функций свойства (2.2) и (2.3) будут приближенно справедливы, и это дает возможность построить алгоритмы, представленные в настоящей статье.

3. Рассмотрим алгоритм минимизации, в котором последовательные приближения строятся по формуле

(3.1) $\qquad x_{k+1}=x_k+\alpha_kp_k=x_k-\alpha_k\sum_{i=1}^{n}\frac{(f_k',r_{ki})}{q_{ki}}r_{ki}.$

Система векторов $\{r_{ki}\}$ строится таким образом:

$$r_{k1}=w_{k1},\qquad r_{ki}=w_{ki}-\sum_{j=1}^{i-1}\frac{(w_{ki},e_{kj})}{q_{kj}}r_{kj},\qquad 2\leqslant i\leqslant n,$$

(3.2)

$$w_{ki}=\lambda_kv_i,\qquad 1\leqslant i\leqslant n,$$

причем $\lambda_k \neq 0$, но $\lim\limits_{k\to\infty} \lambda_k = 0$, а $e_{ki} = f'(x_k + r_{ki}) - f'(x_k)$. Величина q_{ki} определяется следующим образом:

$$q_{ki} = \begin{cases} (w_{ki}, e_{ki}), & (w_{ki}, e_{ki}) > 0, \\ (r_{ki}, e_{ki}), & (w_{ki}, e_{ki}) \leqslant 0. \end{cases}$$

В качестве скалярного множителя α_k берется значение параметра $0 < \alpha \leqslant 1$, при котором выполняется неравенство

$$f(x_k + \alpha p_k) - f(x_k) \leqslant \varepsilon \alpha (f_k', p_k), \qquad 0 < \varepsilon < 1/2 \tag{3.3}$$

(более подробно данный способ выбора α_k описан в [3, 8]).

Далее будем опускать индекс k в написании величин r_{ki}, q_{ki}, w_{ki}, e_{ki} и обозначать последние через r_i, q_i, w_i, e_i соответственно.

Исследуем свойства этого процесса. Предположим, что $f(x)$ — дважды непрерывно дифференцируемая, сильно выпуклая функция, т. е. существуют постоянные $0 < m \leqslant M$ такие, что для всех x, $y \in E^n$ справедливо неравенство

$$m\|y\|^2 \leqslant (f''(x) y, y) \leqslant M\|y\|^2. \tag{3.4}$$

Отметим тот факт, что $q_i > 0$, так как

$$(r_i, e_i) = (r_i, f'(x_k + r_i) - f'(x_k)) = (r_i, f''(x_k + \theta_i r_i) r_i) \geqslant m\|r_i\|^2, \quad \theta_i \in [0, 1]. \tag{3.5}$$

В дальнейшем будем использовать обобщенную формулу Лагранжа без подробных объяснений. Через β_k будут обозначаться величины, стремящиеся к нулю при $k \to \infty$.

Лемма 1. *При сделанных выше предположениях о функции $f(x)$ и выборе множителей λ_k справедливы оценки*

$$(r_i, e_j) = \beta_k \|r_i\| \|e_j\|, \tag{3.6}$$

$$(r_i, e_i) - (w_i, e_i) = \beta_k \|r_i\| \|e_i\| \tag{3.7}$$

для всех $1 \leqslant i$, $j \leqslant n$, $i \neq j$.

Доказательство проведем индукцией по i. При $i = 1, 2$

$$\begin{gathered} \|r_1\| = \|w_1\| = |\lambda_k|, \qquad (w_1, e_1) = (r_1, e_1), \\ |\lambda_k| \leqslant \|r_2\| = \left\| w_2 - \frac{(w_2, e_1)}{(w_1, e_1)} w_1 \right\| \leqslant |\lambda_k| \left[1 + \frac{\|e_1\| \|r_1\|}{m\|r_1\|^2} \right] \leqslant C|\lambda_k| \end{gathered} \tag{3.8}$$

