

УДК 519.61

П. Ф. Жук, А. А. Мусина (Нац. авиац. ун-т)

АСИМПТОТИЧЕСКАЯ СКОРОСТЬ СХОДИМОСТИ ДВУХСЛОЙНОГО ИТЕРАЦИОННОГО МЕТОДА ВАРИАЦИОННОГО ТИПА

We present the definition and study the dependence on the initial approximation of the asymptotic rate of convergence of a two-layer symmetrizable iterative method of the variational type. The explicit expression is obtained for the substantial (with respect to the Lebesgue measure) range of its values. Its domain of continuity is described.

Наведено визначення і досліджено залежність від початкового наближення асимптотичної швидкості збіжності двошарового симетризованого ітераційного методу варіаційного типу. Знайдено явний вираз істотної (за мірою Лебега) області її значень. Охарактеризовано її область неперервності.

Введение. Итерационные методы вариационного типа являются известными и весьма эффективными методами решения операторных уравнений и минимизации функционалов. Операторы переходов таких методов нелинейные, так как их итерационные параметры не постоянны, а выбираются на каждой итерации из условия минимума некоторого функционала.

Нелинейное поведение итерационных методов вариационного типа обуславливает существенную зависимость характеристик их сходимости от начального приближения. Интерес к этой зависимости в настоящее время возрастает (см., например, [1 – 5]), однако прогресс в этой области в значительной степени ограничен сложностью задачи через ее нелинейность (так, несмотря на многочисленные публикации, посвященные известному методу Barzilai – Borwein [6], скорость сходимости этого метода математически строго удалось изучить только в простейшем двумерном случае).

В данной работе рассматривается двухслойный симметризуемый итерационный метод вариационного типа (сокращенно: двухслойный метод) решения линейных операторных уравнений и минимизации квадратичных функционалов. Этот метод включает такие известные методы, как методы наискорейшего спуска, минимальных невязок, минимальных погрешностей, минимальных поправок. Его асимптотическое свойство (см. [7]) позволяет естественным образом определить асимптотическую скорость сходимости как функцию от начального приближения. Эта функция и является предметом исследования данной статьи.

В п. 1 дано определение двухслойного метода и его асимптотической скорости сходимости. Оператор перехода и асимптотическая скорость сходимости метода затем преобразованы к более удобному для изучения виду на стандартном симплексе в пространстве R^n . Сформулирована задача исследования — определить существенную область значений и область непрерывности асимптотической скорости сходимости метода.

В п. 2 показано, что хотя асимптотическая скорость сходимости метода может принимать бесконечные значения, ее существенная (по мере Лебега) область значений ограничена. Указано явное выражение этой области значений.

Поскольку при наличии ошибок округлений реальное поведение итерационного метода вариационного типа может существенно отличаться от теоретического (типичным примером является метод сопряженных градиентов), в п. 3 асимптотическая скорость сходимости двухслойного метода изучается на непрерывность как функция от начального приближения. Оха-

рактеризованы множества точек непрерывности и разрыва этой функции. Показано, что если начальное приближение является точкой разрыва асимптотической скорости сходимости, то соответствующая итерационная последовательность „вырождается”. Из этого факта, в частности, следует, что лебегова мера множества точек разрыва асимптотической скорости сходимости равна 0. Таким образом, в п. 3 показано, что асимптотическая скорость сходимости двухслойного метода почти всюду (по мере Лебега) непрерывна как функция от начального приближения.

Перспективными в данном направлении исследований являются такие задачи:

- 1) охарактеризовать область дифференцируемости асимптотической скорости сходимости;
- 2) определить структуру множества начальных приближений с заданным значением асимптотической скорости сходимости;
- 3) установить, существуют ли значения асимптотической скорости сходимости, для которых мера Лебега указанного в задаче 2 множества отлична от 0.

1. Постановка задачи. Пусть E — конечномерное действительное евклидово пространство со скалярным произведением (u, v) и нормой $\|u\| = \sqrt{(u, u)}$. Обозначим через A , B , D линейные невырожденные операторы, действующие в пространстве E . Относительно них предполагаем, что:

- 1) оператор D самосопряжен и положительно определен в E ;
- 2) оператор $B^{-1}A$ самосопряжен и положительно определен в энергетическом пространстве E_p (т. е. имеет место самосопряженный, в смысле Самарского [7], случай);
- 3) спектр оператора $B^{-1}A$ состоит только из простых собственных значений (это предположение не принципиально, но упрощает формулировку результатов).

Двухслойный метод решения операторного уравнения

$$Au = f, \quad (1.1)$$

или, что то же самое, минимизации квадратичного функционала $\|u - u^*\|_D^2$, задается схемой [7]

$$B \frac{u^{(k+1)} - u^{(k)}}{\tau_{k+1}} + Au^{(k)} = f, \quad k = 0, 1, \dots, \quad (1.2)$$

где $u^{(0)}$ — произвольное начальное приближение, итерационный параметр τ_{k+1} выбирается из условия минимума погрешности $z^{(k+1)} = u^{(k+1)} - u^*$ в энергетическом пространстве E_p и равен

$$\tau_{k+1} = \frac{(B^{-1}Az^{(k)}, z^{(k)})_D}{\|B^{-1}Az^{(k)}\|_D^2}. \quad (1.3)$$

Здесь u^* — точное решение уравнения (1.1), а $z^{(k)} = u^{(k)} - u^*$.

