基于行列式乘子表示的 LMSD 收敛证明及加权 Ritz 推广

杨书泰

摘 要

本文研究严格凸二次问题上 LMSD、harmonic-LMSD 及一类加权 Ritz-sweep 方法的收敛性质。核心做法是把完整 Ritz-sweep 在谱分量上的乘子写成行列式之比，再由 Cauchy–Binet 展开得到非负加权平均，从而避开 Krylov 子空间维数下降时单个 Ritz 值极限不连续的问题。基于这一框架，本文发现 Fletcher 原始论证在 Krylov 子空间维数下降时并不适用，并给出一种修正。从而在更一般的情形下严格建立 LMSD 与 harmonic-LMSD 的全局收敛性，并进一步推广到统一的 ω-加权 Ritz 结构。最后给出若干数值模拟，验证理论结论及新算法族的有效性。

关键词： Barzilai–Borwein 步长；LMSD；Ritz 值；Cauchy–Binet 公式；加权 Ritz 步长；数值实验。

1 引言

考虑无约束优化问题

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} f(x), \tag{1.1}$$

其梯度法基本迭代格式为

$$x_{k+1} = x_k - \alpha_k g_k, \qquad g_k = \nabla f(x_k).$$

Barzilai 与 Borwein 提出的 BB1/BB2 步长 [1]

$$\alpha_k^{\mathrm{BB1}} = \frac{s_k^T s_k}{s_k^T y_k}, \qquad \alpha_k^{\mathrm{BB2}} = \frac{s_k^T y_k}{y_k^T y_k}, \tag{1.2}$$

其中 $s_k = x_{k+1} - x_k$、$y_k = g_{k+1} - g_k$，是谱梯度法最重要的出发点之一。Raydan [2] 证明了 BB 方法在严格凸二次问题上的全局收敛，Dai–Liao [3] 给出了 R-线性收敛证明。

由 BB 方法衍生出众多固定记忆谱梯度方法。Fletcher 在二次情形下把一个 BB 步长推广成一整个 Ritz-sweep [4]，得到了 limited memory steepest descent (LMSD) 方法及其 harmonic 变体。Ferrandi–Hochstenbach [6] 进一步从 Hessian 矩阵的子空间投影、割线最小二乘与对称化的角度，给出了 LMSD 的统一解释。Curtis–Guo [5] 在一定的非退化条件下证明了 fixed-cycle LMSD 的 R-线性收敛。

这里先约定两个术语，并说明固定记忆谱梯度方法的基本更新方式。经典 BB 方法每一步只利用当前的一对割线信息 (s_k, y_k)，而固定记忆（limited-memory）谱梯度方法保留最近 p 对割线 $(s_{k,r}, y_{k,r})$，由它们一次性解出 p 个谱步长，再在随后的 p 步迭代中依次使用。我们把这样一组“由同一批历史信息生成、并被连续使用的 p 个步长所对应的 p 步迭代”称为一个块（block，或一次 Ritz-sweep），并把整数 p 称为块长或历史窗口。每走完一

作者信息: 2022 级数学科学学院, 邮箱: taitai@mail.ustc.edu.cn

稿件信息: 本稿件于 4 月 30 日来稿。稿件编辑：朱葛瑄，邓博文

个块，历史窗口随之向前滑动：用新产生的割线对替换最旧的一对，再据此生成下一块所用的步长。本文的分析正是以“块”为基本单位展开的。

这些步长的具体取法由 Ritz 值给出。设 H 为对称矩阵、$\mathcal{V} \subset \mathbb{R}^n$ 为一子空间，取 $\mathcal{V}$ 的一组标准正交基排成列正交矩阵 Q，则称 $|\mathcal{V}| \times |\mathcal{V}|$ 小矩阵 $Q^T H Q$ 的特征值为 H 在 $\mathcal{V}$ 上的 Ritz 值。它们是 H 的特征值在子空间 $\mathcal{V}$ 上的标准 Rayleigh–Ritz 逼近，并总落在 H 的谱区间内。直观地说，LMSD 把“一个 BB 步长”升级为“由当前历史子空间上的 p 个 Ritz 值（取倒数）构成的一整块步长”，从而在每个块内同时照顾到 H 谱的多个方向。

本文给出 LMSD 与 harmonic-LMSD 方法在严格凸二次问题上的全局收敛证明。证明分为两个互补部分：首先，在精确二次模型中，同一块内连续生成的历史矩阵不可能在仍有超过 p 个互异活跃特征值时发生真正的 Krylov 秩降，一旦剩余活跃特征值个数不超过 p，秩自适应 sweep 反而会有限终止。其次，在非有限终止的正则区域内，我们把一整块步长作用在某个谱分量上的总乘子写成两个对称行列式之比，再通过 Cauchy–Binet 展开把它表示为有限组非负权重下的加权平均，最后借助一个简单的“乘子权重引理”控制其极限。这一过程绕开了 Fletcher [4] 附录中“从极限向量推导单个 Ritz 值的渐进位置”这一在 Krylov 子空间维数下降时难以直接成立的步骤。

更进一步地，我们将看到这一证明框架并不依赖于 LMSD 步长的特定代数形式。把每一块的标准步长 $\theta_{k,r}^{-1}$ 替换为某种“加权 Ritz 值”型步长后，同样的框架仍然适用。本文最后给出这一拓展，从而把 LMSD 方法的收敛证明推广到一个更广泛的、覆盖一类固定记忆谱梯度方法的统一图景之中。

记号约定。固定块长 $p \in \mathbb{N}$。本文统一把第 k 个完整块中第 r 个位置的点、梯度与位移记为

$$x_{k,r}, \qquad g_{k,r} = \nabla f(x_{k,r}), \qquad s_{k,r} = x_{k,r+1} - x_{k,r}, \qquad r = 0, \dots, p-1,$$

其中 $x_{k,p} = x_{k+1,0}$。相应地把第 k 个完整块的状态、位移束、梯度束分别记为

$$E_k = [x_{k,0}, \dots, x_{k,p}], \quad S_k = [s_{k,0}, \dots, s_{k,p-1}], \quad G_k = [g_{k,0}, \dots, g_{k,p-1}].$$

本文所有“p 个 Ritz 值”的说法均按重数计数。若某一小型对称广义特征值问题产生重复 Ritz 值，则对应步长在 Ritz-sweep 中也按相同重数重复使用。

不失一般性，本文对二次问题做出如下标准形约定。

假设 1.1. 对严格凸二次函数

$$q(x) = q(x^*) + \frac{1}{2}(x - x^*)^T H (x - x^*), \qquad H \succ 0,$$

我们总是先作平移，把极小点移到原点，再作正交变换把 H 对角化。若某个特征值有重数，则把问题压缩到由初始梯度生成的活跃不变子空间，并在每个活跃特征子空间内选择正交基，使初始梯度至多在其中一个方向上有非零坐标。由于一旦某个坐标为零，二次梯度递推会永远保持它为零，故可不失一般性地假设

$$q(x) = \frac{1}{2} x^T H x, \qquad H = \operatorname{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n), \qquad 0 < \lambda_1 < \cdots < \lambda_n,$$

其中 $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ 是关于初始梯度活跃的不同特征值。

在这个约定下，二次理论里 x 同时也是迭代点相对最优点的误差变量。

本文结构如下：第 2 节回顾 BB1/BB2 的最小二乘解释及其向 p 阶矩阵的推广，引出 LMSD 与 harmonic-LMSD 的步长定义。第 3 节讨论 Krylov 子空间结构与有限终止性质。

第 4 节是本文核心，给出 LMSD 与 harmonic-LMSD 全局收敛的完整证明。第 5 节给出步长公式的一类自然推广，并指出同一证明框架可继续使用。第 6 节给出数值实验。第 7 节给出若干结语与展望。

2 LMSD 的最小二乘解释与步长定义

2.1 BB1/BB2 的一维最小二乘解释

设

$$s_{k,0} = x_{k,1} - x_{k,0}, \qquad y_{k,0} = g_{k,1} - g_{k,0}.$$

BB1 与 BB2 分别可以由下面两个一维最小二乘问题导出：

$$\eta_{k,0}^{\mathrm{BB1}} := \arg\min_{\eta\in\mathbb{R}} \left\|\eta s_{k,0} - y_{k,0}\right\|^2 = \frac{s_{k,0}^T y_{k,0}}{s_{k,0}^T s_{k,0}}, \qquad \alpha_k^{\mathrm{BB1}} = \frac{1}{\eta_{k,0}^{\mathrm{BB1}}}; \tag{2.1}$$

$$\alpha_k^{\mathrm{BB2}} := \arg\min_{\alpha\in\mathbb{R}} \left\|s_{k,0} - \alpha y_{k,0}\right\|^2 = \frac{s_{k,0}^T y_{k,0}}{y_{k,0}^T y_{k,0}}. \tag{2.2}$$

也就是说，BB1 是“用一个标量拟合 Hessian”的最小二乘解，而 BB2 是“用一个标量拟合逆 Hessian”的最小二乘解。这正是把 BB 推广到更高维步长的自然出发点。

2.2 p 阶矩阵的最小二乘推广

固定正整数 p。在第 k 个完整块起点，记最近 p 个割线对所构成的位移束与梯度差束为

$$S_k = [s_{k,0}, \ldots, s_{k,p-1}] \in \mathbb{R}^{n\times p}, \qquad Y_k = [y_{k,0}, \ldots, y_{k,p-1}] \in \mathbb{R}^{n\times p},$$