(через C будут обозначаться положительные, равномерно ограниченные по k постоянные). Далее,

$$\begin{gathered} (r_2, e_1) = (w_2, e_1) - \frac{(w_2, e_1)}{(w_1, e_1)} (w_1, e_1) = 0, \\ (r_1, e_2) = (r_1, f'(x_k + r_2) - f'(x_k)) = (r_1, f''(x_k + \theta_2 r_2) r_2) = \\ = (r_1, f''(x_k + \theta_1 r_1) r_2) + (r_1, [f''(x_k + \theta_2 r_2) - f''(x_k + \theta_1 r_1)] r_2) = \\ = (r_2, e_1) + \beta_k \|r_1\| \|e_2\| = \beta_k \|r_1\| \|e_2\|, \qquad \beta_k \to 0, \end{gathered}$$

в силу непрерывности матрицы вторых производных и оценки (3.8).

Пусть соотношения (3.6), (3.7) справедливы и $\|r_i\|\leqslant C|\lambda_k|$ для всех $1\leqslant i$, $j\leqslant\tau$. Докажем, что эти оценки справедливы и для всех $1\leqslant i$, $j\leqslant\tau+1$. Отметим, что начиная с некоторого k, в силу (3.7), $q_i\equiv(w_i, e_i)$ для $1\leqslant i\leqslant\tau$ и

$$|\lambda_k|\leqslant\|r_{\tau+1}\|=\left\|w_{\tau+1}-\sum_{i=1}^{\tau}\frac{(w_{\tau+1}, e_i)}{q_i}r_i\right\|\leqslant$$

$$\leqslant|\lambda_k|\left[1+\sum_{i=1}^{\tau}\frac{\|e_i\|\,\|r_i\|}{\|e_i\|\,\|r_i\|\,(m/M+\beta_k)}\right]\leqslant C|\lambda_k|,$$

т. е. $\|r_{\tau+1}\|$ имеет тот же порядок малости, что и $\|r_1\|,\ldots,\|r_\tau\|$. Далее имеем

$$(r_{\tau+1}, e_j)=(w_{\tau+1}, e_j)-(w_{\tau+1}, e_j)\frac{(r_j, e_j)}{(r_j, e_j)\,(1+\beta_k)}-$$

$$-\sum_{i=1,i\neq j}^{\tau}\frac{(w_{\tau+1}, e_i)}{q_i}\beta_k\|r_i\|\,\|e_j\|=\beta_k\|r_{\tau+1}\|\,\|e_j\|,$$

(3.9)
$$(r_j, e_{\tau+1})=(r_{\tau+1}, e_j)+(r_j, [f''(x_k+\theta_{\tau+1}r_{\tau+1})f''(x_k+\theta_jr_j)]r_{\tau+1})=$$
$$=\beta_k\|r_j\|\,\|e_{\tau+1}\|,$$

$$(r_{\tau+1}, e_{\tau+1})=(w_{\tau+1}, e_{\tau+1})+\sum_{i=1}^{\tau}\frac{(w_{\tau+1}, e_i)}{q_i}\beta_k\|r_{\tau+1}\|\,\|e_{\tau+1}\|=$$
$$=(w_{\tau+1}, e_{\tau+1})+\beta_k\|r_{\tau+1}\|\,\|e_{\tau+1}\|.$$

Лемма доказана.

Лемма 2. *Если в дополнение к условиям леммы 1 матрица вторых производных $f''(x)$ удовлетворяет условию Липшица*

(3.10) $$\|f''(x)-f''(y)\|\leqslant R\|x-y\|$$

для любых $x, y\in E^n$, то в (3.6), (3.7) *имеем*

(3.11) $$|\beta_k|<C|\lambda_k|.$$

Доказательство этой леммы повторяет доказательство леммы 1, за исключением доказательства соотношения (3.9). Имеем

$$(r_i, e_{\tau+1})=(r_{\tau+1}, e_i)+(r_{\tau+1}[f''(x_k+\theta_{\tau+1}r_{\tau+1})-f''(x_k+\theta_ir_i)]r_i)=$$
$$=C|\lambda_k|\,\|r_i\|\,\|e_{\tau+1}\|+\|r_{\tau+1}\|\,\|r_i\|C\|r_{\tau+1}+r_i\|=C|\lambda_k|\,\|r_i\|\,\|e_{\tau+1}\|.$$