Асимптотическое свойство двухслойного метода состоит в следующем (см. [7]): если

$z^{(1)} = u^{(1)} - u^* \neq 0$, то и $z^{(k)} = u^{(k)} - u^* \neq 0$, $k = 0, 1, \dots$, и последовательность $\tilde{\rho}_k(u^{(0)}) = \|\tilde{z}^{(k+1)}\|_D / \|\tilde{z}^{(k)}\|_D$ монотонно убывает.

Поскольку (см. [7]) последовательность $\tilde{\rho}_k(u^{(0)})$, $k = 0, 1, \dots$, ограничена сверху величиной $\frac{1-\xi}{1+\xi}$, где $\xi = \frac{\gamma_1}{\gamma_2}$, а γ_1, γ_2 — границы спектра оператора $B^{-1}A$, существует предел $\tilde{\rho}_\infty(u_0) = \lim_{k \rightarrow \infty} \tilde{\rho}_k(u^{(0)})$, зависящий, вообще говоря, от начального приближения $u^{(0)}$.

Под асимптотической скоростью сходимости двухслойного метода будем понимать следующую функцию начального приближения $u^{(0)}$:

$$\tilde{v}(u^{(0)}) = \begin{cases} \infty, & \text{если } z^{(1)} = 0, \\ -\ln \tilde{\rho}_\infty(u^{(0)}), & \text{если } z^{(1)} \neq 0. \end{cases} \quad (1.4)$$

Представим функцию \tilde{v} в виде суперпозиции более простых функций. Из свойств операторов A, B, D следует, что оператор $C = D^{0.5}B^{-1}AD^{0.5}$ самосопряжен и положительно определен, а поэтому существует оператор $C^{0.5}$. Замена $w^{(k)} = C^{0.5}D^{0.5}z^{(k)}$ позволяет перейти от неявной схемы (1.2) двухслойного метода к явной схеме

$$w^{(k+1)} = w^{(k)} - \tau_{k+1}Cw^{(k)}, \quad k = 0, 1, \dots, \quad (1.5)$$

причем из формулы (1.3) следует, что

$$\tau_{k+1} = \frac{\|w^{(k)}\|^2}{(Cw^{(k)}, w^{(k)})} \quad (1.6)$$

(отметим, что $w^{(k)}$ — последовательность невязок метода наискорейшего спуска, примененного к уравнению $Cu = 0$ с начальным приближением $u^{(0)} = C^{-1}w^{(0)}$).

Рассмотрим последовательность $\dot{\rho}_k(w^{(0)}) = \|w^{(k+1)}\|_{C^{-1}} / \|w^{(k)}\|_{C^{-1}}$. Поскольку $\|w^{(k)}\|_{C^{-1}} = \|z^{(k)}\|_D$, $\dot{\rho}_k(w^{(0)}) = \tilde{\rho}_k(u^{(0)})$ и существует предел $\dot{\rho}_\infty(w^{(0)}) = \lim_{k \rightarrow \infty} \dot{\rho}_k(w^{(0)})$, равный $\tilde{\rho}_\infty(u^{(0)})$. Следовательно,

$$\tilde{v}(u^{(0)}) = \dot{v}(w^{(0)}), \quad (1.7)$$

где

$$\dot{v}(w^{(0)}) = \begin{cases} \infty, & \text{если } w^{(1)} = 0, \\ -\ln \dot{\rho}_\infty(w^{(0)}), & \text{если } w^{(1)} \neq 0. \end{cases} \quad (1.8)$$

Преобразуем функцию \dot{v} . Пусть $\{e_i, i = 1, 2, \dots, n+1\}$ — ортонормированная система

собственных векторов оператора C . Выбрав их в качестве базиса, отождествим пространство E с арифметическим пространством R^{n+1} . Обозначим через

$$\bar{S} = \left\{ x = (x_1, \dots, x_n) \middle| \sum_{i=1}^n x_i \leq 1, x_i \geq 0, i = 1, 2, \dots, n \right\}$$

стандартный симплекс пространства R^n и рассмотрим отображение $\chi: R^{n+1} \setminus \{0\} \rightarrow \bar{S}$, заданное формулой $x_i = w_i^2 / \sum_{j=1}^{n+1} w_j^2$, $i = 1, \dots, n$.

Сужение χ_+ этого отображения на множестве единичных векторов с неотрицательными компонентами

$$\pi^+ = \left\{ w = (w_1, \dots, w_{n+1}) \middle| \sum_{j=1}^{n+1} w_j^2 = 1, w_j \geq 0, j = 1, \dots, n+1 \right\}$$

есть биекция, поэтому на \bar{S} определена функция $v(x) = \dot{v}(\chi_+^{-1}(x))$. Поскольку $\dot{v}(w) = v(\chi(w))$ для $w \in R^{n+1} \setminus \{0\}$, из равенства (1.7) следует, что

$$\tilde{v}(u^{(0)}) = v(\chi(C^{0,5}D^{0,5}(u^{(0)} - u^*))). \quad (1.9)$$

Таким образом, исследование функции \tilde{v} сводится к изучению функции v , которая и является основным предметом исследования данной работы. Эта функция v может быть определена, как и функции \tilde{v} и \dot{v} , с помощью некоторого итерационного процесса.