并令

$$M_k = S_k^T S_k, \qquad B_k = S_k^T Y_k, \qquad D_k = Y_k^T Y_k.$$

按照 [6] 中的解释，把 (2.1)–(2.2) 中的标量分别提升为 $p\times p$ 矩阵，可得到原始矩阵最小二乘模型

$$M_k^{\mathrm{LS}} := \arg\min_{M\in\mathbb{R}^{p\times p}} \|Y_k - S_k M\|_F^2, \qquad N_k^{\mathrm{LS}} := \arg\min_{N\in\mathbb{R}^{p\times p}} \|S_k - Y_k N\|_F^2. \tag{2.3}$$

当 M_k 与 D_k 可逆时，由正规方程立刻得到

$$M_k^{\mathrm{LS}} = M_k^{-1} B_k, \qquad N_k^{\mathrm{LS}} = D_k^{-1} B_k^T. \tag{2.4}$$

命题 2.1. 当 $p = 1$ 时，(2.4) 精确退化为经典 BB1/BB2：

$$M_k^{\mathrm{LS}} = \frac{s_{k,0}^T y_{k,0}}{s_{k,0}^T s_{k,0}} = \frac{1}{\alpha_k^{\mathrm{BB1}}}, \qquad N_k^{\mathrm{LS}} = \frac{s_{k,0}^T y_{k,0}}{y_{k,0}^T y_{k,0}} = \alpha_k^{\mathrm{BB2}}.$$

可见经典 BB 与更高维的 pD-BB 步长可以放在同一个“矩阵最小二乘谱拟合”框架下来理解。

2.3 严格凸二次情形下与 Ritz 值的等价性

由假设 1.1，严格凸二次情形可在标准形

$$q(x) = \frac{1}{2} x^T H x, \qquad H = \mathrm{diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_n), \qquad 0 < \lambda_1 < \cdots < \lambda_n \tag{2.5}$$

下讨论。这时 $Y_k = HS_k$。Ferrandi–Hochstenbach [6] 给出了如下严格的等价关系。

定理 2.2. 设 q 由 (2.5) 给出。令 $S_k = Q_k R_k$ 与 $Y_k = W_k T_k$ 为相应薄 QR 分解，则

$$M_k^{\mathrm{LS}} = R_k^{-1}(Q_k^T H Q_k)R_k, \qquad N_k^{\mathrm{LS}} = T_k^{-1}(W_k^T H^{-1} W_k)T_k. \tag{2.6}$$

因此：

(i) M_k^{LS} 的特征值精确等于 H 在子空间 $\mathrm{span}(S_k)$ 上的 Ritz 值；

(ii) N_k^{LS} 的特征值精确等于 H^{-1} 在子空间 $\mathrm{span}(Y_k)$ 上的 Ritz 值。

证明. 由 $Y_k = HS_k$ 与 $S_k = Q_k R_k$ 得 $M_k = R_k^T R_k$、$B_k = R_k^T(Q_k^T H Q_k)R_k$，故

$$M_k^{\mathrm{LS}} = (R_k^T R_k)^{-1} R_k^T (Q_k^T H Q_k) R_k = R_k^{-1}(Q_k^T H Q_k) R_k.$$

N_k^{LS} 的写法完全类似。 □

定理 2.2 把一组步长直接刻画成了 H 或 H^{-1} 在某子空间上的 Ritz 值，这是后续证明所依赖的核心代数结构。

2.4 两类块步长定义：S 型与 Y 型

我们采用与 [6] 一致的命名约定。

定义 2.3 (S 型块步长，对应 LMSD)**.** 设当前完整块的历史子空间为

$$\mathcal{S}_k := \mathrm{span}(S_k), \qquad d_k := \dim \mathcal{S}_k \le p.$$

秩自适应解释下，记 H 在 $\mathcal{S}_k$ 上的 d_k 个 Ritz 值为 $\theta_{k,0}, \dots, \theta_{k,d_k-1}$。下一有效 sweep 依次使用步长

$$\alpha_{k+1,r}^{(S)} = \theta_{k,r}^{-1}, \qquad r = 0, \dots, d_k - 1.$$

在固定块长的正则情形中 $d_k = p$，这正是 LMSD 的 p 步 Ritz-sweep。

定义 2.4 (Y 型块步长，对应 harmonic-LMSD)**.** 设当前完整块的历史梯度差子空间为

$$\mathcal{Y}_k := \mathrm{span}(Y_k) = H\,\mathrm{span}(S_k), \qquad d_k := \dim \mathcal{Y}_k \le p.$$

秩自适应解释下，记 H^{-1} 在 $\mathcal{Y}_k$ 上的 d_k 个 Ritz 值为 $\tau_{k,0}, \dots, \tau_{k,d_k-1}$。下一有效 sweep 依次使用步长

$$\alpha_{k+1,r}^{(Y)} = \tau_{k,r}, \qquad r = 0, \dots, d_k - 1.$$

在固定块长的正则情形中 $d_k = p$，这正是 harmonic-LMSD 的 p 步 Ritz-sweep。

3 Krylov 子空间结构与有限终止定理

下面给出严格凸二次情形下 LMSD 历史子空间的 Krylov 描述以及有限终止性质。

命题 3.1. 设 $q(x) = \frac{1}{2}x^T H x$ 为严格凸二次函数，考虑某个固定块中的 p 步梯度迭代。则

$$\mathrm{span}(G_k) = \mathrm{span}(S_k) = \mathcal{K}_p(H, g_{k,0}), \qquad \mathrm{span}(Y_k) = H\,\mathrm{span}(G_k) = H\mathcal{K}_p(H, g_{k,0}).$$

特别地，无论由 G_k、S_k 还是由 $K_k = [g_{k,0}, Hg_{k,0}, \dots, H^{p-1}g_{k,0}]$ 出发得到的 Ritz 值都只由子空间 $\mathcal{K}_p(H, g_{k,0})$ 决定。

证明. 由二次递推 $g_{k,r+1} = (I - \alpha_{k,r}H)g_{k,r}$，对每个 r 存在次数恰为 r 且首项系数非零的多项式 $P_{k,r}$，使 $g_{k,r} = P_{k,r}(H)g_{k,0}$。因此存在可逆上三角矩阵 U_k 使 $G_k = K_k U_k$，于是 $\mathrm{span}(G_k) = \mathrm{span}(K_k) = \mathcal{K}_p(H, g_{k,0})$。由 $s_{k,r} = -\alpha_{k,r}g_{k,r}$、$\alpha_{k,r} > 0$ 知 $\mathrm{span}(S_k) = \mathrm{span}(G_k)$。最后，由 $y_{k,r} = -\alpha_{k,r}Hg_{k,r}$ 可知 $\mathrm{span}(Y_k) = H\,\mathrm{span}(G_k)$。 □

引理 3.2 (Krylov 秩判据)**.** 设 $u \in \mathbb{R}^n$，记

$$\mathcal{A}(u) := \{i : \ u^{(i)} \neq 0\}, \qquad s(u) := |\mathcal{A}(u)|,$$

则

$$\operatorname{rank}[u, Hu, \dots, H^{p-1}u] = \min\{p, s(u)\}.$$

因此，在假设 1.1 的互异活跃谱标准形下，只要当前梯度仍含有至少 p 个互异活跃特征值，连续 Krylov 历史矩阵就不可能精确降到低于 p 维。

证明. 在特征基下，$[u, Hu, \dots, H^{p-1}u]$ 的第 i 行等于

$$u^{(i)}(1, \lambda_i, \dots, \lambda_i^{p-1}).$$

删去 $u^{(i)} = 0$ 的行并提出非零因子 $u^{(i)}$ 后，剩下的是由互异节点 $\{\lambda_i : i \in \mathcal{A}(u)\}$ 生成的 Vandermonde 型矩阵。任取其中 $\min\{p, s(u)\}$ 行与相同数量的前若干列即可得到非零 Vandermonde 子式，故其列秩为 $\min\{p, s(u)\}$。 □

引理 3.3. H 关于 g_0 的极小多项式为 $\pi(t) = \prod_{i=1}^{n}(t-\lambda_i)$，次数为 n，从而 $\dim \mathcal{K}_n(H, g_0) = n$。

证明. 由于 $H = \operatorname{diag}(\lambda_i)$ 对角，对任意多项式 P 有 $P(H)g_0 = \left(P(\lambda_i)g_0^{(i)}\right)_i$。因为标准形下 $g_0^{(i)} \neq 0$，$P(H)g_0 = 0$ 当且仅当 $P(\lambda_i) = 0$ 对所有 i 成立。次数最低的首一这样的多项式正是 π。极小多项式次数等于 Krylov 维数。 □

引理 3.4. 对任意正预热步长，

$$\mathcal{K}_n(H, g_0) = \operatorname{span}\{g_0, \dots, g_{n-1}\} = \operatorname{span}\{s_0, \dots, s_{n-1}\} = \mathbb{R}^n.$$

当历史窗口 $p \geq n$ 时，第一个完整块的历史位移矩阵满足 $\operatorname{span}(S_0) = \mathbb{R}^n$。

证明. 由 $g_j = P_j(H)g_0$（P_j 次数为 j、首项系数非零）即得 $\operatorname{span}\{g_0, \dots, g_{n-1}\} = \mathcal{K}_n(H, g_0)$，由极小多项式次数为 n 知它是全空间。再由 $s_j = -\alpha_j g_j$ 得 $\operatorname{span}\{s_0, \dots, s_{n-1}\}$ 为同一空间。 □

