ЖУРНАЛ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ И МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ, 1997, том 37, № 11, с. 1301–1310

УДК 519.642.8

ТОЧНЫЕ ОЦЕНКИ СКОРОСТИ СХОДИМОСТИ s-ШАГОВЫХ ИТЕРАЦИОННЫХ МЕТОДОВ ВАРИАЦИОННОГО ТИПА В ГИЛЬБЕРТОВОМ ПРОСТРАНСТВЕ

© 1997 г. Л. Н. Бондаренко, П. Ф. Жук

(Херсон, Украина)

Поступила в редакцию 26.04.96 г.
Переработанный вариант 28.08.96 г.

Получены точные оценки скорости сходимости s-шаговых итерационных методов вариационного типа решения линейных операторных уравнений в гильбертовом пространстве.

ВВЕДЕНИЕ

Пусть H – вещественное гильбертово пространство со скалярным произведением (u, v) и нормой $\|u\| = \sqrt{(u, u)}$, а $A : H \longrightarrow H$ – линейный ограниченный самосопряженный и положительно-определенный оператор с границами спектра m, M, $0 < m \le M$.

Для приближенного решения операторного уравнения

$$Au = f \qquad (1)$$

применим предложенный в [1] s-шаговый метод наискорейшего спуска, последовательные приближения которого строятся по правилу

$$u_{k+1} = u_k + \gamma_1^{(k)} w_k + \ldots + \gamma_s^{(k)} A^{s-1} w_k, \quad k = 0, 1, \ldots, \qquad (2)$$

где u_0 – произвольное начальное приближение, $w_k = Au_k - f$ – невязка, а итерационные параметры $\gamma_i^{(k)}$, $i = 1, 2, \ldots, s$, выбираются из условия минимума квадратичного функционала

$$F(u_{k+1}) = (Au_{k+1}, u_{k+1}) - 2(u_{k+1}, f).$$

В [1] доказано, что последовательность u_k сходится к точному решению u^* уравнения (1) по крайней мере со скоростью геометрической прогрессии и имеет место оценка

$$\Delta F(u_k) \le \left[\left(\frac{M-m}{M+m}\right)^s\right]^k \Delta F(u_0), \quad k = 0, 1, \ldots, \qquad (3)$$

где $\Delta F(u_k) = \sqrt{F(u_k) - F(u^*)}$. Из [2] следует, что оценка (3) при $s > 1$ может быть уточнена:

$$\Delta F(u_k) \le \left[\vartheta_s\left(\frac{M+m}{M-m}\right)\right]^{-k} \Delta F(u_0), \quad k = 0, 1, \ldots, \qquad (4)$$

где $\vartheta_s(t)$ – многочлен Чебышёва степени s:

$$\vartheta_s(t) = \cos(s \arccos t), \quad t \in [-1, 1].$$

Оценка (4) точна в следующем смысле: существуют линейный самосопряженный и положительно-определенный оператор A с границами спектра m, M и начальное приближение $u_0 \ne u^*$ такие, что

$$\Delta F(u_k) = \left[\vartheta_s\left(\frac{M+m}{M-m}\right)\right]^{-k} \Delta F(u_0), \quad k = 0, 1, \ldots$$

(это утверждение следует из работы [3, с. 96]).

Если оператор A зафиксировать и варьировать только начальное приближение, то оценка (4) может быть улучшена. Пусть $\pi_s(t) = 1 + \pi_1 t + \ldots + \pi_s t^s$ – многочлен от t степени s, наименее уклоняющийся от 0 на спектре sp(A) оператора A, а

$$\rho_s = \max_{t \in \mathrm{sp}(A)} |\pi_s(t)|$$

есть величина уклонения. Аналогично [2] получаем, что

$$\Delta F(u_k) \le \rho_s^k \Delta F(u_0), \quad k = 0, 1, \ldots. \tag{5}$$

Так как sp(A) $\subseteq [m, M]$, то

$$\rho_s \le \left[\vartheta_s\left(\frac{M+m}{M-m}\right)\right]^{-1},$$

следовательно, оценка (5) не хуже (а для некоторых операторов A лучше), чем оценка (4).

В [4] показано, что для конечномерных пространств оценка (5) является точной в следующем смысле: существует начальное приближение $\tilde{u}_0 \ne u^*$ такое, что

$$\Delta F(\tilde{u}_k) = \rho_s^k \Delta F(\tilde{u}_0), \quad k = 0, 1, \ldots.$$

Для бесконечномерных гильбертовых пространств указанный выше результат, вообще говоря, неверен: существуют операторы A, для которых

$$\Delta F(u_1) < \rho_s \Delta F(u_0) \quad \forall u_0 \ne u^*. \tag{6}$$

Действительно, из замечания к теореме 1 из [4] следует, что если $\Delta F(u_1) = \rho_s \Delta F(u_0) \ne 0$, то оператор A имеет более s различных собственных значений. Поэтому неравенство (6) будет выполнено для любого оператора A, обладающего не более чем s различными собственными значениями и для которого $\rho_s \ne 0$.

Цель данной работы состояла в отыскании аналога результата работы [4], справедливого для произвольных гильбертовых пространств. Мы доказали следующие два утверждения:

а) для любого $\varepsilon > 0$ существует начальное приближение $u_0(\varepsilon) \ne u^*$ такое, что

$$(\rho_s - \varepsilon)^k \Delta F(u_0(\varepsilon)) \le \Delta F(u_k(\varepsilon)) \le \rho_s^k \Delta F(u_0(\varepsilon)), \quad k = 0, 1, \ldots; \tag{7}$$

б) если спектр оператора A состоит только из собственных значений, то существует начальное приближение $\tilde{u}_0 \ne u^*$ такое, что

$$\Delta F(\tilde{u}_k) = \rho_s^k \Delta F(\tilde{u}_0), \quad k = 0, 1, \ldots. \tag{8}$$

Оказалось, что подобные утверждения справедливы и для s-шаговых итерационных методов вариационного типа (включающих как частный случай s-шаговый метод наискорейшего спуска, задаваемый формулой (2)).