Обозначим через $S_1 = (1, 0, \dots, 0)$, $S_2 = (0, 1, 0, \dots, 0)$, ..., $S_n = (0, \dots, 0, 1)$, $S_{n+1} = (0, \dots, 0)$ вершины симплекса \bar{S} , а через $S_\omega = \bar{S} \setminus \{S_1, \dots, S_{n+1}\}$ симплекс \bar{S} без вершин. Пусть $\lambda_1 < \dots < \lambda_{n+1}$ — собственные значения оператора C (предполагается, что оператор $B^{-1}A$, а следовательно, и оператор C обладают только простыми собственными значениями).

Определим отображение $T: S_\omega \rightarrow S_\omega$ по формуле $\hat{x} = Tx$, где $x = (x_1, \dots, x_n)$, $x_{n+1} = 1 - x_1 - \dots - x_n$, $\mu(x) = \sum_{i=1}^{n+1} \lambda_i x_i$, $\beta(x) = \sum_{i=1}^{n+1} (\mu(x) - \lambda_i)^2 x_i$, $\hat{x}_i = (\mu(x) - \lambda_i)^2 x_i / \beta(x)$, $i = 1, \dots, n$, $\hat{x} = (\hat{x}_1, \dots, \hat{x}_n)$. Расширим, далее, отображение T на \bar{S} , положив $Tx = S_i$, если $x = S_i$, $i = 1, 2, \dots, n+1$, и $Tx = \hat{x}$, если $x \in S_\omega$.

Итерационный процесс $x^{(k+1)} = Tx^{(k)}$, $k = 0, 1, \dots$, тесно связан с итерационным процессом (1.5), (1.6), а именно, если $x^{(0)} = \chi(w^{(0)}) \in S_\omega$, то

$$x^{(k)} = \chi(w^{(k)}), \quad k = 1, 2, \dots, \quad (1.10)$$

поэтому последовательность

$$\rho_k(x^{(0)}) = \sqrt{\sum_{i=1}^{n+1} \lambda_i^{-1} (1 - \lambda_i / \mu(x^{(k)}))^2 x_i^{(k)} / \sum_{i=1}^{n+1} \lambda_i^{-1} x_i^{(k)}}$$

совпадает при $x^{(0)} = \chi(w^{(0)}) \in S_\omega$ с последовательностью $\rho_k(w^{(0)})$. Но тогда существует предел $\rho_\infty(x^{(0)}) = \lim_{k \rightarrow \infty} \rho_k(x^{(0)})$ и

$$\nu(x^{(0)}) = \begin{cases} \infty, & \text{если } x^{(0)} \notin S_\omega, \\ -\ln \rho_\infty(x^{(0)}), & \text{если } x^{(0)} \in S_\omega. \end{cases} \quad (1.11)$$

Таким образом, функция ν задается формулой, подобной формулам (1.4), (1.8). Для ее изучения воспользуемся результатами исследования асимптотического поведения метода наискорейшего спуска, проведенного в работе [8].

Пусть $1 \leq i_1 < \dots < i_m \leq n+1$. Обозначим через $\bar{S}_{i_1 \dots i_m}$ грань симплекса \bar{S} с вершинами S_{i_1}, \dots, S_{i_m} , через

$$S_{i_1 \dots i_m} = \left\{ x \left| x = \alpha_1 S_{i_1} + \dots + \alpha_m S_{i_m}, \alpha_p > 0, p = 1, \dots, m, \sum_{p=1}^m \alpha_p = 1 \right. \right\}$$

внутренность этой грани, через $S = S_{1, \dots, n+1}$ внутренность симплекса \bar{S} , а через $\partial S = \bar{S} \setminus S$ границу симплекса \bar{S} . Из определения отображения T следует, что $T\bar{S}_{i_1 \dots i_m} \subseteq \bar{S}_{i_1 \dots i_m}$ и, кроме того, неподвижные точки отображения T^2 образуют множество $\bigcup_{1 \leq i < j \leq n+1} \bar{S}_{ij}$.

Из соотношения (1.10) и результатов работы [8] вытекает такое свойство отображения T : если $x \in S_{i_1 \dots i_m}$, то последовательности $\{T^{2k}x, k = 0, 1, \dots\}$, $\{T^{2k+1}x, k = 0, 1, \dots\}$ сходятся и их пределы являются неподвижными точками отображения T^2 :

$$x^\infty = \lim_{k \rightarrow \infty} T^{2k}x \in S_{i_1 i_m}, \quad \hat{x}^\infty = \lim_{k \rightarrow \infty} T^{2k+1}x = Tx^\infty \in S_{i_1 i_m}. \quad (1.12)$$

Таким образом, если обозначить $T^\infty x = \lim_{k \rightarrow \infty} T^{2k}x$, то из соотношений (1.12) следует, что на множестве S_ω определены функции ξ , i , j такие, что для любого $x \in S_\omega$ имеют место равенства

$$x^\infty = T^\infty x = \xi(x)S_{i(x)} + (1 - \xi(x))S_{j(x)}, \quad \hat{x}^\infty = Tx^\infty = (1 - \xi(x))S_{i(x)} + \xi(x)S_{j(x)}, \quad (1.13)$$