定理 3.5 (有限终止)**.** 设目标函数满足 (2.5) 且已规约至标准形，活跃特征值个数为 n。则在 $p = n$ 且前 n 个预热步长均为正时，第一个完整块识别出全空间 $\mathbb{R}^n$，下一块使用的步长集合在 S 型与 Y 型中都恰为

$$\{\lambda_1^{-1}, \dots, \lambda_n^{-1}\},$$

从而再经过 n 步迭代后梯度变为零。若采用秩压缩，即遇到历史子空间降秩时只使用有效的 Ritz 值构造下一轮步长，则同一结论对 $p \geq n$ 成立，算法在至多 $p + n \leq 2p$ 步内有限终止。

证明. 先看固定维数情形 $p = n$。由引理 3.4，第一个完整块的历史子空间 $\operatorname{span}(S_0) = \mathbb{R}^n$。对 S 型，由定义 2.3 得到的 Ritz 值正是 H 在 $\mathbb{R}^n$ 上的特征值 $\lambda_1, \dots, \lambda_n$，下一块使用步长 $\lambda_1^{-1}, \dots, \lambda_n^{-1}$。对 Y 型，由定义 2.4 得到的是 H^{-1} 在同一全空间上的特征值，因此直接作为步长时仍得到同一个集合。于是

$$g_{p+n} = \prod_{j=1}^{n}\Big(I - \frac{1}{\lambda_j}H\Big)g_p = \frac{(-1)^n}{\prod_j \lambda_j}\,\pi(H)g_p = 0,$$

其中最后一步用到 $\pi(H) = 0$。

若 $p > n$，固定的 $p \times p$ 小矩阵公式本身会因历史束秩至多为 n 而退化。因此此时需要先压缩到实际秩 n，或等价地直接在活跃 Krylov 子空间上取 Ritz 值。压缩后得到的有效特征值仍是 $\lambda_1, \dots, \lambda_n$，后续消去多项式与上面相同，故有限终止步数不超过 $p + n$。 □

定理 3.5 表明：有限终止本质上来自“前 p 步识别出有效 Krylov 子空间，后 n 步用全部活跃特征值构造消去多项式”。

4 LMSD 与 harmonic-LMSD 在正则块状态下的全局收敛

本节进入本文的核心。根据引理 3.2，严格凸二次模型中的块状态自然分成两个分支：若当前梯度中剩余的互异活跃特征值个数不超过 p，秩自适应 sweep 会有限终止；若该个数大于 p，则当前 Krylov 历史矩阵满列秩，固定长度的 p 个 Ritz 步长良好定义。因此，真正需要渐进收敛分析的只有非有限终止的正则区域。

对 $u \in \mathbb{R}^n$，记

$$\mathcal{A}(u) := \{i : \ u^{(i)} \neq 0\}, \qquad s(u) := |\mathcal{A}(u)|,$$

并定义非终止正则区域

$$\mathcal{R}_p := \{u \in \mathbb{R}^n : \ s(u) > p\}.$$

注意 $s(u) = p$ 时 $K_p(H, u)$ 仍然满列秩，但此时 Krylov 子空间已经等于剩余活跃不变子空间，由定理 3.5，下一次完整 Ritz-sweep 会直接消去所有剩余分量。因此本文把 $s(u) = p$ 视为有限终止边界，而不归入需要渐进分析的正则区域。

定义 4.1 (正则块状态)**.** 对给定的 S 型或 Y 型方法，若某条非零块轨道的每个块起点梯度都满足

$$g_{k,0} \in \mathcal{R}_p,$$

则称该轨道处于正则块状态。等价地，在这条非终止轨道上，每个完整块都生成按重数计的 p 个 Ritz 步长，并且不会进入有限终止边界。

由定理 3.5，我们可以直接得到如下定理。

定理 4.2 (正则区域外的有限终止)**.** 设 q 满足 (2.5)，并考虑精确秩自适应的 S 型或 Y 型块步长。若某个块起点 $g_{k,0}$ 满足

$$m := s(g_{k,0}) \leq p,$$

则从该块起点出发，算法在至多 m 个有效 Ritz 步长后达到 $g = 0$。因此，任何非有限终止的精确秩自适应轨道必然在每个非零块起点满足 $s(g_{k,0}) > p$，即处于定义 4.1 的正则区域。

注 4.3. 定理 4.2 说明，在精确严格凸二次模型和同一块内连续历史的设定下，不存在“真实 Krylov 维数降到小于等于 p 但算法仍需继续做渐进收敛分析”的第三种情形。真正的秩降等价于剩余互异活跃谱已经不超过 p，而这正是有限终止分支。

4.1 相关引理

我们先给出两个辅助引理。第一个引理是 Fletcher [4] 附录中证明 LMSD 收敛性结论时用到的一个引理，我们也将其作为后续证明的工具。第二个引理是乘子权重引理，它是将后续对于 LMSD 及 harmonic-LMSD 收敛性质推广到一般情形的关键。事实上，后续证明某种程度上可以看做 Raydan [2] 证明 BB 步长在严格凸二次问题上的全局收敛方法的高维推广。

引理 4.4 (Fletcher [4] 附录中的引理)**.** 设 $\{a_k\}_{k\geq 0}$ 为一列非负实数，并且存在常数 $M \geq 1$ 使

$$a_{k+2} \leq M a_{k+1}, \qquad k \geq 0.$$

若对任意 $\varepsilon > 0$ 都存在常数 $c_\varepsilon \in (0,1)$ 与正整数 k_ε，使得对一切 $k \geq k_\varepsilon$ 均有

$$a_k \geq \varepsilon \Longrightarrow a_{k+2} \leq c_\varepsilon a_{k+1},$$

则 $a_k \to 0$。

证明. 任取 $\varepsilon > 0$。我们首先证明：存在 $N \geq k_\varepsilon$，使得 $a_N < \varepsilon$。若不然，则对一切 $k \geq k_\varepsilon$ 均有 $a_k \geq \varepsilon$。于是由题设条件可知，对于所有 $k \geq k_\varepsilon$，都有 $a_{k+2} \leq c_\varepsilon a_{k+1}$。通过递推可得，对于任意 $j \in \mathbb{N}$，有

$$a_{k_\varepsilon+j+1} \leq c_\varepsilon^j a_{k_\varepsilon+1}.$$

由于 $0 < c_\varepsilon < 1$，当 $j \to \infty$ 时 $c_\varepsilon^j \to 0$，故存在 j_0 使得 $a_{k_\varepsilon+j_0+1} < \varepsilon$，这与假设矛盾。因此，集合 $\{n \geq k_\varepsilon \mid a_n < \varepsilon\}$ 是非空的。令 $N_1 = \min\{n \geq k_\varepsilon \mid a_n < \varepsilon\}$。

接下来，我们利用数学归纳法证明：对于所有 $n \geq N_1$，均有 $a_n < M^2\varepsilon$。当 $n = N_1$ 时，$a_{N_1} < \varepsilon < M^2\varepsilon$，命题成立。当 $n = N_1 + 1$ 时，由全局性质 $a_{k+2} \leq Ma_{k+1}$（取 $k = N_1 - 1$）得

$$a_{N_1+1} \leq Ma_{N_1} < M\varepsilon \leq M^2\varepsilon.$$

假设对于 $N_1 \leq n \leq m$（其中 $m \geq N_1 + 1$），命题 $a_n < M^2\varepsilon$ 均成立。现在考虑 a_{m+1}。考察 a_{m-1} 的取值：

(i) 若 $a_{m-1} < \varepsilon$，则由全局递推性质：

$$a_{m+1} \leq Ma_m \leq M(Ma_{m-1}) = M^2 a_{m-1} < M^2\varepsilon.$$

(ii) 若 $a_{m-1} \geq \varepsilon$，由于 $m - 1 \geq N_1 \geq k_\varepsilon$，满足触发条件，故：

$$a_{m+1} \leq c_\varepsilon a_m.$$

由归纳假设 $a_m < M^2\varepsilon$ 且 $c_\varepsilon < 1$，得 $a_{m+1} < c_\varepsilon M^2\varepsilon < M^2\varepsilon$。

综上所述，对所有 $n \geq N_1$，恒有 $a_n < M^2\varepsilon$。由于 M 是与 ε 无关的常数，根据极限的定义知 $\lim_{k\to\infty} a_k = 0$。 □

引理 4.5 (乘子权重引理)**.** 设 $r \in \{2, \ldots, n\}$，$\mathcal{I}_p$ 为所有 p 元指标集。若某一块方法存在乘子多项式 χ_k，使得

$$g_{k+2,0}^{(i)} = \chi_k(\lambda_i)\, g_{k+1,0}^{(i)}, \qquad i = 1, \ldots, n,$$

并且对 λ_r 有表示

$$\chi_k(\lambda_r) = \frac{\sum_{I\in\mathcal{I}_p} \beta_I^{(k)} \phi_I^{(r)}}{\sum_{I\in\mathcal{I}_p} \beta_I^{(k)}}, \qquad \beta_I^{(k)} \geq 0, \quad \sum_{I\in\mathcal{I}_p} \beta_I^{(k)} > 0$$