В разд. 1 настоящей работы дано определение и указаны способы реализации s-шаговых итерационных методов вариационного типа (сокращенно: s-шаговых методов). Определение опирается на общую теорию итерационных методов А.А. Самарского [5] и охватывает широкий класс итерационных процессов, включая явные и неявные s-шаговые методы наискорейшего спуска, сопряженных градиентов, сопряженных невязок, сопряженных поправок и сопряженных погрешностей.

В разд. 2 доказаны соотношения вида (7), (8) для s-шаговых итерационных методов вариационного типа.

1. ОПРЕДЕЛЕНИЕ И СПОСОБЫ РЕАЛИЗАЦИИ s-ШАГОВЫХ МЕТОДОВ

Согласно [5], конкретный итерационный метод вариационного типа определяется тремя линейными операторами: A – оператор уравнения (1), B – оператор предобусловливания (стабилизатор), D – оператор, задающий минимизируемый функционал.

Эти операторы не обязательно ограничены; относительно них предполагаем следующее:

1) области определения D_A, D_B, D_D операторов A, B, D плотны в H;

2) оператор D самосопряжен и положительно определен в H;

3) область определения $D_{B^{-1}A}$ оператора $B^{-1}A$ плотна в энергетическом пространстве H_D и $\forall u, v \in D_{B^{-1}A} \cap H_D$ верно следующее:

а) $B^{-1}Au \in H_D$,

б) $(B^{-1}Au, v)_D = (u, B^{-1}Av)_D$,

в) $\nu_1\|u\|_D^2 \le (B^{-1}Au, u)_D \le \nu_2\|u\|_D^2$, $0 < \nu_1 < \nu_2$.

Кроме того, предполагаем, что уравнение (1) имеет единственное решение u^*, принадлежащее пространству H_D.

Для конечномерных пространств $D_A = D_B = D_D = H_D = H$. Из условия 3) следует, что операторы A и B не вырождены, поэтому уравнение (1) имеет единственное решение и $D_{B^{-1}A} = H$. Условия б), в), записанные в виде

$$(DB^{-1}Au, v) = (u, DB^{-1}Av), \quad \nu_1(Du, u) \le (DB^{-1}Au, u) \le \nu_2(Du, u),$$

эквивалентны условиям самосопряженного (в смысле Самарского [5]) случая: оператор $DB^{-1}A$ самосопряжен и положительно определен, а ν_1, ν_2 – постоянные энергетической эквивалентности операторов D и $DB^{-1}A$.

Из условия 3) следует, что оператор $B^{-1}A$ может быть расширен до ограниченного самосопряженного и положительно-определенного в пространстве H_D оператора K, отображающего взаимно однозначно H_D на H_D:

$$(Ku, v)_D = (u, Kv)_D \quad \forall u, v \in H_D, \quad \nu_1\|u\|_D^2 \le (Ku, u)_D \le \nu_2\|u\|_D^2.$$

Последовательные приближения s-шагового метода строятся по правилу

$$u_{k+1} = u_k + \gamma_1^{(k)}Kz_k + \ldots + \gamma_s^{(k)}K^s z_k, \quad k = 0, 1, \ldots, \tag{1.1}$$

где u_0 – произвольное начальное приближение из H_D, $z_k = u_k - u^*$, а итерационные параметры $\{\gamma_i^{(k)}, i = 1, 2, \ldots, s\}$ выбираются из условия минимума квадратичного функционала $\mathcal{F}(u_{k+1}) = \|u_{k+1} - u^*\|_D^2$:

$$\mathcal{F}(u_{k+1}) = \min_{\gamma_1, \ldots, \gamma_s}\|z_k + \gamma_1 Kz_k + \ldots + \gamma_s K^s z_k\|_D^2. \tag{1.2}$$

В определение s-шаговых методов входит неизвестный вектор u^*, поэтому s-шаговый метод может быть реализован лишь при дополнительных предположениях относительно операторов A, B, D. Рассмотрим некоторые реализуемые случаи s-шаговых методов.

1. **s-Шаговый метод наискорейшего спуска** (сопряженных градиентов). Предположим, что A и B – самосопряженные положительно-определенные операторы и $D = A$. Кроме того, предположим, что операторы A и B сходны, т.е. $D_A = D_B$.

Условия 1), 2), накладываемые на операторы A, B, D в определении s-шагового метода, очевидно, выполнены. Проверим условие 3):

а) так как $H_D = H_A$, а оператор $B^{-1}A$ отображает D_A на D_A, то $B^{-1}Au \in H_D$ $\forall u \in D_A$;

б) $\forall u, v \in D_A$ имеем

$$(B^{-1}Au, v)_A = (AB^{-1}Au, v) = (u, AB^{-1}Av) = (u, B^{-1}Av)_A;$$

в) из сходности операторов A и B следует (см., например, [6]), что $H_A = H_B$ и операторы $B^{-1/2}A^{1/2}$, $A^{-1/2}B^{1/2}$ ограничены:

$$\|B^{-1/2}A^{1/2}u\|^2 \le \nu_2\|u\|^2, \quad \|A^{-1/2}B^{1/2}u\|^2 \le \|u\|^2/\nu_1 \quad \forall u \in H_A. \tag{1.3}$$

Операторы $B^{-1/2}A^{1/2}$ и $A^{-1/2}B^{1/2}$ отображают H_A на H_A и взаимно обратны, поэтому из (1.3) следует, что

$$\nu_1\|u\|^2 \le \|B^{-1/2}A^{1/2}u\|^2 \le \nu_2\|u\|^2 \quad \forall u \in H_A. \tag{1.4}$$

Оператор $A^{1/2}$ осуществляет взаимно однозначное соответствие между D_A и H_A, поэтому из (1.4) после замены $u = A^{1/2}v$ следует

$$\nu_1\|v\|_A^2 \le (B^{-1}Av, v)_A \le \nu_2\|v\|_A^2 \quad \forall v \in D_A, \tag{1.5}$$

что и требовалось доказать.