Рассмотрим матрицу

$$A_k^{-1}=\sum_{i=1}^{n}\frac{r_ir_i^*}{q_i}.$$

Она симметрична и положительно определена. Формула (3.1) может быть представлена в виде

(3.12) $$x_{k+1}=x_k-\alpha_kA_k^{-1}f_k'.$$

Лемма 3. *Если выполняются условия леммы 1, то при* $k\to\infty$

(3.13) $\|A_k-f_k''\|\to 0.$

Если дополнительно выполняется условие Липшица (3.10) *для матрицы вторых производных* $f''(x)$, *то справедлива оценка*

(3.14) $\|A_k-f_k''\|\leqslant C|\lambda_k|.$

Доказательство (3.13) проводится аналогично доказательству леммы 2.5.1 в [8]. Соотношение (3.14) доказывается следующим образом:

$$A_k^{-1}e_j=\sum_{i=1}^{n}\frac{r_ir_i^*e_j}{q_i}=r_j+\eta_j,$$

причем $\|\eta_j\|\leqslant C\lambda_k^2$, что следует из (3.11). Следовательно, $A_k(r_j+\eta_j)=e_j$. Обозначим $B_k=A_k-f_k''$, тогда

$$B_k(r_j+\eta_j)=e_j-f_k''r_j-f_k''\eta_j=-f_k''\eta_j+\int_0^1 f''(x_k+\tau r_j)r_j\,d\tau-$$

$$-\int_0^1 f''(x_k)r_j\,d\tau=-f_k''\eta_j+\int_0^1[f''(x_k+\tau r_j)-f''(x_k)]r_j\,d\tau,$$

$$\|B_k(r_j+\eta_j)\|\leqslant MC\lambda_k^2+R\|r_j\|^2\leqslant C\lambda_k^2.$$

Так как система векторов $\{r_j\}$ линейно-независима, $\|r_j\|\geqslant\lambda_k$, $\|\eta_i\|\leqslant C\lambda_k^2$ и $\lim\limits_{k\to\infty}\lambda_k=0$, то при достаточно больших k система векторов $\{\hat r_j\}$ таких, что $\hat r_j=r_j+\eta_j$, также будет линейно-независимой.

Действительно, рассмотрим определитель Δ_k, строками которого являются векторы $\hat r_j^*/\|\hat r_j\|$:

$$\Delta_k=\begin{vmatrix} r_1^1+\eta_1^1 & \eta_1^2 & \dots & \eta_1^n\\ r_2^1+\eta_2^1 & r_2^2+\eta_2^2 & \dots & \eta_2^n\\ \dots & \dots & \dots & \dots\\ r_n^1+\eta_n^1 & r_n^2+\eta_n^2 & \dots & r_n^n+\eta_n^n\end{vmatrix}\left(\prod_{i=1}^n\|\hat r_i\|\right)^{-1}=$$

$$=\prod_{i=1}^n\frac{r_i^i}{\|r_i\|}+O(\lambda_k)\geqslant\varepsilon>0$$

при достаточно больших k. Повторяя дальше рассуждения леммы 2.5.1 из [8], устанавливаем, что $\|B_k\|=\|A_k-f_k''\|\leqslant C|\lambda_k|$, что и требовалось доказать.

На основании леммы 2 и условия (3.4) можно утверждать, что матрица A_k^{-1} удовлетворяет при больших k условию $m_1\|y\|^2\leqslant(A_k^{-1}y,y)\leqslant\leqslant M_1\|y\|^2$, $m_1>0$, для всех $y\in E^n$ и $\|x_k-x_*\|\to 0$ при $k\to\infty$.

Будем теперь считать, что

(3.15) $C_1\|f_k'\|\leqslant|\lambda_k|\leqslant C_2\|f_k'\|,$

причем постоянные $C_1>0$ и C_2 не зависят от k.