где $0 < \xi(x) < 1$, $1 \leq i(x) < j(x) \leq n+1$. Кроме того, если определить на S_ω функцию ρ :

$$\rho(x) = \sqrt{\sum_{i=1}^{n+1} \lambda_i^{-1} (1 - \lambda_i/\mu(x))^2 x_i / \sum_{i=1}^{n+1} \lambda_i^{-1} x_i},$$

где $x_{n+1} = 1 - x_1 - \dots - x_n$, $\mu(x) = \sum_{i=1}^{n+1} \lambda_i x_i$, то из монотонности последовательности $\rho_k(x^{(0)})$ и соотношений (1.13) следует, что

$$\rho(x) \leq \rho(Tx) \leq \dots \leq \rho(T^k x) \leq \dots \underset{k \rightarrow \infty}{\rightarrow} \rho_\infty(x) = \rho(x^\infty) = \rho(Tx^\infty),$$

$$\rho_\infty(x) = \gamma(x)/\sqrt{\gamma^2(x) + \lambda_{i(x)}\lambda_{j(x)}} \quad \forall x \in S_\omega, \quad (1.14)$$

где $\gamma(x) = (\lambda_{j(x)} - \lambda_{i(x)})\sqrt{\xi(x)(1-\xi(x))}$. В частности, $v(x) = v(T^k x) = v(x^\infty) \quad \forall k = 1, 2, \dots$

Наиболее простое выражение функция v имеет при $n = 1$. В этом случае $\bar{S} = [0, 1]$, $S_1 = 1$, $S_2 = 0$, $S_\omega =]0, 1[$. Предположим, что $x = x_1 \in S_\omega$. Тогда $\hat{x} = Tx = 1 - x$, $T\hat{x} = x$, поэтому $x^\infty = x$, $\xi(x) = x$, $i(x) = 1$, $j(x) = 2$. Из соотношений (1.11), (1.14) получаем

$$\rho_\infty(x) = \rho(x) = (\lambda_2 - \lambda_1)\sqrt{x(1-x)}/\sqrt{(\lambda_2 - \lambda_1)^2 x(1-x) + \lambda_1 \lambda_2},$$

$$v(x) = \begin{cases} \infty, & \text{если } x \in \{0, 1\}, \\ -\ln \rho(x), & \text{если } x \in]0, 1[. \end{cases} \quad (1.15)$$

Из формул (1.14) несложно также найти $\min_{\bar{S}} v(x)$. Действительно, поскольку

$$\max_{S_\omega} \gamma(x) = (\lambda_{n+1} - \lambda_1) \max_{\xi \in]0, 1[} \sqrt{\xi(1-\xi)} = \frac{\lambda_{n+1} - \lambda_1}{2}$$

и достигается при $x^* = (0, 5; 0; \dots) \in S_{1,n+1}$, существуют

$$\max_{S_\omega} \rho_\infty(x) = \rho_{\max} = \frac{\lambda_{n+1} - \lambda_1}{\lambda_{n+1} + \lambda_1}, \quad \min_{\bar{S}} v(x) = v_{\min} = -\ln \rho_{\max} \quad (1.16)$$

и также достигаются в точке x^* .

В общем случае, при $n \geq 2$, функция v имеет сложный нелинейный характер и получить для нее аналитическое выражение не удается. В данной статье рассмотрены следующие две задачи:

- 1) определить существенную (относительно меры Лебега) область значений функции v ;
- 2) охарактеризовать область непрерывности функции v .

Полученные результаты с помощью соотношения (1.9) естественным образом переносятся на асимптотическую скорость сходимости метода \tilde{v} .

2. Существенная область значений асимптотической скорости. Здесь и в дальнейшем будем предполагать, что $\min_{i=2, \dots, n} |(\lambda_1 + \lambda_{n+1})/2 - \lambda_i|$ достигается лишь на одном индексе i (который обозначим через i^0) и $\lambda \equiv \lambda_{i^0} \leq (\lambda_1 + \lambda_{n+1})/2$ (это предположение не ограничивает общность результатов, но упрощает запись).

Обозначим $\gamma = \lambda_1 \lambda_{n+1} / (\lambda(\lambda_1 + \lambda_{n+1} - \lambda))$, $\rho_{\max} = (\lambda_{n+1} - \lambda_1) / (\lambda_{n+1} + \lambda_1)$, $v_{\min} = -\ln \rho_{\max}$, $\rho_{\min} = \sqrt{(1-\gamma)/(1+\gamma)}$, $v_{\max} = -\ln \rho_{\min}$, $\Delta = [v_{\min}, v_{\max}]$, $\bar{\Delta} = [v_{\min}, v_{\max}]$.

Пусть x — произвольная точка симплекса \bar{S} . Рассмотрим итерационную последователь-

ность $x^{(k)} = (x_{1k}, \dots, x_{nk}) = T^k x$, $k = 0, 1, \dots$. Будем говорить, что i -я компонента точки x не вырождается, если для каждого конечного $k = 0, 1, \dots$ имеем $x_{ik} > 0$.