Таким образом, условия, накладываемые на операторы A, B, D в определении s-шагового метода, в рассматриваемом случае выполнены.

Покажем, что неравенство (1.5) равносильно неравенству

$$\nu_1(Bv, v) \le (Av, v) \le \nu_2(Bv, v) \quad \forall v \in D_A. \tag{1.6}$$

Действительно, оператор A осуществляет взаимно однозначное соответствие между D_A и H; поэтому после замены $u = Av$ получаем равносильное (1.5) неравенство

$$\nu_1(A^{-1}u, u) \le (B^{-1}u, u) \le \nu_2(A^{-1}u, u) \quad \forall u \in H. \tag{1.7}$$

Оператор $B^{1/2}$ осуществляет взаимно однозначное соответствие между D_A и H_A, поэтому после замены $x = B^{1/2}v$, получаем равносильное (1.6) неравенство

$$\nu_1\|x\|^2 \le (B^{-1/2}AB^{-1/2}x, x) \le \nu_2\|x\|^2 \quad \forall x \in H_A. \tag{1.8}$$

Оператор $C = B^{-1/2}AB^{-1/2}$ симметричен, ограничен и, в силу (1.8), положительно определен на пространстве H_A. Поскольку пространство H_A плотно в H, то непрерывное расширение оператора C на H порождает ограниченный самосопряженный и положительно-определенный оператор $\tilde{C}$ и неравенство (1.8) равносильно неравенству

$$\nu_1\|x\|^2 \le (\tilde{C}x, x) \le \nu_2\|x\|^2 \quad \forall x \in H. \tag{1.9}$$

Замена $y = \tilde{C}^{1/2}x$ приводит (1.9) к равносильному неравенству

$$\nu_1(\tilde{C}^{-1}y, y) \le (y, y) \le \nu_2(\tilde{C}^{-1}y, y) \quad \forall y \in H,$$

которое, в свою очередь, равносильно

$$\nu_1(\tilde{C}^{-1}y, y) \le (y, y) \le \nu_2(\tilde{C}^{-1}y, y) \quad \forall y \in H_A. \tag{1.10}$$

Поскольку $\tilde{C}^{-1} = B^{1/2}A^{-1}B^{1/2}$ на H_A, то замена $u = B^{1/2}y$ приводит (1.10) к равносильному неравенству (1.7) (оператор $B^{1/2}$ осуществляет взаимно однозначное соответствие между H_A и H).

Таким образом, ν_1, ν_2 – постоянные энергетической эквивалентности операторов A и B.

Отметим, что если оператор A ограничен, $B = E$ – единичный оператор, то получаем s-шаговый метод наискорейшего спуска, задаваемый формулой (2) (функционал $\mathcal{F}(u)$ отличается в этом случае от функционала $F(u)$ постоянным слагаемым: $\mathcal{F}(u) = F(u) + (f, u^*)$).

Рассмотрим некоторые схемы численной реализации s-шагового метода наискорейшего спуска (сопряженных градиентов).

Предположим для простоты, что $u_0 \in D_A$. Тогда $z_0 = u_0 - u^* \in D_A$ и $K^i z_0 = (B^{-1}A)^i z_0 \in D_A$, поскольку $K = B^{-1}A$ на D_A, а оператор $B^{-1}A$ отображает D_A на D_A. Из формулы (1.1) следует, что $u_1 \in D_A$. Аналогично, $u_k \in D_A$, $k = 2, 3, \ldots$.

а. Реализация метода по формулам (1.1), (1.2):

$$u_{k+1} = u_k + \gamma_1^{(k)}w_k + \gamma_2^{(k)}B^{-1}Aw_k + \ldots + \gamma_s^{(k)}(B^{-1}A)^{s-1}w_k,$$

где $w_k = B^{-1}r_k$, $r_k = Au_k - f$, а итерационные параметры $\{\gamma_i^{(k)}, i = 1, 2, \ldots, s\}$ являются решением системы линейных уравнений

$$\mu_i^{(k)} + \gamma_i^{(k)}\mu_{i+1}^{(k)} + \ldots + \gamma_s^{(k)}\mu_{i+s}^{(k)} = 0, \quad i = 0, 1, \ldots, s-1, \quad \mu_j^{(k)} = ((B^{-1}A)^j w_k, r_k).$$

Отметим, что в записанные выше соотношения входят только известные в процессе итераций величины.

б. Реализация метода по трехслойной схеме из [5].

Шаг 1. По заданному $u_k^{(0)} = u_k$ вычисляется невязка $r_k^{(0)} = Au_k^{(0)} - f$.

Шаг 2. Решается уравнение для поправки $Bw_k^{(0)} = r_k^{(0)}$.

Шаг 3. Вычисляется параметр $\tau_k^{(0)} = (w_k^{(0)}, r_k^{(0)})/(Aw_k^{(0)}, w_k^{(0)})$.

Шаг 4. Приближение $u_k^{(1)}$ находится по формуле $u_k^{(1)} = u_k^{(0)} - \tau_k^{(0)} w_k^{(0)}$.

Далее, для $i = 1, 2, \ldots, s-1$ выполняются следующие действия:

Шаг 5. Вычисляется невязка $r_k^{(i)} = Au_k^{(i)} - f$ и решается уравнение для поправки $Bw_k^{(i)} = r_k^{(i)}$.