（最后一式保证该加权平均有意义）。设 $\mathcal{I}_p = A_r \cup B_r \cup C_r$ 为不交并，满足：

(i) 若 $I \in A_r$，则 $\phi_I^{(r)} = 0$；

(ii) 若 $I \in B_r$，则 $0 \leq \phi_I^{(r)} \leq \rho_r < 1$；

(iii) 对每个 $I \in C_r$，存在 $i(I) < r$，$J(I) \in A_r$ 和与 k 无关的常数 $c_I > 0$，使

$$\frac{\beta_I^{(k)}}{\beta_{J(I)}^{(k)}} = c_I \frac{(g_{k,0}^{(i(I))})^2}{(g_{k,0}^{(r)})^2}.$$

若 $g_{k,0}^{(1)} \to 0$，…，$g_{k,0}^{(r-1)} \to 0$，且对某个 $\varepsilon > 0$，集合 $S_\varepsilon := \{k \geq 1 : |g_{k,0}^{(r)}| \geq \varepsilon\}$ 是无限的，则

$$\limsup_{k\in S_\varepsilon} |\chi_k(\lambda_r)| \leq \rho_r < 1.$$

证明. 按三类分组：

$$|\chi_k(\lambda_r)| \le \frac{\sum_{I\in B_r}\beta_I^{(k)}\phi_I^{(r)}}{\sum_{I\in\mathcal{I}_p}\beta_I^{(k)}} + \frac{\sum_{I\in C_r}\beta_I^{(k)}|\phi_I^{(r)}|}{\sum_{I\in\mathcal{I}_p}\beta_I^{(k)}}.$$

由 (ii) 第一项不超过 ρ_r。再记 $M_r := \max_{I\in C_r}|\phi_I^{(r)}| < \infty$，便有

$$|\chi_k(\lambda_r)| \le \rho_r + M_r\,\frac{\sum_{I\in C_r}\beta_I^{(k)}}{\sum_{I\in\mathcal{I}_p}\beta_I^{(k)}}.$$

对每个 $I\in C_r$，由 $J(I)\in A_r$ 与 $|g_{k,0}^{(r)}|\ge\varepsilon$ 有

$$\frac{\beta_I^{(k)}}{\sum_{J\in\mathcal{I}_p}\beta_J^{(k)}} \le \frac{\beta_I^{(k)}}{\beta_{J(I)}^{(k)}} = c_I\,\frac{(g_{k,0}^{(i(I))})^2}{(g_{k,0}^{(r)})^2} \le c_I\,\frac{(g_{k,0}^{(i(I))})^2}{\varepsilon^2}.$$

由于 $i(I)<r$ 且前 $r-1$ 个分量已收敛到零，故右端随 $k\in S_\varepsilon$ 趋于零。对有限个 I 求和即得结论。 □

注 4.6 (Fletcher [4] 附录论证在维数下降情形下的局限性)**.** Fletcher [4] 附录中 LMSD 收敛性论证的关键困难在于：若试图从极限向量的谱支撑直接推出“所有单独的 Ritz 值最终都远离某些特征值”，这一步在 Krylov 维数下降时需要额外说明，并且不能按原表述直接成立。一个简单反例如下：取 $H=\mathrm{diag}(1,2)$、$p=2$，并取

$$q_n = \frac{(1/n,\,1)^T}{\sqrt{1+(1/n)^2}} \to e_2.$$

对每个 n，都有 $\mathrm{span}\{q_n, Hq_n\} = \mathbb{R}^2$，因此由该二维 Krylov 空间得到的两个 Ritz 值始终等于 $\{1,2\}$，它们不会随着 $q_n\to e_2$ 而一起落入子区间 $(\frac{4}{3},2)$ 之内。这说明在极限点发生 Krylov 维数下降时，单个 Ritz 值的渐进性态不是一个可靠的分析对象。本文下面的证明改为直接控制一个完整块作用在第 i 个特征分量上的乘子多项式

$$\psi_k(\lambda_i) = \prod_{\ell=0}^{p-1}\Big(1-\frac{\lambda_i}{\theta_{k,\ell}}\Big),$$

从而绕开了这一障碍。

4.2 S 型方法的全局收敛

定理 4.7 (S 型方法（LMSD）的全局收敛)**.** 设 q 由 (2.5) 给出，并考虑精确秩自适应的 S 型步长。则从任意初始块状态出发，相应块轨道要么有限步终止于原点，要么满足 $E_k\to 0$。特别地，在定义 4.1 的正则非终止分支上，固定长度的 LMSD Ritz-sweep 全局收敛。

证明. 若轨道在某个块起点满足 $s(g_{k,0})\le p$，则由定理 4.2 有限终止。故只需考虑非有限终止情形。此时每个非零块起点都满足 $s(g_{k,0})>p$。若某个活跃分量在有限块后变为零，则由二次递推它此后将永久保持为零，删去这些分量等价于把问题压缩到更小的活跃不变子空间。这样的删减至多发生有限次；若删减后剩余活跃特征值个数不超过 p，仍由定理 4.2 有限终止。因而在一条非有限终止尾轨道上，可重新编号并不失一般性地假设所有剩余活跃分量始终非零且其个数 $n>p$。

记 $g_k := g_{k,0}$，先证 $g_k\to 0$。定义 Krylov 矩阵 $K_k=[g_{k,0}, Hg_{k,0},\dots,H^{p-1}g_{k,0}]$。由命题 3.1，$\mathrm{span}(S_k)=\mathrm{span}(K_k)=\mathcal{K}_p(H,g_k)$。因此 S 型步长所用的 Ritz 值 $\theta_{k,0},\dots,\theta_{k,p-1}$ 正是 H 在 $\mathcal{K}_p(H,g_k)$ 上的标准 Ritz 值。它们都属于 H 的谱区间，故

$$\lambda_1 \le \theta_{k,\ell} \le \lambda_n, \qquad \ell=0,\dots,p-1. \tag{4.1}$$

设

$$\psi_k(t) := \prod_{\ell=0}^{p-1}\Big(1 - \frac{t}{\theta_{k,\ell}}\Big).$$

块 k 生成的这组 Ritz 值会在块 $k+1$ 中依次使用，因此

$$g_{k+2,0} = \psi_k(H) g_{k+1,0}, \qquad g^{(i)}_{k+2,0} = \psi_k(\lambda_i)\, g^{(i)}_{k+1,0}. \tag{4.2}$$

由 (4.1)，对任意 ℓ 有 $0 \le 1 - \lambda_1/\theta_{k,\ell} \le 1 - \lambda_1/\lambda_n < 1$，于是

$$|g^{(1)}_{k+2,0}| = |\psi_k(\lambda_1)|\,|g^{(1)}_{k+1,0}| \le \Big(1 - \frac{\lambda_1}{\lambda_n}\Big)^p |g^{(1)}_{k+1,0}|,$$

故 $g^{(1)}_{k,0} \to 0$。

若所有分量都趋零则定理已证。否则设 $r > 1$ 为满足 $g^{(j)}_{k,0} \to 0$（$j < r$）但 $g^{(r)}_{k,0} \not\to 0$ 的最小指标。则存在 $\bar\varepsilon > 0$，使对每个 $0 < \varepsilon \le \bar\varepsilon$ 集合

$$S_\varepsilon := \{k \ge 1 :\ |g^{(r)}_{k,0}| \ge \varepsilon\}$$

都是无限的。以下先固定 $0 < \varepsilon \le \bar\varepsilon$，并简记 $S := S_\varepsilon$。即先在非平凡的无限子列上建立收缩估计，最后再统一处理任意 $\varepsilon > 0$。

为处理无限情形，将 $\psi_k(\lambda_r)$ 写成行列式比。$\{\theta_{k,\ell}\}$ 是广义特征值问题 $(K_k^T H K_k)v = \theta(K_k^T K_k)v$ 的根。由严格凸二次性 $K_k^T H K_k \succ 0$，从而

$$\det(K_k^T H K_k - \lambda K_k^T K_k) = \det(K_k^T H K_k) \prod_{\ell=0}^{p-1}\Big(1 - \frac{\lambda}{\theta_{k,\ell}}\Big).$$

取 $\lambda = \lambda_r$，便得到

$$\psi_k(\lambda_r) = \frac{\det\big(K_k^T (H - \lambda_r I) K_k\big)}{\det(K_k^T H K_k)}. \tag{4.3}$$

再作 Cauchy–Binet 展开。记

$$D_k := \operatorname{diag}(g^{(1)}_{k,0}, \dots, g^{(n)}_{k,0}), \qquad V \in \mathbb{R}^{n\times p}, \quad V_{ij} = \lambda_i^{j-1},$$

则 $K_k = D_k V$。令 $\mathcal{I}_p := \{I \subset \{1,\dots,n\} : |I| = p\}$，$V_I$ 表示 V 中行指标属于 I 的 $p \times p$ 子矩阵。由 Cauchy–Binet 公式，

$$\det(K_k^T H K_k) = \sum_{I\in\mathcal{I}_p} \det(V_I)^2 \prod_{i\in I} \lambda_i\, (g^{(i)}_{k,0})^2,$$

$$\det\big(K_k^T (H - \lambda_r I) K_k\big) = \sum_{I\in\mathcal{I}_p} \det(V_I)^2 \prod_{i\in I} (\lambda_i - \lambda_r)\, (g^{(i)}_{k,0})^2.$$

若令

$$\beta_I^{(k)} := \det(V_I)^2 \prod_{i\in I} \lambda_i\, (g^{(i)}_{k,0})^2 \ge 0, \qquad \phi_I^{(r)} := \prod_{i\in I}\Big(1 - \frac{\lambda_r}{\lambda_i}\Big),$$