Обозначим через $I(x)$ совокупность индексов невырождающихся компонент (кроме 1), т. е. $I(x) = \{i \mid i > 1, x_{ik} > 0 \quad \forall k = 0, 1, \dots\}$. Нам потребуются также множества

$$S^* = \{x \in \bar{S} \mid 0 < x_1, x_1 + \dots + x_n < 1\}, \quad S_* = \bar{S} \setminus S^*,$$

$$U_i = \{x \in S^* \mid i \in I(x)\}, \quad i = 2, 3, \dots, n.$$

Очевидно, что

$$S \subseteq S^* \subseteq \bar{S}, \quad S_* \subseteq \partial S, \quad TS^* = S^*, \quad TS_* = S_*, \quad T^\infty S^* = S_{1,n+1}. \quad (2.1)$$

Кроме того, обозначим $U = \bigcap_{i=2}^n U_i$, $V = \bar{S} \setminus U$. Множество U состоит из точек симплекса, у которых нет вырождающихся компонент. Множество V , напротив, состоит из точек симплекса, которые имеют хотя бы одну вырождающуюся компоненту. Из определения отображения T следует, что

$$V = \bigcup_{k=0}^{\infty} \bigcup_{i=1}^{n+1} V_{ik}, \quad (2.2)$$

где V_{i0} , $i = 1, 2, \dots, n$, — множество точек симплекса, у которых i -я компонента равна 0, $V_{(n+1)0}$ — множество точек, у которых $x_{n+1} = 1 - x_1 - \dots - x_n = 0$, а множество V_{ik} с $k > 0$ состоит из точек x , для которых $T^{k-1}x \in U$, но $x_{ik} = 0$.

Обозначим через ϑ меру Лебега на R^n .

Лемма 2.1. Если $n \geq 1$, то $\vartheta(V) = 0$.

Доказательство. Из определения отображения T следует, что множество V_{ik} является подмножеством множества Φ_{ik} нулей некоторого многочлена $P_{ik}(x_1, \dots, x_n) \not\equiv 0$ от n переменных. Используя теорему Фубини, имеем $\vartheta(\Phi_{ik}) = 0$, поэтому $\vartheta(V_{ik}) \leq \vartheta(\Phi_{ik}) = 0$. Утверждение леммы вытекает теперь из разложения (2.2).

Лемма доказана.

Следствие 2.1. Множество U всюду плотно в симплексе \bar{S} .

Введем следующие обозначения:

$$\mu_k(x) = \mu(x^{(k)}), \quad \mu_\infty(x) = \mu(x^\infty), \quad \hat{\mu}_\infty(x) = \mu(Tx^\infty),$$

$$\rho_{ik}(x) = |(1 - \lambda_i/\mu_{k+1}(x))(1 - \lambda_i/\mu_k(x))|^{0.5}, \quad \rho_{i\infty}(x) = |(1 - \lambda_i/\hat{\mu}_\infty(x))(1 - \lambda_i/\mu_\infty(x))|^{0.5},$$

$$q_{ik}(x) = \rho_{ik}(x)/\rho_{1k}(x), \quad i = 1, \dots, n.$$

Из соотношений (1.12), (1.14) следует, что для любых $x \in S^*$ и $i \in I(x)$

$$\rho_{i\infty}(x) \leq \rho_{1\infty}(x) = \rho_\infty(x), \quad (2.3)$$

$$\prod_{k=0}^m q_{i,2k}(x) \rightarrow 0 \quad \text{при} \quad m \rightarrow \infty. \quad (2.4)$$

Кроме того, из (2.1) следует, что имеет место равенство

$$\mu_\infty(x) + \hat{\mu}_\infty(x) = \lambda_1 + \lambda_{n+1} \quad \forall x \in S^*. \quad (2.5)$$

Из (2.3), (2.5) следует, что выполняются неравенства

$$\rho_{i^0,\infty}(x) \leq \rho_{1\infty}(x), \quad \rho_{i\infty}(x) < \rho_{1\infty}(x) \quad \forall x \in U_{i^0}, \quad i \in \overline{2,n} \setminus \{i^0\}, \quad (2.6)$$

причем для любого $x \in S^*$ неравенства $\rho_{i^0,\infty}(x) < \rho_{1\infty}(x)$, $\rho_{i^0,\infty}(x) \leq \rho_{1\infty}(x)$ имеют место тогда и только тогда, когда $v(x) \in \Delta$, $v(x) \in \bar{\Delta}$ соответственно, т. е.

$$\rho_{i^0,\infty}(x) < \rho_{1\infty}(x) \sim v(x) \in \Delta, \quad \rho_{i^0,\infty}(x) \leq \rho_{1\infty}(x) \sim v(x) \in \bar{\Delta}, \quad (2.7)$$

где \sim — знак эквивалентности.

Определим множества $M = \{x \in S^* \mid v(x) \in \Delta\}$, $\bar{M} = \{x \in S^* \mid v(x) \in \bar{\Delta}\}$.

Лемма 2.2. Если $n \geq 2$, то имеют место включения $U \subseteq U_{i^0} \subseteq \bar{M}$.