Шаг 6. Вычисляются параметры $\tau_k^{(i)}$, $\alpha_k^{(i)}$ по формулам

$$\tau_k^{(i)} = (w_k^{(i)}, r_k^{(i)})/(Aw_k^{(i)}, w_k^{(i)}), \quad \alpha_k^{(0)} = 1,$$

$$\alpha_k^{(i)} = \left(1 - \frac{\tau_k^{(i)}}{\tau_k^{(i-1)}} \frac{(w_k^{(i)}, r_k^{(i)})}{(w_k^{(i-1)}, r_k^{(i-1)})} \frac{1}{\alpha_k^{(i-1)}}\right)^{-1}.$$

Шаг 7. Приближение $u_k^{(i+1)}$ находится по формуле

$$u_k^{(i+1)} = \alpha_k^{(i)} u_k^{(i)} + (1 - \alpha_k^{(i)}) u_k^{(i-1)} - \alpha_k^{(i)} \tau_k^{(i)} w_k^{(i)}.$$

Шаг 8. После окончания цикла по i полагаем $u_{k+1} = u_k^{(s)}$.

Отметим, что в этом алгоритме используются только известные в процессе итераций величины.

в. Реализация метода по схеме с поправкой.

Шаг 1. По заданному $u_k^{(0)} = u_k$ вычисляется невязка $r_k^{(0)} = Au_k^{(0)} - f$, решается уравнение $Bw_k^{(0)} = r_k^{(0)}$ для поправки $w_k^{(0)}$ и полагается $s_k^{(0)} = w_k^{(0)}$.

Шаг 2. Вычисляется параметр $a_k^{(0)} = (w_k^{(0)}, r_k^{(0)})/(As_k^{(0)}, s_k^{(0)})$ и полагается $u_k^{(1)} = u_k^{(0)} - a_k^{(0)} s_k^{(0)}$.

Далее, для $i = 1, 2, \ldots, s-1$ выполняются следующие действия:

Шаг 3. Вычисляется невязка $r_k^{(i)} = Au_k^{(i)} - f$ и решается уравнение для поправки $Bw_k^{(i)} = r_k^{(i)}$.

Шаг 4. Вычисляется параметр $b_k^{(i)} = (w_k^{(i)}, r_k^{(i)})/(w_k^{(i-1)}, r_k^{(i-1)})$ и находится вектор $s_k^{(i)}$ по формуле $s_k^{(i)} = w_k^{(i)} + b_k^{(i)} s_k^{(i-1)}$.

Шаг 5. Определяется параметр $a_k^{(i)} = (w_k^{(i)}, r_k^{(i)})/(As_k^{(i)}, s_k^{(i)})$ и вычисляется следующее приближение $u_k^{(i+1)} = u_k^{(i)} - a_k^{(i)} s_k^{(i)}$.

Шаг 6. После окончания цикла по i полагаем $u_{k+1} = u_k^{(s)}$.

Здесь также используются только известные в процессе итераций величины.

Вот некоторые другие реализуемые случаи s-шаговых методов, взятые из [5].

2. **s-Шаговый метод сопряженных невязок.** $D = A^*A$, оператор B^*A самосопряжен и положительно определен. Квадратичный функционал $\mathcal{F}(u) = \|Au - f\|^2$.

3. **s-Шаговый метод сопряженных поправок.** Оператор $D = AB^{-1}A$, операторы A и B самосопряжены и положительно определены. Квадратичный функционал $\mathcal{F}(u) = \|B^{-1}(Au - f)\|_B^2$.

4. **s-Шаговый метод сопряженных погрешностей.** D – произвольный самосопряженный и положительно-определенный оператор, $B = (A^*)^{-1}D$. Квадратичный функционал $\mathcal{F}(u) = \|u - u^*\|_D^2$.

Для численной реализации методов 2–4 могут быть использованы трехслойная схема и схема с поправкой.

Отметим, что рассмотренные выше примеры s-шаговых методов при $s = 1$ представляют собой, соответственно, методы наискорейшего спуска, минимальных невязок, минимальных поправок и минимальных погрешностей (при $B = E$ явные, при $B \neq E$ неявные).

2. СКОРОСТЬ СХОДИМОСТИ s-ШАГОВЫХ МЕТОДОВ

Из определения s-шагового метода следует, что вектор u_{k+1} однозначно определяется вектором u_k и совпадает с ортогональной проекцией в пространстве H_D вектора u^* на аффинное подпространство $\{v = u_k + \gamma_1 K z_k + \ldots + \gamma_s K^s z_k | -\infty < \gamma_i < \infty, i = 1, 2, \ldots, s\}$, поэтому

$$(z_{k+1}, K^i z_k)_D = 0, \quad i = 1, 2, \ldots, s. \tag{2.1}$$

Лемма 1. *Пусть u_k – последовательность, порожденная s-шаговым методом, $z_k = u_k - u^*$.*

Тогда

$$(z_{k+2}, z_k)_D = \|z_{k+1}\|_D^2, \quad k = 0, 1, \ldots \tag{2.2}$$

Доказательство. Из рекуррентного соотношения (1.1) следует, что

$$z_{k+2} = z_{k+1} + \gamma_1^{(k+1)} K z_{k+1} + \ldots + \gamma_s^{(k+1)} K^s z_{k+1},$$

поэтому

$$(z_{k+2}, z_k)_D = (z_{k+1}, z_k)_D + \gamma_1^{(k+1)}(K z_{k+1}, z_k)_D + \ldots + \gamma_s^{(k+1)}(K^s z_{k+1}, z_k)_D.$$

В силу (2.1), $(K^i z_{k+1}, z_k)_D = 0$, $i = 1, 2, \ldots, s$, поэтому

$$(z_{k+2}, z_k)_D = (z_{k+1}, z_k)_D.$$

Аналогично,

$$z_{k+1} = z_k + \gamma_1^{(k)} K z_k + \ldots + \gamma_s^{(k)} K^s z_k,$$

$$(z_{k+1}, z_{k+1})_D = (z_{k+1}, z_k)_D + \gamma_1^{(k)}(z_{k+1}, K z_k)_D + \ldots + \gamma_s^{(k)}(z_{k+1}, K^s z_k)_D = (z_{k+1}, z_k)_D.$$

Лемма доказана.

Обозначим через $\mathcal{V}$ множество $v \in H_D$, для которых векторы $v, Kv, \ldots, K^s v$ линейно зависимы. Положим $\mathcal{U} = H_D \backslash \mathcal{V}$.