则 (4.3) 化为

$$\psi_k(\lambda_r) = \frac{\sum_{I\in\mathcal{I}_p} \beta_I^{(k)} \phi_I^{(r)}}{\sum_{I\in\mathcal{I}_p} \beta_I^{(k)}}. \tag{4.4}$$

下面应用乘子权重引理。将 $\mathcal{I}_p$ 分成三类：

$$A_r := \{I \in \mathcal{I}_p :\ r \in I\},$$
$$B_r := \{I \in \mathcal{I}_p :\ I \subset \{r+1,\dots,n\}\},$$
$$C_r := \{I \in \mathcal{I}_p :\ r \notin I,\ I \cap \{1,\dots,r-1\} \ne \emptyset\}.$$

对 $I \in A_r$，$\phi_I^{(r)} = 0$；对 $I \in B_r$，每个因子都落在 $(0,1)$ 内，故

$$0 \le \phi_I^{(r)} \le \left(1 - \frac{\lambda_r}{\lambda_n}\right)^p =: \rho_r < 1.$$

对 $I \in C_r$，从 $I \cap \{1,\dots,r-1\}$ 中任选一个指标 $i(I)$，并令 $J(I) := (I \setminus \{i(I)\}) \cup \{r\} \in A_r$。由活跃特征值互异，相关 Vandermonde 子式都非零，故存在与 k 无关的常数 $c_I > 0$ 使

$$\frac{\beta_I^{(k)}}{\beta_{J(I)}^{(k)}} = \frac{\det(V_I)^2}{\det(V_{J(I)})^2} \cdot \frac{\lambda_{i(I)}}{\lambda_r} \cdot \frac{(g_{k,0}^{(i(I))})^2}{(g_{k,0}^{(r)})^2} = c_I \frac{(g_{k,0}^{(i(I))})^2}{(g_{k,0}^{(r)})^2}.$$

于是 $\psi_k(\lambda_r)$ 满足引理 4.5 的全部假设，从而

$$\limsup_{k \in S} |\psi_k(\lambda_r)| \le \rho_r < 1.$$

任选 $c_r(\varepsilon) \in (\rho_r, 1)$，便存在 k_ε，使对所有 $k \in S$ 且 $k \ge k_\varepsilon$ 都有

$$|g_{k+2,0}^{(r)}| \le c_r(\varepsilon) |g_{k+1,0}^{(r)}|. \tag{4.5}$$

以上固定的是某个 $\varepsilon \in (0, \bar{\varepsilon}]$。事实上，对任意 $\varepsilon > 0$ 都可同样处理：若 S_ε 无限，则 (4.3)–(4.4) 的行列式比与 Cauchy–Binet 推导逐字适用（其中只用到 S_ε 无限以及 $g_{k,0}^{(j)} \to 0$（$j < r$）），从而同样得到 (4.5) 形式的收缩；若 S_ε 有限，则 k 充分大时 $|g_{k,0}^{(r)}| \ge \varepsilon$ 不成立，收缩蕴含式平凡为真。因此引理 4.4 所需的收缩蕴含式对一切 $\varepsilon > 0$ 都成立。另一方面，由 (4.1)，对任意 $\theta \in [\lambda_1, \lambda_n]$ 有

$$\left|1 - \frac{\lambda_r}{\theta}\right| \le \max\left\{\frac{\lambda_n}{\lambda_1} - 1,\ 1 - \frac{\lambda_1}{\lambda_n}\right\}.$$

故存在常数 $C_r^* := \max\left\{1, \left(\lambda_n/\lambda_1 - 1\right)^p\right\} \ge 1$，使

$$|g_{k+2,0}^{(r)}| \le C_r^* |g_{k+1,0}^{(r)}|, \qquad \forall k. \tag{4.6}$$

令 $a_k := |g_{k,0}^{(r)}|$。(4.6) 给出与 ε 无关的全局界 $a_{k+2} \le C_r^* a_{k+1}$，而上一段已说明 (4.5) 形式的收缩蕴含式对每个 $\varepsilon > 0$ 都成立。于是引理 4.4 的两个条件均满足，从而 $a_k \to 0$，即 $g_{k,0}^{(r)} \to 0$，与 r 的最小性矛盾。故 $g_{k,0} \to 0$。

最后，由 (4.1) 与块内递推 $g_{k,j+1} = (I - \alpha_{k,j} H) g_{k,j}$，每一步的放大因子一致有界，于是对任意固定 $r = 0, \dots, p$ 都有 $\|g_{k,r}\| \le C \|g_{k,0}\|$，从而 $g_{k,r} \to 0$。再由 $g_{k,r} = H x_{k,r}$ 与 $H \succ 0$，得 $x_{k,r} \to 0$，于是 $E_k \to 0$。 □

4.3 Y 型方法的全局收敛

定理 4.8 (Y 型方法（harmonic-LMSD）的全局收敛)**.** 设 q 由 (2.5) 给出，并考虑精确秩自适应的 Y 型步长。则从任意初始块状态出发，相应块轨道要么有限步终止于原点，要么满足 $E_k \to 0$。特别地，在正则非终止分支上，固定长度的 harmonic-LMSD Ritz-sweep 全局收敛。

证明. 由定理 4.2，非正则分支有限终止。故在非有限终止情形中，与 S 型证明开头相同，可以删去已经永久为零的分量并重新编号，使得所有剩余活跃分量始终非零且活跃特征值个数 $n > p$。

仍记 $g_k := g_{k,0}$，先证 $g_k \to 0$。令 $K_k = [g_k, H g_k, \dots, H^{p-1} g_k]$，$Z_k := H K_k$。由命题 3.1，$\operatorname{span}(Y_k) = \operatorname{span}(Z_k) = H\mathcal{K}_p(H, g_k)$。因此按定义 2.4 得到的步长 $\tau_{k,r}$ 是广义特征值问题 $Z_k^T H^{-1} Z_k\, w = \tau Z_k^T Z_k\, w$ 的特征值，由 $Z_k = H K_k$ 等价于

$$K_k^T H K_k\, w = \tau\, K_k^T H^2 K_k\, w.$$

它们直接被用作下一块步长 $\alpha_{k+1,r}=\tau_{k,r}$。设 $\varphi_k(t):=\prod_{r=0}^{p-1}(1-\tau_{k,r}t)$，则

$$g_{k+2,0}=\varphi_k(H)g_{k+1,0},\qquad g_{k+2,0}^{(i)}=\varphi_k(\lambda_i)\,g_{k+1,0}^{(i)}. \tag{4.7}$$

由 $\tau_{k,r}\in[1/\lambda_n,1/\lambda_1]$，有

$$|\varphi_k(\lambda_1)|\le\Big(1-\frac{\lambda_1}{\lambda_n}\Big)^p<1,$$

故 $g_{k,0}^{(1)}\to 0$。

设 $r>1$ 是满足 $g_{k,0}^{(j)}\to 0$（$j<r$）但 $g_{k,0}^{(r)}\not\to 0$ 的最小指标，仍记 $S=S_\varepsilon$。

下面把 $\varphi_k(\lambda_r)$ 写成行列式比。设 $A_k:=K_k^THK_k$、$B_k:=K_k^TH^2K_k$。由 $\tau_{k,j}$ 是 $A_kw=\tau B_kw$ 的全部根，故

$$\det(B_k-\lambda A_k)=\det(B_k)\prod_{j=0}^{p-1}(1-\lambda\tau_{k,j}).$$

取 $\lambda=\lambda_r$ 得

$$\varphi_k(\lambda_r)=\frac{\det\big(K_k^T(H^2-\lambda_rH)K_k\big)}{\det(K_k^TH^2K_k)}. \tag{4.8}$$

再作 Cauchy–Binet 展开。仍写 $K_k=D_kV$。则

$$\det(K_k^TH^2K_k)=\sum_{I\in\mathcal{I}_p}\det(V_I)^2\prod_{i\in I}\lambda_i^2\,(g_{k,0}^{(i)})^2,$$

$$\det\big(K_k^T(H^2-\lambda_rH)K_k\big)=\sum_{I\in\mathcal{I}_p}\det(V_I)^2\prod_{i\in I}\lambda_i(\lambda_i-\lambda_r)\,(g_{k,0}^{(i)})^2.$$

定义 $\widetilde{\beta}_I^{(k)}:=\det(V_I)^2\prod_{i\in I}\lambda_i^2(g_{k,0}^{(i)})^2\ge 0$，$\phi_I^{(r)}:=\prod_{i\in I}(1-\lambda_r/\lambda_i)$，便有

$$\varphi_k(\lambda_r)=\frac{\sum_{I\in\mathcal{I}_p}\widetilde{\beta}_I^{(k)}\phi_I^{(r)}}{\sum_{I\in\mathcal{I}_p}\widetilde{\beta}_I^{(k)}}. \tag{4.9}$$

把 $\mathcal{I}_p$ 同样分成 A_r、B_r、C_r 三类。对 $I\in C_r$，取 $i(I)<r$、$J(I)\in A_r$，存在 $\widetilde{c}_I>0$ 使

$$\frac{\widetilde{\beta}_I^{(k)}}{\widetilde{\beta}_{J(I)}^{(k)}}=\widetilde{c}_I\,\frac{(g_{k,0}^{(i(I))})^2}{(g_{k,0}^{(r)})^2}.$$