Теорема 1. *Если $f(x)$ удовлетворяет сформулированным выше требованиям, λ_k выбирается согласно условию* (3.15), *то последовательность* (3.1) *сходится к точке минимума со сверхлинейной скоростью. Если же выполняется также и условие* (3.10), *то скорость сходимости квадратичная.*

Доказательство теоремы основывается на результатах леммы 3 и аналогично доказательству теоремы 2.3.1 из [3]. При этом необходимо уточнить оценку скорости сходимости во второй части доказательства:

$$\|x_{k+1}-x_*\|\leqslant M\{\|A_k-f_k''\|+\|f_k''-f''[x_k+\theta_k(x_k-x_*)]\|\}\|x_k-x_*\|;$$

$$\|A_k-f_k''\|\leqslant C|\lambda_k|\leqslant C\|f_k'\|\leqslant\frac{C\|A_k\|}{\alpha_k}\|x_k-x_*\|,$$

следовательно, $\|x_{k+1}-x_*\|\leqslant C\|x_k-x_*\|^2$, что и требовалось доказать. Следует отметить, что в методе (3.1), (3.2) при каждом k необходимо вычислять только $n(n+3)/2$ частных производных, а не $2n^2$, как в методе (10), (12) из [1].

4. Рассмотрим теперь свойства итерационного процесса

$$x_{k+1}=x_k-\alpha_k A_k^{-1}f_k', \tag{4.1}$$

определяя матрицу A_k^{-1} следующим образом:

$$A_k^{-1}=\sum_{i=0}^{n-1}\frac{r_{k-i}r_{k-i}^*}{q_{k-i}}, \tag{4.2}$$

где векторы $r_k=r_{\xi n+s}$, $\xi=0,1,\ldots$, $1\leqslant s\leqslant n$, строятся по формулам

$$r_{\xi n+1}=w_{\xi n+1},\qquad r_{\xi n+s+1}=w_{\xi n+s+1}-\sum_{j=1}^{s}\frac{(w_{\xi n+s+1},e_{\xi n+j})}{q_{\xi n+j}}r_{\xi n+j},$$

а $w_{\xi n+s}=\lambda_{\xi n+s}v_s$, причем $\lambda_{\xi n+s}\neq 0$, и где

$$e_k=f'(x_k+r_k)-f'(x_k),$$

$$q_{k-i}=\begin{cases}(w_{k-i},e_{k-i}), & (w_{k-i},e_{k-i})>0,\\ (r_{k-i},e_{k-i}), & (w_{k-i},e_{k-i})\leqslant 0.\end{cases}$$

Величина α_k определяется таким же образом, как в п. 3. Далее k часто представляется в виде $\xi n+s$, а слагаемое ξn опускается.

Будем считать, что при выборе множителей λ_k выполнены условия

$$\lim_{k\to\infty}\lambda_k=0,\qquad 0<C\leqslant\left|\frac{\lambda_{s+1}}{\lambda_s}\right|\leqslant 1,\quad 1\leqslant s\leqslant n-1, \tag{4.3}$$

причем C не зависит от ξ, а матрица вторых производных $f''(x)$ удовлетворяет условию (3.4).

Отметим, что неравенство (3.5) справедливо и для процесса (4.1), (4.2), следовательно, матрица A_k^{-1} положительно определена. Следовательно, при выборе α_k из условия (3.3) получим $f_{k+1}\leqslant f_k$, и так как функция $f(x)$ ограничена снизу, то $f_{k+1}-f_k\to 0$ при $k\to\infty$. Используя соотношение

(3.3) и положительную определенность матрицы A_k^{-1}, получаем, что

$$0 \leqslant (f'(x_k), x_{k+1}-x_k) = -\alpha_k (f_k', p_k) \leqslant \frac{f_{k+1}-f_k}{\varepsilon} \to 0,$$

поэтому (см. [8], стр. 82)

(4.4) $\qquad \|x_{k+1}-x_k\| \to 0.$

Описываемый итерационный процесс является обобщением процесса (3.1), и в последующем изложении некоторые выкладки (аналогичные тем, которые проводились при изучении метода (3.1)) будут проведены без подробных объяснений.

Лемма 4. *При сделанных выше предположениях о свойствах матрицы вторых производных $f''(x)$ и выборе множителей λ_k для процесса* (4.1), (4.2) *справедливы соотношения*

(4.5) $\qquad (r_{k-i}, e_{k-j}) = \beta_k \|r_{k-i}\| \|e_{k-i}\|,$

(4.6) $\qquad (r_{k-i}, e_{k-i}) - (w_{k-i}, e_{k-i}) = \beta_k \|r_{k-i}\| \|e_{k-i}\|,$

$0 \leqslant i, j \leqslant n-1$, *где* $\beta_k \to 0$ *при* $k \to \infty$.