Следующая лемма указывает условие окончания s-шагового метода за конечное число итераций.

Лемма 2. *Пусть u_k – последовательность, порожденная s-шаговым методом. Если $z_0 = u_0 - u^* \in \mathcal{V}$, то $u_k = u^*$, $k = 1, 2, \ldots$, иначе $u_k \neq u^*$, $z_k = u_k - u^* \in \mathcal{U}$, $k = 0, 1, \ldots$.*

Доказательство. а. Пусть $z_0 \in \mathcal{V}$. Тогда векторы $z_0, Kz_0, \ldots, K^s z_0$ линейно зависимы, следовательно, существуют числа $\alpha_0, \ldots, \alpha_s$ (не все равные 0) такие, что

$$\alpha_0 z_0 + \alpha_1 K z_0 + \ldots + \alpha_s K^s z_0 = 0.$$

Предположим, что $\alpha_j = 0$ при $j < i$, $\alpha_i \neq 0$. Тогда

$$K^i(\alpha_i z_0 + \alpha_{i+1} K z_0 + \ldots + \alpha_s K^{s-i} z_0) = 0. \tag{2.3}$$

Поскольку оператор K отображает H_D на H_D взаимно однозначно, то из (2.3) вытекает, что

$$\alpha_i z_0 + \alpha_{i+1} K z_0 + \ldots + \alpha_s K^{s-i} z_0 = 0,$$

следовательно,

$$z_0 + \tilde{\gamma}_1 K z_0 + \ldots + \tilde{\gamma}_s K^s z_0 = 0, \quad \tilde{\gamma}_j = \begin{cases} \alpha_{i+j}/\alpha_i, & j \leq s-i, \\ 0, & j > s-i. \end{cases} \tag{2.4}$$

Так как, в силу (1.2),

$$\mathcal{F}(u_1) = \min_{\gamma_1, \ldots, \gamma_s} \|z_0 + \gamma_1 K z_0 + \ldots + \gamma_s K^s z_0\|_D^2, \tag{2.5}$$

то из (2.4) следует, что $\mathcal{F}(u_1) = 0$, поэтому $u_1 = u_2 = \ldots = u^*$.

Предположим, что $z_0 \in \mathcal{U}$. Тогда векторы $z_0, Kz_0, \ldots, K^s z_0$ линейно независимы, следовательно,

$$z_0 + \gamma_1 K z_0 + \ldots + \gamma_s K^s z_0 \neq 0$$

для любых чисел $\gamma_1, \ldots, \gamma_s$. Поэтому из (2.5) вытекает, что $\mathcal{F}(u_1) \neq 0$ и $u_1 \neq u^*$. В силу леммы 1, $(z_2, z_0)_D = \|z_1\|_D^2$, и так как $z_1 = u_1 - u^* \neq 0$, то $z_2 \neq 0$, т. е.

$$u_2 \neq u^*. \tag{2.6}$$

Из неравенства (2.6) вытекает, что $z_1 \in \mathcal{U}$. Действительно, в противном случае $z_1 \in \mathcal{V}$ и, повторяя рассуждения применительно к вектору z_1, получаем, что $u_2 = u_3 = \ldots = u^*$, т.е. противоречие.

Таким образом, мы доказали, что если $z_0 \in \mathcal{U}$, то $u_1 \neq u^*$ и $z_1 \in \mathcal{U}$. Применяя предыдущие рассуждения к вектору z_1, получаем, что $u_2 \neq u^*$, $z_2 \in \mathcal{U}$ и т.д., $u_k \neq u^*$, $z_k \in \mathcal{U}$, $k = 3, 4, \ldots$. Лемма доказана.

Перейдем к оценке скорости сходимости s-шагового метода. Если u_0 – такое начальное приближение, что $z_0 = u_0 - u^* \in \mathcal{V}$, то, в силу леммы 2, $u_1 = u_2 = \ldots = u^*$, т.е. s-шаговый метод находит точное решение за одну итерацию. Поэтому в дальнейшем будем рассматривать лишь такие начальные приближения, для которых $z_0 = u_0 - u^* \in \mathcal{U}$. В этом случае, в силу леммы 2, $z_k = u_k - u^* \neq 0$, $k = 0, 1, \ldots$, т.е. существует последовательность

$$\rho_k(u_0) = \frac{\|z_{k+1}\|_D}{\|z_k\|_D} = \frac{\sqrt{\mathcal{F}(u_{k+1})}}{\sqrt{\mathcal{F}(u_k)}}, \quad k = 0, 1, \ldots,$$

коэффициентов относительного уменьшения квадратичного функционала $\mathcal{F}$ при переходе от k-го к $(k+1)$-му приближению. Эта последовательность характеризует скорость сходимости s-шагового метода с начальным приближением u_0.

Оценим $\rho_k(u_0)$. Обозначим через $\pi_s(t) = 1 + \pi_1 t + \ldots + \pi_s t^s$ многочлен от t степени s, наименее уклоняющийся от 0 на спектре $\mathrm{sp}(K)$ оператора K, а через

$$\rho_s = \max_{t \in \mathrm{sp}(K)} |\pi_s(t)|$$

обозначим величину уклонения. Имеет место

Теорема 1. *Если $u_0 - u^* \in \mathcal{U}$, то последовательность $\rho_k(u_0)$ монотонно не убывает и ограничена сверху*:

$$\rho_k(u_0) \le \rho_{k+1}(u_0) \le \rho_s, \quad k = 0, 1, \ldots. \tag{2.7}$$

Доказательство. Так как

$$\|z_{k+2} - \rho_k^2(u_0) z_k\|_D^2 = \|z_{k+2}\|_D^2 - 2\frac{\|z_{k+1}\|_D^2 (z_{k+2}, z_k)_D}{\|z_k\|_D^2} + \frac{\|z_{k+1}\|_D^4}{\|z_k\|_D^2},$$