于是 $\varphi_k(\lambda_r)$ 满足引理 4.5 的假设，从而

$$\limsup_{k\in S_\varepsilon}|\varphi_k(\lambda_r)|\le\Big(1-\frac{\lambda_r}{\lambda_n}\Big)^p<1.$$

另一方面，由 $\tau_{k,j}\in[1/\lambda_n,1/\lambda_1]$ 可得存在常数 $M_r\ge 1$，使

$$|g_{k+2,0}^{(r)}|\le M_r|g_{k+1,0}^{(r)}|,\qquad k\ge 0.$$

结合这个全局界以及上一段对 S_ε 无限情形的估计，便得到引理 4.4 所需的收缩蕴含式：当 S_ε 无限时由乘子权重引理给出严格收缩，当 S_ε 有限时该蕴含式最终平凡成立。因此该条件对一切 $\varepsilon>0$ 成立。由引理 4.4 得 $g_{k,0}^{(r)}\to 0$，与 r 的最小性矛盾。故 $g_{k,0}\to 0$。

最后由块内每步乘子一致有界、$H\succ 0$ 固定，即得 $E_k\to 0$。 □

5 一般加权步长的推广

通过上一节的证明过程，可以发现真正起作用的代数结构有以下两点：

- 块乘子多项式 ψ_k（或 φ_k）在每个 λ_r 处都可以写成两个对称行列式之比；
- 在 Cauchy–Binet 展开后，$\psi_k(\lambda_r)$ 化为一组以 $\beta_I^{(k)} \geq 0$ 为权重、以 $\phi_I^{(r)}$ 为函数值的加权平均，并且该权重的相对比可以由初始梯度分量的平方之比表示。

对于“取 $\theta_{k,r}^{-1}$ 作步长”这一点，证明里只用到了如下两个事实：步长属于谱区间 $[1/\lambda_n, 1/\lambda_1]$，并且整块乘子可以用对称二次型行列式比表达。这就提示我们：把 S 型步长里出现的“分母矩阵 $K_k^T K_k$”（对应权重为 1）替换为某种正定权重矩阵 $K_k^T \omega(H) K_k$，便能得到一类更一般的“ω-加权 LMSD”步长，同一证明框架完全适用。下文便把这一拓展形式化地写出来。

5.1 ω-加权 Ritz 值与广义 LMSD 步长

固定一个连续函数 $\omega : [\lambda_1, \lambda_n] \to (0, \infty)$。在严格凸二次模型 (2.5) 下，把“$H$ 在 $\mathcal{K}_p(H, g_{k,0})$ 上的标准 Ritz 值”替换为下面的 ω-加权 Ritz 值：考虑广义特征值问题

$$\big(K_k^T \omega(H) H K_k\big) v = \theta \, \big(K_k^T \omega(H) K_k\big) v. \tag{5.1}$$

由于 $\omega(H) \succ 0$，分母矩阵 $K_k^T \omega(H) K_k$ 在 K_k 满列秩时正定可逆，于是正则情形下 (5.1) 给出按重数计的 p 个实正特征值，非满秩时则先压缩到实际 Krylov 子空间。

引理 5.1. (5.1) 的特征值 $\theta_{k,0}^{\omega}, \dots, \theta_{k,p-1}^{\omega}$ 都属于 H 的谱区间，即 $\theta_{k,r}^{\omega} \in [\lambda_1, \lambda_n]$。

证明. 对任意非零 v，

$$\frac{v^T K_k^T \omega(H) H K_k v}{v^T K_k^T \omega(H) K_k v} = \frac{(K_k v)^T \omega(H) H (K_k v)}{(K_k v)^T \omega(H) (K_k v)} = \frac{\sum_i \omega(\lambda_i) \lambda_i \, u_i^2}{\sum_i \omega(\lambda_i) \, u_i^2},$$

其中 $u = K_k v$、u_i 为其第 i 个分量。这是一个以 $\omega(\lambda_i) u_i^2 \geq 0$ 为权重的 λ_i 加权平均，故落在 $[\lambda_1, \lambda_n]$ 内。再由 Courant–Fischer 极小极大定理，所有广义特征值都属于该区间。 □

定义 5.2 (ω-加权 LMSD 步长)**.** 固定 $\omega : [\lambda_1, \lambda_n] \to (0, \infty)$ 连续。令 $d_k := \dim \mathcal{K}_p(H, g_k) \leq p$。秩自适应解释下，对当前块由实际历史子空间 $\mathcal{K}_p(H, g_k)$ 经 (5.1) 提取出的 d_k 个加权 Ritz 值 $\theta_{k,r}^{\omega}$，下一有效 sweep 依次使用步长

$$\alpha_{k+1,r}^{\omega} = \big(\theta_{k,r}^{\omega}\big)^{-1}, \qquad r = 0, \dots, d_k - 1.$$

在正则非终止情形中 $d_k = p$，于是得到固定长度的 p 步 ω-加权 Ritz-sweep。

注意到 $\omega \equiv 1$ 时 $\theta_{k,r}^{\omega} = \theta_{k,r}$，定义 5.2 退化为标准 LMSD（定义 2.3）。而取 $\omega(t) = t$ 则会把分母矩阵换成 $K_k^T H K_k$，分子为 $K_k^T H^2 K_k$，相应的 $\theta_{k,r}^{\omega}$ 正是定义 2.4 中 harmonic-LMSD 步长 $\tau_{k,r}$ 的倒数（此时 $\alpha_{k+1,r}^{\omega} = 1/\theta_{k,r}^{\omega} = \tau_{k,r}$）。因此该框架同时把 S 型与 Y 型纳入一个连续族，并允许在它们之间插值。

上面给出的是步长生成规则。算法 1 则给出固定权重 ω 下对应的完整优化算法：它先用 Cauchy 步长预热以填满历史窗口，随后逐块求解小型对称正定广义特征值问题 (5.1)，取加权 Ritz 值的倒数作为该块的步长，并在每个块结束后滑动历史窗口，当历史子空间降秩时则自动改用该子空间上的有效 Ritz 值（秩自适应）。

Algorithm 1: 固定权重 ω 的 ω-加权 LMSD 方法

Input:

严格凸二次 $q(x)=\frac{1}{2}x^THx$（$H\succ 0$）；初值 x_0；块长 p；连续正权重 $\omega:[\lambda_1,\lambda_n]\to(0,\infty)$；容许误差 $\mathrm{tol}>0$.

Output:

近似解 x，满足 $\|\nabla q(x)\|\le \mathrm{tol}$。$x\leftarrow x_0$， $g\leftarrow Hx$；历史梯度束 $G\leftarrow[\,]$;

for $j=1$ **to** p **do**

  // Cauchy step preheating to fill history window

  $\alpha\leftarrow\dfrac{g^Tg}{g^THg}$;

  将 g 并入 G;

  $x\leftarrow x-\alpha g$;

  $g\leftarrow Hx$;

end

while $\|g\|>\mathrm{tol}$ **do**

  $d\leftarrow\mathrm{rank}(G)$；取列正交 $Q\in\mathbb{R}^{n\times d}$ 使 $\mathrm{span}(Q)=\mathrm{span}(G)$。; // $d\le p$，秩自适应

  $A\leftarrow Q^T\omega(H)HQ$， $B\leftarrow Q^T\omega(H)Q$;

  求解 d 维对称正定广义特征值问题 $Av=\theta Bv$，得加权 Ritz 值 $\theta_0,\dots,\theta_{d-1}\in[\lambda_1,\lambda_n]$;

  置步长队列 $\alpha_r\leftarrow\theta_r^{-1}$， $r=0,\dots,d-1$;

  for $r=0$ **to** $d-1$ **do**

    if $\|g\|\le\mathrm{tol}$ **then**

      return x;

    end

    $x\leftarrow x-\alpha_r g$； $g\leftarrow Hx$；用 g 刷新 G（移除最旧列、并入 g）;

  end

end

return x;

无论取何种连续正权重 ω，由定理 5.3 知该算法在严格凸二次问题上都具有“有限终止或全局收敛”的二分性质。

5.2 统一的全局收敛定理

定理 5.3 (ω-加权 LMSD 的全局收敛)**.** 设 q 由 (2.5) 给出，$\omega:[\lambda_1,\lambda_n]\to(0,\infty)$ 连续。考虑精确秩自适应的 ω-加权 LMSD 步长。则从任意初始块状态出发，相应块轨道要么有限步终止于原点，要么满足 $E_k\to 0$。

证明. 若某个块起点满足 $s(g_{k,0})\le p$，则实际 Krylov 子空间等于剩余活跃不变子空间。由于 $\omega(H)$ 在该子空间上仍为正定且与 H 对角可交换，(5.1) 的加权 Ritz 值就是剩余活跃特征值本身，因此下一短 sweep 使用它们的倒数并有限终止。故只需考虑正则非终止尾轨道，并可如定理 4.7 的证明开头那样删去永久为零的分量，假设剩余活跃分量始终非零且个数 $n>p$。

之后的过程也完全平行于定理 4.7 的证明。在这条尾轨道上，由命题 3.1 与 (5.1)，块

乘子多项式

$$\psi_k^{\omega}(t) := \prod_{\ell=0}^{p-1}\Big(1 - \frac{t}{\theta_{k,\ell}^{\omega}}\Big)$$