Доказательство следует непосредственно из соотношений (2.6), (2.7).

Множество M характеризуется тем, что множество $T^\infty(M)$ состоит из точек притяжения. А именно, справедлива следующая лемма.

Лемма 2.3. Если x принадлежит M , то для любой сколь угодно малой окрестности $O_1(x^\infty)$ точки $x^\infty = T^\infty x$ существуют окрестность $O_2(x^\infty)$ этой же точки и число $q < 1$ такие, что для любых $k = 0, 1, \dots$ и $y \in O_2(x^\infty)$ имеют место $T^{2k}y \in O_1(x^\infty)$, $h(T^{2k}y) \equiv y_{2,2k} + y_{3,2k} + \dots + y_{n,2k} \leq q^k$ (под окрестностью $O(x)$ точки $x \in \bar{S}$ понимаем ее окрестность в топологии симплекса \bar{S}).

Доказательство. Положим $\rho_i(y) = |(1 - \lambda_i/\mu(Ty))(1 - \lambda_i/\mu(y))|^{0.5}$, $i = 1, \dots, n$. По условию $x \in M$, следовательно, $V(x) \in \Delta$ и в силу (2.7) $\rho_{i^0,\infty}(x) < \rho_{1\infty}(x)$. Но тогда из (2.6) вытекает, что $\rho_{i,\infty}(x) < \rho_{1\infty}(x)$, $i = 2, 3, \dots, n$. Поскольку $\rho_{i,\infty}(x) = \rho_i(x^\infty)$, то

$$\rho_i(x^\infty) < \rho_1(x^\infty), \quad i = 2, 3, \dots, n. \quad (2.8)$$

Отображение T непрерывно в точке x^∞ , поэтому в x^∞ непрерывны функции $\rho_i(y)$, $i = 1, \dots, n$. Из (2.8) следует существование окрестности $O(x^\infty)$ и чисел $m > 0$, $q < 1$ таких, что имеют место неравенства

$$h(T^2y) \leq qh(y), \quad \|T^2y - y\| \leq mh(y) \quad \forall y \in O(x^\infty). \quad (2.9)$$

Без ограничения общности можно считать, что $O_1(x^\infty) \equiv O(\varepsilon, x^\infty) \subseteq O(x^\infty)$. Положим $\delta = \varepsilon(1-q)/(nm+1)$. Из оценок (2.9) следует, что число q и окрестность $O_2(x^\infty) \equiv O(\delta, x^\infty)$ удовлетворяют условиям леммы.

Лемма доказана.

Следствие 2.2. *Если x принадлежит M , то для любых сколь угодно малых окрестностей $O_1(x^\infty)$ и $O(Tx^\infty)$ соответственно точек x^∞ и Tx^∞ существует окрестность $O_2(x^\infty)$ такая, что $T^k O_2(x^\infty) \subseteq O_1(x^\infty) \cup O(Tx^\infty)$, $k = 0, 1, \dots$.*

Лемма 2.4. *Если $n \geq 2$, то множество M является открытым в топологии симплекса \bar{S} .*

Доказательство. Пусть x принадлежит M . Тогда и $x^\infty = T^\infty x$ принадлежит M . Запишем точку x^∞ в координатной форме: $x^\infty = (x_1^\infty, 0, \dots, 0)$. Аналогично (1.15) получаем

$$v(x^\infty) = -\ln \rho(x_1^\infty), \quad (2.10)$$

$$\rho(x_1^\infty) = (\lambda_{n+1} - \lambda_1)\sqrt{x_1^\infty(1-x_1^\infty)}/\sqrt{(\lambda_{n+1} - \lambda_1)^2 x_1^\infty(1-x_1^\infty) + \lambda_1 \lambda_{n+1}}.$$

Поскольку x^∞ принадлежит M , из равенства (2.10) вытекает существование $\varepsilon > 0$ такого, что точка $(x_1^\infty + t, 0, \dots, 0) \in M$ при $|t| < \varepsilon$. Положим $O_1(x^\infty) \equiv O(\varepsilon, x^\infty)$. В силу леммы 2.3 существует окрестность $O_2(x^\infty)$ такая, что $T^\infty O_2(x^\infty) \subseteq O_1(x^\infty) \cap S_{1,n+1} \subseteq M$. Следовательно, $O_2(x^\infty) \subseteq M$.

Поскольку $T^{2k}x \rightarrow x^\infty$ при $k \rightarrow \infty$, для некоторого числа $m \in \{0, 1, \dots\}$ имеет место соотношение $x^{(2m)} = T^{2m}x \in O_2(x^\infty)$. Так как оператор T^{2m} непрерывен на множестве S_ω , для некоторой окрестности $O(x)$ точки x верно включение $T^{2m}O(x) \subseteq O_2(x^\infty)$. Но тогда $T^{2m}O(x) \subseteq M$, следовательно, $O(x) \subseteq M$.

Лемма доказана.

Основным результатом данного пункта является следующая теорема.