Доказательство. Пусть $k = \xi n + s$. Рассмотрим систему векторов $r_{-n+s+1}, \ldots, r_0, r_1, \ldots, r_s$ (индекс ξn опущен). При выполнении условий (4.3), (4.4) можно показать, рассуждая так же, как и в лемме 1, что $\|r_{k-i}\| \leqslant C|\lambda_{k-i}|$ и соотношения (4.5), (4.6) справедливы для всех $0 \leqslant i, j \leqslant s-1$ и $s \leqslant i, j \leqslant n-1$.

С учетом этого остается показать, что

(4.7) $\qquad (r_j, e_{-n+i}) = \beta_k \|r_j\| \|e_{-n+j}\|,$

(4.8) $\qquad (r_{-n+i}, e_j) = \beta_k \|e_j\| \|r_{-n+i}\|$

для всех i, j таких, что $1 \leqslant j \leqslant s < i \leqslant n$.

Соотношение (4.7) доказывается индукцией по j. Пусть $\omega_s = \lambda_s / \lambda_{-n+s}$. Тогда $r_1 = \omega_1 r_{-n+1}$ и

$$(r_1, e_{-n+i}) = \omega_1 (r_{-n+1}, e_{-n+i}) = \beta_k \omega_1 \|r_{-n+1}\| \|e_{-n+i}\| = \beta_k \|r_1\| \|e_{-n+i}\|.$$

Пусть (4.7) справедливо для всех j таких, что $0 \leqslant j \leqslant \tau < s$, тогда

$$(r_{\tau+1}, e_{-n+i}) = \omega_{\tau+1}(w_{-n+\tau+1}, e_{-n+i}) - \sum_{j=1}^{\tau} \frac{(w_{\tau+1}, e_j)}{q_j}(r_j, e_{-n+i}) =$$

$$= \omega_{\tau+1}(r_{-n+\tau+1}, e_{-n+i}) + \omega_{\tau+1} \sum_{j=0}^{\tau} \frac{(\omega_{-n+\tau+1}, e_{-n+j})}{q_{-n+j}}(r_{-n+j}, e_{-n+i}) +$$

$$+ \beta_k \|r_{\tau+1}\| \|e_{-n+i}\| = \beta_k \|r_{\tau+1}\| \|e_{-n+i}\|.$$

Используя обобщенную формулу Лагранжа и соотношения (4.4), (4.7), легко доказать справедливость (4.8).

Из леммы следует, что $q_k \equiv (w_k, e_k)$ начиная с некоторого k, и для $0 \leqslant j \leqslant n-1$ имеем

$$A_k^{-1} e_{k-j} = \sum_{i=0}^{n-1} \frac{r_{k-i} \overset{*}{r}_{k-i} e_{k-j}}{(w_{k-i}, e_{k-i})} = r_{k-j} + \eta_{k-j},$$

где $\|\eta_{k-j}\| = \beta_k \|r_{k-n+1}\|$, поэтому аналогично теореме 1 может быть доказана

Теорема 2. *Если выполняются условия леммы 4, матрица A_k^{-1} определяется формулой (4.2), α_k выбирается из условия (3.3), то независимо от выбора начального приближения x_0 последовательность (4.1) сходится к точке минимума со сверхлинейной скоростью.*

Если матрица вторых производных $f''(x)$ удовлетворяет условию Липшица (3.10), то оценка скорости сходимости может быть уточнена следующим образом. Пусть

$$C_1 \|f'_{\xi n+1}\| \leqslant |\lambda_{\xi n+s}| \leqslant C \|f'_{\xi n+1}\|,$$

где $C_1 > 0$ и C не зависят от ξ. Тогда для любых $1 \leqslant i < j \leqslant n$ имеем

$$\|f''(x_i + \theta_i r_i) - f''(x_j + \theta_j r_j)\| \leqslant R \|x_i + \theta_i r_i - x_j - \theta_j r_j\| \leqslant$$
$$\leqslant R(\|x_i - x_j\| + \|r_i\| + \|r_j\|) \leqslant C \|x_i - x_*\| + C \|f_1'\| \leqslant C \|x_1 - x_*\|.$$