то, заменяя $(z_{k+2}, z_k)_D$ на $\|z_{k+1}\|_D^2$ (что возможно в силу равенства (2.22)), получаем

$$\|z_{k+2} - \rho_k^2(u_0) z_k\|_D^2 = \|z_{k+1}\|_D^2 [\rho_{k+1}^2(u_0) - \rho_k^2(u_0)], \tag{2.8}$$

поэтому $\rho_k(u_0) \le \rho_{k+1}(u_0)$, $k = 0, 1, \ldots$. Далее, исходя из соотношений (1.1), (1.2), имеем

$$\|z_{k+1}\|_D = \sqrt{\mathcal{F}(u_{k+1})} = \min_{\gamma_1, \ldots, \gamma_s} \|z_k + \gamma_1 K z_k + \ldots + \gamma_s K^s z_k\|_D \le$$

$$\le \|z_k + \pi_1 K z_k + \ldots + \pi_s K^s z_k\|_D = \|\pi_s(K) z_k\|_D \le \max_{t \in \mathrm{sp}(K)} |\pi_s(t)| \|z_k\|_D = \rho_s \|z_k\|_D,$$

следовательно, $\rho_k(u_0) \le \rho_s$, $k = 0, 1, \ldots$. Теорема доказана.

Замечание 1. Предположим, что $\|z_1\|_D = \rho_s \|z_0\|_D \neq 0$. Так как $z_1 \neq 0$, то из леммы 2 следует, что $z_0 \in \mathcal{U}$. Из оценки (2.7) вытекает, что $\rho_0(u_0) = \rho_1(u_0) = \ldots = \rho_s$, поэтому, полагая в (2.8) $k = 0$, имеем

$$z_2 = \rho_s^2 z_0. \tag{2.9}$$

Так как $z_1 = z_0 + \gamma_1^{(0)} K z_0 + \ldots + \gamma_s^{(0)} K^s z_0$, $z_2 = z_1 + \gamma_1^{(1)} K z_1 + \ldots + \gamma_s^{(1)} K^s z_1$, $\rho_s < 1$, то из (2.9) вытекает, что векторы $z_0, K z_0, \ldots, K^{2s} z_0$ линейно зависимы, что имеет место (см., например, [7]) лишь тогда, когда вектор z_0 является линейной комбинацией собственных векторов оператора K. Поскольку $z_0 \in \mathcal{U}$, то векторы $z_0, K z_0, \ldots, K^s z_0$ линейно независимы, следовательно, оператор K должен иметь по крайней мере $s + 1$ различных собственных значений. Таким образом, если $\|z_1\|_D = \rho_s \|z_0\|_D \neq 0$, то оператор K имеет более s различных собственных значений. В частности, для s-шагового метода наискорейшего спуска имеем, что если $\Delta F(u_1) = \rho_s \Delta F(u_0) \neq 0$, то оператор A имеет более s различных собственных значений.

Рассмотрим вопрос о точности оценок (2.7).

Теорема 2. *Пусть спектр оператора K содержит более s точек. Тогда выполняется следующее*:

а) *для любого $\varepsilon > 0$ существует начальное приближение $u_0(\varepsilon)$ такое, что*

$$\rho_s - \varepsilon \le \rho_k(u_0(\varepsilon)) \le \rho_s, \quad k = 0, 1, \ldots; \tag{2.10}$$

б) *если спектр оператора K точечный* (*т.е. состоит только из собственных значений оператора K*), *то существует начальное приближение* $\tilde{u}_0$ *такое, что*

$$\rho_k(\tilde{u}_0) = \rho_s, \quad k = 0, 1, \ldots. \tag{2.11}$$

Для доказательства теоремы используются вспомогательные утверждения.

Пусть C – произвольный линейный ограниченный самосопряженный и положительно-определенный в пространстве H_D оператор. Обозначим через $\mathcal{U}(C)$ множество $v \in H_D$, для которых векторы $v, Cv, \ldots, C^s v$ линейно независимы (отметим, что $\mathcal{U}(K) = \mathcal{U}$). Каждому $z \in \mathcal{U}(C)$ поставим в соответствие многочлен

$$p(t, C, z) = 1 + \gamma_1(C, z)t + \ldots + \gamma_s(C, z)t^s$$

от переменной t, коэффициенты которого однозначно определяются из системы линейных уравнений

$$\begin{gathered}\mu_i(C, z) + \gamma_1(C, z)\mu_{i+1}(C, z) + \ldots + \gamma_s(C, z)\mu_{i+s}(C, z) = 0, \quad i = 1, 2, \ldots, s, \\ \mu_j(C, z) = (C^j z, z)_D.\end{gathered} \tag{2.12}$$

Нетрудно проверить, что $p(t, K, z_k) = 1 + \gamma_1^{(k)} t + \ldots + \gamma_s^{(k)} t^s$ и имеет место соотношение ортогональности, аналогичное (2.1):

$$(p(C, C, z)z, C^i z)_D = 0, \quad i = 1, 2, \ldots, s. \tag{2.13}$$

Таким образом, многочлен $p(t, C, z)$ порождается итерацией s-шагового метода с оператором C и начальным приближением $u^* + z$.

Предположим, что оператор C обладает собственными значениями $t_1, \ldots, t_{s+1}$ ($t_1 < \ldots < t_{s+1}$). Обозначим через $H_D^{(i)}$ собственное подпространство оператора C, соответствующее собственному значению t_i, а через L – ортогональную сумму $H_D^{(1)} + \ldots + H_D^{(s+1)}$. Пусть

$$\mathcal{R}(C, L) = \{p(t, C, z) | z \in L \cap \mathcal{U}(C)\}, \quad p(t) = 1 + \gamma_1 t + \ldots + \gamma_s t^s,$$

является произвольным многочленом с вещественными коэффициентами.

Сформулируем критерий принадлежности многочлена $p(t)$ к множеству $\mathcal{R}(C, L)$.