仍然满足 $g_{k+2,0} = \psi_k^{\omega}(H) g_{k+1,0}$。由引理 5.1，$\theta_{k,\ell}^{\omega} \in [\lambda_1, \lambda_n]$，因此对每个 ℓ 有 $0 \le 1 - \lambda_1/\theta_{k,\ell}^{\omega} \le 1 - \lambda_1/\lambda_n < 1$，故 $g_{k,0}^{(1)} \to 0$。

设 $r > 1$ 为满足 $g_{k,0}^{(j)} \to 0$（$j < r$）但 $g_{k,0}^{(r)} \not\to 0$ 的最小指标。对任意 $\varepsilon > 0$，仍令

$$S_{\varepsilon} := \{k \ge 1 : \ |g_{k,0}^{(r)}| \ge \varepsilon\}.$$

下面先在 S_{ε} 为无限集时估计块乘子。由广义特征值的代数关系，

$$\det\big(K_k^T \omega(H) H K_k - \lambda K_k^T \omega(H) K_k\big) = \det\big(K_k^T \omega(H) H K_k\big) \prod_{\ell=0}^{p-1}\Big(1 - \frac{\lambda}{\theta_{k,\ell}^{\omega}}\Big).$$

取 $\lambda = \lambda_r$ 得

$$\psi_k^{\omega}(\lambda_r) = \frac{\det\big(K_k^T \omega(H)(H - \lambda_r I) K_k\big)}{\det\big(K_k^T \omega(H) H K_k\big)}. \tag{5.2}$$

仍写 $K_k = D_k V$，由 Cauchy–Binet，

$$\det\big(K_k^T \omega(H) H K_k\big) = \sum_{I \in \mathcal{I}_p} \det(V_I)^2 \prod_{i \in I} \omega(\lambda_i)\lambda_i \, (g_{k,0}^{(i)})^2,$$

$$\det\big(K_k^T \omega(H)(H - \lambda_r I) K_k\big) = \sum_{I \in \mathcal{I}_p} \det(V_I)^2 \prod_{i \in I} \omega(\lambda_i)(\lambda_i - \lambda_r) \, (g_{k,0}^{(i)})^2.$$

定义

$$\beta_I^{(k,\omega)} := \det(V_I)^2 \prod_{i \in I} \omega(\lambda_i)\lambda_i \, (g_{k,0}^{(i)})^2 \ge 0, \qquad \phi_I^{(r)} := \prod_{i \in I}\Big(1 - \frac{\lambda_r}{\lambda_i}\Big),$$

则

$$\psi_k^{\omega}(\lambda_r) = \frac{\sum_{I \in \mathcal{I}_p} \beta_I^{(k,\omega)} \phi_I^{(r)}}{\sum_{I \in \mathcal{I}_p} \beta_I^{(k,\omega)}}.$$

仍将 $\mathcal{I}_p$ 分成定理 4.7 中的三类 A_r、B_r、C_r。注意 $\omega(\lambda_i)$ 是与 k 无关的正常数，故对每个 $I \in C_r$ 仍有

$$\frac{\beta_I^{(k,\omega)}}{\beta_{J(I)}^{(k,\omega)}} = \frac{\det(V_I)^2}{\det(V_{J(I)})^2} \cdot \frac{\omega(\lambda_{i(I)})\lambda_{i(I)}}{\omega(\lambda_r)\lambda_r} \cdot \frac{(g_{k,0}^{(i(I))})^2}{(g_{k,0}^{(r)})^2} = c_I^{\omega} \, \frac{(g_{k,0}^{(i(I))})^2}{(g_{k,0}^{(r)})^2},$$

其中 $c_I^{\omega} > 0$ 与 k 无关，因此满足引理 4.5 的假设 (iii)。再结合 $\phi_I^{(r)} \le \rho_r = (1 - \lambda_r/\lambda_n)^p < 1$ 与 $\phi_I^{(r)} = 0$（$I \in A_r$），便得到

$$\limsup_{k \in S_{\varepsilon}} |\psi_k^{\omega}(\lambda_r)| \le \rho_r < 1.$$

于是，在 S_{ε} 无限时可得到与 (4.5) 同型的严格收缩。当 S_{ε} 有限时，蕴含式在充分大的 k 后平凡成立。另一方面，由引理 5.1 知所有步长均落在 $[1/\lambda_n, 1/\lambda_1]$，故与 (4.6) 同样可得一个与 k 无关的全局放大界。由引理 4.4 推出 $g_{k,0}^{(r)} \to 0$，与 r 的最小性矛盾，故 $g_{k,0} \to 0$。再由块内每步乘子一致有界进一步得到 $E_k \to 0$。 $\square$

注 5.4. 该推广有几点值得注意：

(i) 取 $\omega \equiv 1$，定理 5.3 退化为定理 4.7（标准 LMSD）；取 $\omega(t) = t$，则退化为定理 4.8（harmonic-LMSD）。因此 S 型与 Y 型作为同一个 ω-族中的两个端点，被自然地连接起来。

(ii) 任意取 ω 为多项式或其他正函数，例如 $\omega(t)=t^k$（$k\in\mathbb{Z}$）或 $\omega(t)=\exp(at)$，都能得到一族新的固定记忆谱步长。它们在严格凸二次问题上都具有全局收敛性。

(iii) 另一个特例是 $\omega(t)=t^{-1}$（在 $[\lambda_1,\lambda_n]$ 上有界且正）：此时 $K_k^T\omega(H)K_k=K_k^TH^{-1}K_k$、$K_k^T\omega(H)HK_k=K_k^TK_k$，从而 (5.1) 写为 $K_k^TK_kv=\theta K_k^TH^{-1}K_kv$。其特征值是 H^{-1} 在 $\mathcal{K}_p(H,g_k)$ 上的（标准）Ritz 值的倒数（与 Y 型在 $H\mathcal{K}_p(H,g_k)$ 上的 Ritz 值不同），这给出又一种新的步长生成方式。

表 5.1 列出几种典型权重及其对应的小广义特征值问题。

表 5.1: ω-加权 Ritz 结构下的若干典型方法

$\omega(t)$	广义特征值问题	对应方法
1	$K^THKv=\theta K^TKv$	LMSD
t	$K^TH^2Kv=\theta K^THKv$	harmonic-LMSD 等价形式
t^{-1}	$K^TKv=\theta K^TH^{-1}Kv$	逆加权新变体
t^a	$K^TH^{a+1}Kv=\theta K^TH^aKv$	幂加权族

6 数值实验

本节给出四组小规模数值实验，以说明前文理论中的四个现象：块长覆盖全部活跃谱时的有限终止；不同 $\omega(t)=t^a$ 权重下的收敛行为；块长 p 与权重共同变化时的迭代步数；以及条件数增大后问题难度的变化。

所有实验均考虑对角严格凸二次函数

$$q(x)=\frac{1}{2}x^THx,\qquad H=\operatorname{diag}(\lambda_1,\dots,\lambda_n),$$

并采用第 5 节的 $\omega(t)=t^a$ 加权 Ritz 步长。前 p 步使用 Cauchy 步长预热，此后按块生成 Ritz-sweep。若活跃维数不超过 p，程序采用精确秩压缩机制，即只在实际活跃子空间上取 Ritz 值。为便于复现，初始梯度均由确定性公式

$$g_0^{(i)}=\sin(0.37(i+s))+0.3\cos(1.17(i+s))+0.5\sin(0.11(i+s))+1$$

生成，其中 s 是实验中指定的偏移量。停止准则为 $\|g_k\|\le 10^{-8}$，有限终止实验中使用 10^{-12} 作为显示阈值。

6.1 有限终止现象

取 $n=8$，谱为

$$(1,1.7,2.9,5.1,9,16,28,50),$$

取偏移量 $s=3$ 生成初始梯度。表 6.1 给出 $p=n$ 与 $p>n$ 的结果。可以看到，$p=n$ 时算法在 $p+n=16$ 步内终止；$p>n$ 时若使用秩压缩，也在 $p+n$ 步内终止。这与定理 3.5 一致。

表 6.1: 有限终止性质的实验验证（$n=8$）

块长 p	权重 $\omega(t)$	实际步数	理论上界 $p+n$	最终 $\|g\|$
8	t^{-1}, 1, t	16	16	0.0
10	t^{-1}, 1, t	18	18	0.0
12	t^{-1}, 1, t	20	20	0.0

6.2 不同权重函数的收敛行为

取 $n = 30$、$p = 4$，谱按对数均匀分布在 $[1, 500]$ 内，并取偏移量 $s = 0$。表 6.2 比较了 $\omega(t) = t^a$ 的八个取值。所有权重都能达到同一精度，说明第 5 节给出的加权 Ritz 族不只是形式推广，在该实验设置下也能稳定工作。

表 6.2: $\omega(t) = t^a$ 加权 Ritz 步长的收敛步数

权重 $\omega(t)$	迭代步数	块数	最终 $\|g\|$
t^{-2}	283	70	4.69×10^{-9}
t^{-1}	241	60	4.32×10^{-9}
$t^{-1/2}$	278	69	6.89×10^{-9}
1	230	57	5.46×10^{-9}
$t^{1/2}$	280	69	5.78×10^{-9}
t	257	64	7.31×10^{-9}
t^2	260	64	9.40×10^{-9}
t^3	264	65	5.59×10^{-9}