Аналогично, $\|f''(x_{-n+j} + \theta_{-n+j} r_{-n+j}) - f''(x_i + \theta_i r_i)\| \leqslant C \|x_{-n+1} - x_*\|$. Повторяя далее рассуждения лемм 2, 3 и теоремы 1, можно получить следующую оценку скорости сходимости:

$$\|x_{\xi n+s+1} - x_*\| \leqslant C \|x_{\xi n+s} - x_*\| \|x_{(\xi-1)n+1} - x_*\|.$$

При реализации процесса (4.1), (4.2) на ЭВМ необходима память объемом $n^2 + o(n^2)$ ячеек для хранения значений компонент векторов $\{r_i\}$ и $\{e_i\}$, $k-n \leqslant i \leqslant k-1$.

На каждом шаге итерационного процесса необходимо вычислять от $n+1$ до $2n$ частных производных функции $f(x)$, т. е. $(3n^2+n)/2$ производных на n шагах.

До сих пор мы рассматривали итерационный процесс (4.1), (4.2) начиная с $k=n$, поскольку для определения матрицы A_k^{-1} требуется n векторов r_k и соответствующих величин q_k. Первые итерации процесса $(k < n-1)$ можно осуществлять различными способами. Например, полагать $p_k = -f_k'$ и производить градиентный спуск либо, вычисляя A_k^{-1} по формуле

$$A_k^{-1} = \sum_{i=0}^{k-1} \frac{r_{k-i} \overset{*}{r}_{k-i}}{q_{k-i}},$$

осуществлять спуск в подпространстве E^k, натянутом на векторы $v_1, \ldots, v_k$. Возможны и другие способы организации первых шагов процесса (4.1), (4.2).

5. Рассмотрим модификации метода (4.1), (4.2), в котором векторы $\{r_{\xi n+s}\}$ строятся по формулам

$$r_1 = w_1, \qquad r_{s+1} = w_{s+1} - \sum_{j=1}^{s} \frac{(w_{s+1}, e_{s+1,j})}{q_j} r_j,$$

где $e_{s+1,j} = f'(x_{s+1} + r_j) - f'(x_{s+1})$ (в этих формулах опущен индекс ξn).

При таком способе построения векторов $\{r_{\xi n+s}\}$ не требуется хранить в памяти информацию о векторах $\{e_{k-i}\}$, т. е. для реализации этого метода необходимый объем памяти равен $n^2/2+o(n^2)$ ячеек, при этом дополнительных вычислений функции $f(x)$ и ее частных производных не требуется, а все оценки скорости сходимости сохраняются.

Поступила в редакцию 4.04.1977

Цитированная литература

1. *Ю. М. Данилин.* Методы сопряженных направлений, не требующие решения одномерных задач минимизации. Докл. АН СССР, 1974, 218, № 3, 513–516.
2. *R. Fletcher, M. I. D. Powell.* A rapidly convergent descent method for minimization. Comput. J., 1963, 6, № 2, 163–168.
3. *Ю. М. Данилин, Б. Н. Пшеничный.* О методах минимизации с ускоренной сходимостью. Ж. вычисл. матем. и матем. физ., 1970, 10, № 6, 1341–1354.
4. *E. Polak.* A modified secant method for unconstrained minimization. Math. Program., 1974, 6, № 4, 264–280.
5. *H. I. Huang.* Method of dual matrices for function minimization. J. Optimization Theory and Appl., 1974, 15, № 5, 519–537.
6. *G. R. McCormick, K. Ritter.* Methods of conjugate directions versus quasi-Newton methods. Math. Program., 1972, 3, 101–116.
7. *Д. К. Фаддеев, В. Н. Фаддеева.* Вычислительные методы линейной алгебры. М., Физматгиз, 1960.
8. *Б. Н. Пшеничный, Ю. М. Данилин.* Численные методы в экстремальных задачах. М., «Наука», 1975.