Лемма 3. *Для того чтобы* $p(t) \in \mathcal{R}(C, L)$, *необходимо и достаточно, чтобы последовательность* $p(t_1), \ldots, p(t_{s+1})$ *имела в точности* s *перемен знака.*

Доказательство. Необходимость. Пусть $p(t) \in \mathcal{R}(C, L)$. Тогда существует вектор $z \in L \cap \mathcal{U}(C)$ такой, что $p(t, C, z) = p(t)$. Покажем, что последовательность $p(t_1, C, z), \ldots, p(t_{s+1}, C, z)$ имеет s перемен знака, Представим вектор z в виде

$$z = \sum_{j=1}^{s+1} \zeta_j e_j, \quad e_j \in H_D^{(j)}, \quad \|e_j\|_D = 1, \quad j = 1, 2, \ldots, s+1. \tag{2.14}$$

Тогда

$$C^i z = \sum_{j=1}^{s+1} t_j^i \zeta_j e_j, \quad p(C, C, z)z = \sum_{j=1}^{s+1} p(t_j, C, z)\zeta_j e_j. \tag{2.15}$$

Из (2.13), (2.15) следует, что

$$(p(C, C, z)z, C^i z)_D = \sum_{j=1}^{s+1} t_j^i p(t_j, C, z)(\zeta_j)^2 = 0, \quad i = 1, 2, \ldots, s. \tag{2.16}$$

После замены переменных $\zeta_j' = \sqrt{t_j}\zeta_j$ в (2.16) получаем

$$\sum_{j=1}^{s+1} t_j^i p(t_j, C, z)(\zeta_j')^2 = 0, \quad i = 0, 1, \ldots, s-1. \tag{2.17}$$

Поскольку $z \in \mathcal{U}(C)$, то в разложении (2.14) будет $\zeta_j \neq 0, j = 1, \ldots, s+1$, поэтому из (2.17) вытекает, что $p(t, C, z)$ – ортогональный на множестве $t_1, \ldots, t_{s+1}$ многочлен дискретного аргумента степени

s. Согласно теории ортогональных многочленов (см., например, [8]), последовательность $p(t_1, C, z), \ldots, p(t_{s+1}, C, z)$ имеет s перемен знака.

Достаточность. Пусть последовательность $p(t_1), \ldots, p(t_{s+1})$ имеет s перемен знака. Тогда система линейных относительно $x_1, \ldots, x_{s+1}$ уравнений

$$\sum_{j=1}^{s+1} t_j^i p(t_j) x_j = 0, \quad i = 0, 1, \ldots, s-1, \tag{2.18}$$

имеет положительное решение. Действительно, в противном случае существует, в силу теоремы Штимке (см. [9]), многочлен $q(t) = \tau_0 + \tau_1 t + \ldots + \tau_{s-1} t^{s-1} \not\equiv 0$, такой, что

$$p(t_j)q(t_j) \geq 0, \quad j = 1, 2, \ldots, s+1. \tag{2.19}$$

Из неравенства (2.19) вытекает, что многочлен $q(t)$ имеет s вещественных корней (с учетом кратности), следовательно, $q(t) \equiv 0$, т.е. получили противоречие.

Пусть $x_1, \ldots, x_{s+1}$ – положительное решение системы (2.18). Положим $\zeta_j = \sqrt{x_j/t_j}$, $j = 1, 2, \ldots, s+1$, и определим вектор z по формуле (2.14), где e_j – произвольный единичный вектор из $H_D^{(j)}$. Покажем, что $p(t, C, z) = p(t)$. Действительно, для вектора z справедливы формулы (2.15)–(2.17), поэтому

$$\sum_{j=1}^{s+1} t_j^i p(t_j, C, z) x_j = 0, \quad i = 0, 1, \ldots, s-1. \tag{2.20}$$

Вычитая соответствующие уравнения (2.18) из (2.20), получаем

$$\sum_{j=1}^{s+1} t_j^i (p(t_j, C, z) - p(t_j)) x_j = 0, \quad i = 0, 1, \ldots, s-1. \tag{2.21}$$

Так как $p(t, C, z) - p(t) = t\Phi(t)$, где $\Phi(t)$ – некоторый многочлен степени меньше s, то равенства (2.21) можно переписать в виде

$$\sum_{j=1}^{s+1} t_j^i \Phi(t_j)(t_j x_j) = 0, \quad i = 0, 1, \ldots, s-1. \tag{2.22}$$

Поскольку $x_j \neq 0$, $j = 1, 2, \ldots, s+1$, то из (2.22) вытекает, что $\Phi(t) \equiv 0$, что и требовалось доказать. Лемма доказана.

Доказательство теоремы 2. а. Обозначим через $t_1, \ldots, t_{s+1}$ точки чебышёвского альтернанса для многочлена $\pi_s(t)$, расположенные в порядке возрастания. Тогда $t_i \in \operatorname{sp}(K)$, $i = 1, 2, \ldots, s+1$, и

$$(-1)^{j-1}\pi_s(t_j) = \pi_s(t_1) = \rho_s, \quad j = 2, 3, \ldots, s+1. \tag{2.23}$$

Выберем число $\delta > 0$ так, чтобы интервалы $\Delta_j = [t_j - \delta, t_j + \delta[$, $j = 1, 2, \ldots, s+1$, попарно не пересекались. Положим $E_{\Delta_j} = E_{t_j+\delta} - E_{t_j-\delta}$, $H_D^{(j)} = E_{\Delta_j} H_D$, $L = H_D^{(1)} + \ldots + H_D^{(s+1)}$, $L^\perp$ – ортогональное дополнение подпространства L до H_D (E_t – спектральная функция оператора K). Так как $t_j \in \operatorname{sp}(K)$, то $H_D^{(j)} \neq \varnothing$, $j = 1, 2, \ldots, s+1$, следовательно, линейный оператор C, заданный соотношением

$$Cz = \begin{cases} t_j z, & z \in H_D^{(j)}, \\ Kz, & z \in L^\perp, \end{cases}$$