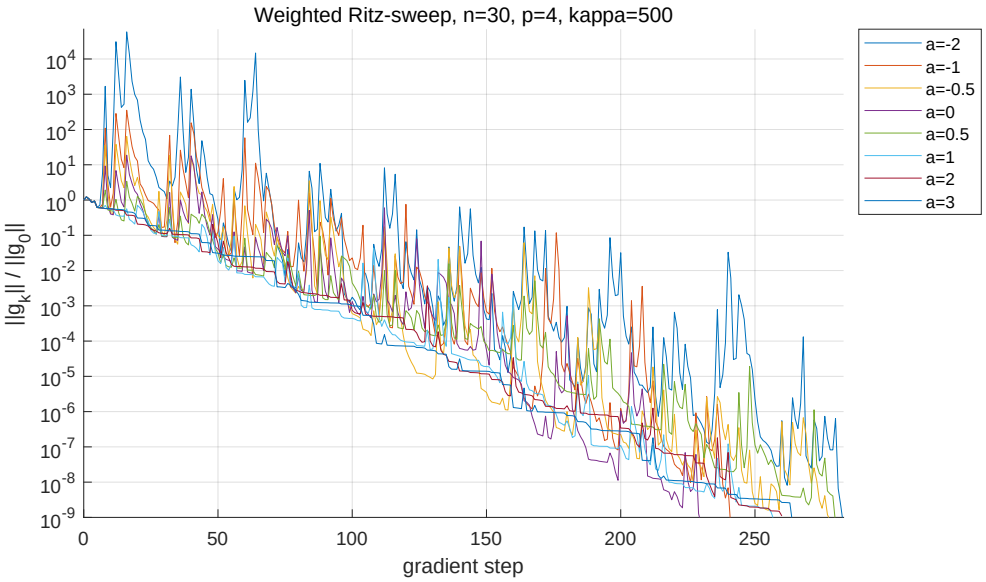


图 6.1: 不同权重 $\omega(t) = t^a$ 下的相对梯度范数下降曲线

6.3 块长与权重共同变化

进一步固定 $n = 40$，谱按对数均匀分布在 $[1, 100]$ 内，取偏移量 $s = 7$，比较 $p = 1, 2, 3, 4, 6, 8, 10$ 与 $a = -1, 0, \frac{1}{2}, 1, 2$ 的组合。表 6.3 给出达到阈值所需的迭代步数，图 6.2 展示相同数据的趋势。该测试问题中，块长增大后每个块能提取更多 Ritz 信息，达到阈值所需的迭代步数总体上有所减少（从 $p = 1$ 时的约 140 步降至 $p = 10$ 时的约 100 步），但下降幅度相对有限，且在小块长处并不严格单调。在同一块长下，权重的影响相对较温和。

表 6.3: 不同块长和不同权重下达到 $\|g\| \le 10^{-8}$ 所需的迭代步数

p	t^{-1}	1	$t^{1/2}$	t	t^2
1	147	154	139	117	142
2	149	137	153	145	126
3	120	116	121	117	116
4	123	124	111	113	120
6	112	113	106	108	104
8	100	100	100	99	107
10	96	96	103	101	103

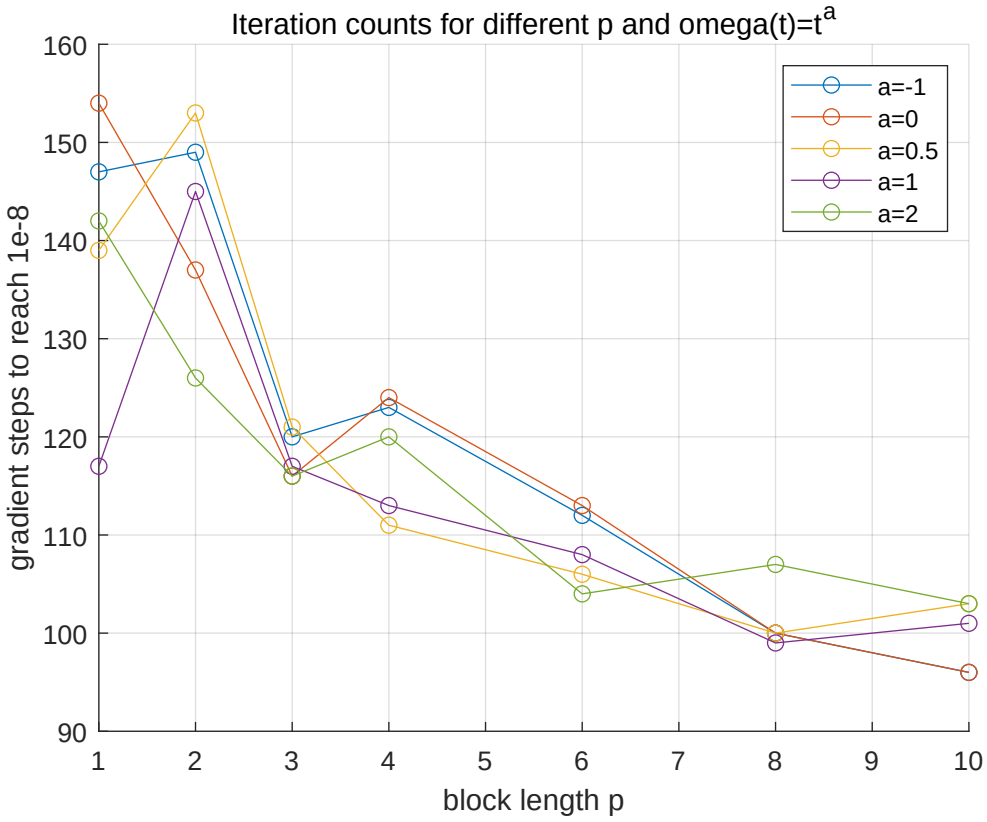


图 6.2: 表 6.3 的图示。横轴为块长 p，纵轴为达到 $\|g\| \le 10^{-8}$ 所需的迭代步数

6.4 条件数变化

最后固定 $n = 40$、$p = 4$，谱按对数均匀分布在 $[1, \kappa]$ 内，取偏移量 $s = 11$。表 6.4 给出 $\kappa = 10, 100, 1000$ 时的步数。条件数增大后，所有权重下的步数都明显上升，这与谱梯度法对谱分布敏感的经验相符。

表 6.4: 条件数变化时的迭代步数变化

κ	t^{-1}	1	t	t^2
10	35	33	34	33
100	113	116	105	112
1000	505	371	342	340

7 结语

本文的主体是 LMSD 与 harmonic-LMSD 方法在严格凸二次问题上的全局收敛证明。证明的核心在于把一整块步长作用在第 i 个谱分量上的总乘子 $\psi_k(\lambda_i)$ 写成两个对称行列式之比，再通过 Cauchy–Binet 展开化为非负权重下的加权平均，最后借助乘子权重引理逐分量地控制其极限。与 Fletcher [4] 附录中以“单个 Ritz 值的渐进位置”为分析对象的思路相比，这一改写把精确秩降作为有限终止分支单独处理，并在非终止正则区域内直接控制完整块乘子，从而绕开了接近秩降边界时单个 Ritz 值连续性失效的问题。

第 5 节的推广进一步说明：对任意连续正函数 $\omega : [\lambda_1, \lambda_n] \to (0, \infty)$ 而言，一类形式更宽的“ω-加权 LMSD”步长在同样的精确秩自适应二次模型下都享有“有限终止或全局收敛”的二分结论。S 型（标准 LMSD）与 Y 型（harmonic-LMSD）恰好对应于 $\omega \equiv 1$ 与 $\omega(t) = t$ 两个端点，因此这一框架把它们放进了同一个连续族里，并允许在两者之间自由插值。

值得指出的是，本文的证明给出一种“模板化”的分析框架范式：

$$\text{乘子可写成行列式比} \quad \Longrightarrow \quad \text{Cauchy–Binet 展开} \quad \Longrightarrow \quad \text{加权权重相对比可控.}$$

这一框架可用于分析多种由 Ritz 型乘子生成的步长规则。第 6 节的数值实验也从有限终止、权重函数变化、块长变化和条件数变化四个角度验证了这些结论的基本现象。因此，将该思路推广到更多固定记忆谱方法，可作为后续工作的一个出发点。

把“二次模型上的全局收敛”进一步提升为“全局无条件 R-线性收敛”（不再依赖 Curtis–Guo [5] 的非退化条件假设），以及把其 R-线性收敛性质传递到一般非线性问题的全局化算法中（如 GLL 非单调线搜索版本），也是很自然的推广点，这也正是笔者近期所做的主要工作。这一方向需要额外引入连续正齐次块映射的抽象工具与局部扰动控制的手段，超出了本文范围，相关讨论留待后续。

参考文献

[1] J. Barzilai and J. M. Borwein, Two-point step size gradient methods, *IMA Journal of Numerical Analysis*, 8 (1988), pp. 141–148.

[2] M. Raydan, On the Barzilai and Borwein choice of steplength for the gradient method, *IMA Journal of Numerical Analysis*, 13 (1993), pp. 321–326.

[3] Y.-H. Dai and L.-Z. Liao, R-linear convergence of the Barzilai and Borwein gradient method, *IMA Journal of Numerical Analysis*, 22 (2002), pp. 1–10.

[4] R. Fletcher, A limited memory steepest descent method, *Mathematical Programming*, 135 (2012), pp. 413–436.

[5] F. E. Curtis and W. Guo, R-linear convergence of limited memory steepest descent, *IMA Journal of Numerical Analysis*, 38 (2018), pp. 720–742.

[6] G. Ferrandi and M. E. Hochstenbach, Limited memory gradient methods for unconstrained optimization, *Numerical Algorithms*, 99 (2025), pp. 735–764.