Теорема 2.1. *Если $n \geq 2$, то $\text{vrai } \min_{\bar{S}} v(x) = v_{\min}$, $\text{vrai } \max_{\bar{S}} v(x) = v_{\max}$, а $\bar{\Delta}$ — единственная область значений функции v на \bar{S} .*

Доказательство. Покажем сначала, что $\text{vrai } \min_{\bar{S}} v(x) = v_{\min}$. Для этого достаточно установить, что $\vartheta(X(v_{\min})) = 0$ и $\vartheta(X(\alpha)) > 0 \quad \forall \alpha > v_{\min}$, где $X(\alpha) = \{x \in \bar{S} \mid v(x) < \alpha\}$, а ϑ — мера Лебега на R^n .

Действительно, в силу (1.16) имеем $\min_{\bar{S}} v(x) = v_{\min}$, следовательно, $X(v_{\min}) = \emptyset$ и

$\vartheta(X(v_{\min})) = 0$. Далее, положим $v_0(x) = -\ln \rho(x)$, $X_0(\alpha) = \{x \in \bar{S} \mid v_0(x) < \alpha\}$. Поскольку $\rho(x) \leq \rho_\infty(x)$, то $X_0(\alpha) \subseteq X(\alpha)$. При $\alpha > v_{\min}$ получаем $\vartheta(X_0(\alpha)) > 0$, следовательно, $\vartheta(X(\alpha)) > 0$, что и требовалось установить.

Покажем теперь, что $\max_{\bar{S}} v(x) = v_{\max}$. Для этого достаточно установить, что

$$\vartheta(X(v_{\max})) = 0 \text{ и } \vartheta(X(\alpha)) > 0 \quad \forall \alpha < v_{\max}, \text{ где } X(\alpha) = \{x \in \bar{S} \mid v(x) > \alpha\}.$$

Действительно, если x принадлежит $X(v_{\max})$, то $v(x) > v_{\max}$, следовательно, $v(x) \notin \bar{\Delta}$ и $x \notin \bar{M}$. Но тогда из леммы 2.2 вытекает, что $x \notin U$, т. е. $x \in V$ — вырождающаяся точка. В силу леммы 2.1 $\vartheta(V) = 0$, следовательно, и $\vartheta(X(v_{\max})) = 0$.

Предположим, наконец, что $\alpha < v_{\max}$. Тогда существует отрезок $[x, y] \subseteq S_{1,n+1}$ такой, что $v([x, y]) \subseteq [\alpha, v_{\max}]$ (т. е. $[x, y] \subseteq X(\alpha) \cap M$). Положим $x^\infty = (x + y)/2$ и выберем окрестность $O_1(x^\infty)$ точки x^∞ из условия $O_1(x^\infty) \cap S_{1,n+1} \subseteq [x, y]$. В силу леммы 2.3 существует окрестность $O_2(x^\infty)$ точки x^∞ такая, что $T^\infty O_2(x^\infty) \subseteq O_1(x^\infty) \cap S_{1,n+1}$, следовательно, $T^\infty O_2(x^\infty) \subseteq [x, y] \subseteq X(\alpha)$. Но тогда $O_2(x^\infty) \subseteq X(\alpha)$ и $\vartheta(X(\alpha)) > 0$.

Теорема доказана.

Следствие 2.3. Существенной (по мере Лебега) областью значений асимптотической скорости сходимости \tilde{v} двухслойного метода является $\bar{\Delta}$.

3. Область непрерывности асимптотической скорости. Обозначим через N множество точек симплекса \bar{S} , в которых функция v непрерывна, а через $P = \bar{S} \setminus N$ множество ее точек разрыва.

Лемма 3.1. Если $n \geq 2$, то $M \subseteq N$.

Доказательство. Предположим, что x принадлежит M . Покажем, что отображение T^∞ непрерывно в точке x , тогда в x , очевидно, непрерывна и функция v .

Выберем произвольную окрестность $O_1(x^\infty)$ точки $x^\infty = T^\infty x$. В силу леммы 2.3 существует окрестность $O_2(x^\infty)$ такая, что

$$T^\infty O_2(x^\infty) \subseteq O_1(x^\infty). \quad (3.1)$$

Поскольку $T^{2k}x \rightarrow x^\infty$ при $k \rightarrow \infty$, для некоторого $m \in \{0, 1, \dots\}$ имеем $x^{(2m)} = T^{2m}x \in O_2(x^\infty)$. В силу непрерывности оператора T^{2m} на S_ω существует окрестность $O(x)$ такая, что $T^{2m}O(x) \subseteq O_2(x^\infty)$. Но тогда из (3.1) следует, что $T^\infty O(x) \subseteq O_1(x^\infty)$.

Лемма доказана.

Обозначим $\varepsilon_{2k}(x) = \mu_\infty(x) - \mu_{2k}(x)$, $\varepsilon_{2k+1}(x) = \mu_{2k+1}(x) - \hat{\mu}_\infty(x)$, $k = 0, 1, \dots$.

Лемма 3.2. Если $n \geq 2$, x принадлежит U_{i^0} и

$$\rho_{1\infty}(x) = \rho_{i^0, \infty}(x), \quad (3.2)$$

то существует номер $\tilde{k}(x)$ такой, что $\varepsilon_{\tilde{k}(x)}(x) > \varepsilon_{\tilde{k}(x)+1}(x) > \varepsilon_{\tilde{k}(x)+2}(x) > \dots \rightarrow 0$.