обладает собственными значениями $t_1, \ldots, t_{s+1}$ и соответствующими собственными подпространствами $H_D^{(1)}, \ldots, H_D^{(s+1)}$. Кроме того, нетрудно проверить, что оператор C ограничен, самосопряжен и положительно определен в пространстве H_D. Из равенства (2.23) вытекает, что последовательность $\pi_s(t_1), \ldots, \pi_s(t_{s+1})$ имеет в точности s перемен знака, поэтому, в силу леммы 3, $\pi_s(t) \in \mathcal{R}(C, L)$. Следовательно, существует единичный вектор z вида

$$z = \sum_{j=1}^{s+1} \zeta_j e_j, \quad \|z\|_D = 1, \quad \zeta_j \neq 0, \quad e_j \in H_D^{(j)}, \quad \|e_j\|_D = 1, \quad j = 1, 2, \ldots, s+1,$$

такой, что $p(t, C, z) = \pi_s(t)$. Поэтому, используя соотношения (2.13), (2.23), имеем

$$\sum_{j=1}^{s+1} \zeta_j^2 = 1, \quad \sum_{j=1}^{s+1} (-1)^{j-1} t_j^i \zeta_j^2 = 0, \quad i = 1, 2, \dots, s. \tag{2.24}$$

Равенства (2.24) образуют систему линейных уравнений относительно ζ_j^2, $j = 1, 2, \dots, s+1$. Нетрудно проверить, что определитель этой системы отличен от 0, следовательно, она имеет единственное решение. Таким образом, коэффициенты ζ_j^2, $j = 1, 2, \dots, s+1$, а вместе с ними и моменты

$$\mu_i(C, z) = (C^i z, z)_D = \sum_{j=1}^{s+1} t_j^i \zeta_j^2$$

не зависят от δ.

Далее, из определения оператора C следует, что $\lim\limits_{\delta \to 0} \|C - K\| = 0$, поэтому $\forall i \geq 0$ $\lim\limits_{\delta \to 0} \mu_i(K, z) = \mu_i(C, z)$. Но тогда из соотношений (2.13) вытекает, что

$$\lim_{\delta \to 0} \gamma_i(K, z) = \gamma_i(C, z), \quad i = 1, 2, \dots, s,$$

следовательно,

$$\lim_{\delta \to 0} \|p(K, K, z)z - p(C, C, z)z\|_D = 0. \tag{2.25}$$

Положим $\rho(K, z) = \|p(K, K, z)z\|_D$, $\rho(C, z) = \|p(C, C, z)z\|_D$. Так как $\|p(C, C, z)z\|_D = \rho_s$, то из (2.25) вытекает, что $\lim\limits_{\delta \to 0} \rho(K, z) = \rho_s$. Выберем δ настолько малым, чтобы $|\rho(K, z) - \rho_s| \leq \varepsilon$, и положим $u_0(\varepsilon) = u^* + z$. Поскольку $\rho_0(u_0(\varepsilon)) = \rho(K, z)$, то $\rho_s - \varepsilon \leq \rho_0(u_0(\varepsilon))$ и, в силу теоремы 1, $\rho_s - \varepsilon \leq \rho_k(u_0(\varepsilon)) \leq \rho_s$, $k = 0, 1, \dots$, что и требовалось доказать.

б. Предположим теперь, что спектр оператора K точечный. Тогда точки $t_1, \dots, t_{s+1}$ чебышёвского альтернанса для многочлена $\pi_s(t)$ являются собственными значениями оператора K. Так как последовательность $\pi_s(t_1), \dots, \pi_s(t_{s+1})$ имеет в точности s перемен знака, то, в силу леммы 3, $\pi_s(t) \in \mathcal{R}(K, L)$, следовательно, существует вектор $z \in L \cap \mathcal{U}(K)$ такой, что $p(t, K, z) = \pi_s(t)$. Положим $\tilde{u}_0 = u^* + z$. Используя соотношение (2.23), получаем $\rho_0(\tilde{u}_0) = \rho_s$. Утверждение п. б вытекает теперь из теоремы 1. Теорема доказана.

Замечание 2. Из оценки (2.10) следует, что

$$(\rho_s - \varepsilon)^k \|z_0(\varepsilon)\|_D \leq \|z_k(\varepsilon)\|_D \leq \rho_s^k \|z_0(\varepsilon)\|_D, \quad k = 0, 1, \dots. \tag{2.26}$$

Из (2.11) вытекает, что

$$\|\tilde{z}_k\|_D = \rho_s^k \|\tilde{z}_0\|_D, \quad k = 0, 1, \dots. \tag{2.27}$$

Для s-шагового метода наискорейшего спуска соотношения (2.26), (2.27) эквивалентны соответствующим соотношениям (7), (8).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Канторович Л.В.* Функциональный анализ и прикладная математика // Успехи матем. наук. 1948. Т. 3. № 6. С. 89–185.
2. *Бирман М.Ш.* Некоторые оценки для метода наискорейшего спуска // Успехи матем. наук. 1950. Т. 5. № 3. С. 152–155.
3. *Марчук Г.И., Кузнецов Ю.А.* Итерационные методы и квадратичные функционалы // Методы вычисл. матем. Новосибирск: Наука, 1975. С. 4–143.
4. *Ковригин А.Б.* Оценка быстроты сходимости K-шагового градиентного метода // Вестн. Ленингр. ун-та. 1970. № 13. С. 34–36.
5. *Самарский А.А., Николаев Е.С.* Методы решения сеточных уравнений. М.: Наука, 1978.
6. *Михлин С. Г.* Вариационные методы в математической физике. М.: Наука, 1970.
7. *Воробьев Ю.В.* Метод моментов в прикладной математике. М.: Физматгиз, 1958.
8. *Сегё Г.* Ортогональные многочлены. М.: Физматгиз, 1968.
9. *Чарин В.С.* Линейные преобразования и выпуклые множества. Киев: Вища школа, 1978.