Доказательство. Обозначим $x_{n+1,k} = 1 - x_{1k} - \dots - x_{nk}$, $\mu_k = \mu_k(x)$, $\varepsilon_k = \varepsilon_k(x)$, $\mu = \mu_\infty(x)$, $\hat{\mu} = \hat{\mu}_\infty(x)$, $h_k = h_k(x) = \sum_{i=2}^n x_{ik}$, $\sigma_k = \sigma_k(x) \equiv \sum_{i=2}^n \lambda_i x_{ik}/h_k$, $k = 1, 2, \dots$. Так как $x_{1k} + x_{n+1,k} = 1 - h_k$, $\lambda_1 x_{1k} + \lambda_{n+1} x_{n+1,k} = \mu_k - \sigma_k h_k$, то

$$\begin{aligned} x_{1k} &= (\lambda_{n+1} - \mu_k - h_k(\lambda_{n+1} - \sigma_k)) / (\lambda_{n+1} - \lambda_1), \\ x_{n+1,k} &= (\mu_k - \lambda_1 - h_k(\sigma_k - \lambda_1)) / (\lambda_{n+1} - \lambda_1). \end{aligned} \quad (3.3)$$

Рассмотрим функцию

$$Y_k(t) = \sum_{i=1}^{n+1} (\lambda_i - t)(\lambda_i - \mu_k)^2 x_{ik}, \quad \lambda_1 \leq t \leq \lambda_{n+1}.$$

Выразив x_{1k} и $x_{n+1,k}$ через правые части (3.3), запишем $Y_k(t)$ в виде $Y_k(t) = \sum_{p=1}^4 Y_k^{(p)}(t)$, где

$$Y_k^{(1)}(t) = (\lambda_1 - t)(\lambda_1 - \mu_k)^2 \frac{\lambda_{n+1} - \mu_k}{\lambda_{n+1} - \lambda_1} + (\lambda_{n+1} - t)(\lambda_{n+1} - \mu_k)^2 \frac{\mu_k - \lambda_1}{\lambda_{n+1} - \lambda_1},$$

$$Y_k^{(2)}(t) = (\lambda - t)(\lambda - \mu_k)^2 x_{t^0 k},$$

$$Y_k^{(3)}(t) = (t - \lambda_1)(\lambda_1 - \mu_k)^2 h_k \frac{\lambda_{n+1} - \sigma_k}{\lambda_{n+1} - \lambda_1} + (t - \lambda_{n+1})(\lambda_{n+1} - \mu_k)^2 h_k \frac{\sigma_k - \lambda_1}{\lambda_{n+1} - \lambda_1},$$

$$Y_k^{(4)}(t) = \sum_{i=2, i \neq t^0}^n (\lambda_i - t)(\lambda_i - \mu_k)^2 x_{ik}$$

и $\lambda = \lambda_{t^0}$. Предположим, для определенности, что $\mu < \hat{\mu}$, и выберем непересекающиеся окрестности $O(\mu)$, $O(\lambda)$, $O(\hat{\mu})$ так, чтобы $\lambda_1 + \lambda_{n+1} - \lambda \notin O(\hat{\mu})$. Это всегда возможно, так как $\lambda \leq (\lambda_1 + \lambda_{n+1})/2$, а в силу (2.5) имеет место равенство $\mu + \hat{\mu} = \lambda_1 + \lambda_{n+1}$, следовательно, $\mu < \lambda \leq \lambda_1 + \lambda_{n+1} - \lambda < \hat{\mu}$.

Поскольку x принадлежит U_{t^0} , из условия (3.2) следует существование такого четного числа $\tilde{k} = \tilde{k}(x)$, что для любого $k \geq \tilde{k}$ имеют место соотношения

$$\mu_k \in \begin{cases} O(\mu), & \text{если } k \text{ — четное,} \\ O(\hat{\mu}), & \text{если } k \text{ — нечетное,} \end{cases}$$

$$\sigma_k \in O(\lambda),$$

$$\operatorname{sign}(Y_k^{(2)}(t) + Y_k^{(4)}(t)) = \operatorname{sign} Y_k^{(2)}(t) \quad \forall t \in O(\mu) \cup O(\hat{\mu}),$$

$$|Y_k^{(3)}(\lambda_1)| < Y_k^{(1)}(\lambda_1).$$

Тогда при $k \geq \tilde{k}$ получаем равенство

$$\operatorname{sign}(Y_k^{(3)}(\lambda_1 + \lambda_{n+1} - \mu_k)) = \operatorname{sign} \left[1 - \frac{(\lambda_{n+1} - \mu_k)(\sigma_k - \lambda_1)}{(\mu_k - \lambda_1)(\lambda_{n+1} - \sigma_k)} \right] = \begin{cases} -1, & \mu_k \in O(\mu), \\ 1, & \mu_k \in O(\hat{\mu}). \end{cases}$$

Покажем, что $\varepsilon_{\tilde{k}} > \varepsilon_{\tilde{k}+1}$. Действительно, $\mu_{\tilde{k}+1}$ является единственным корнем уравнения $Y_{\tilde{k}}(t) = 0$. Поскольку $Y_{\tilde{k}}^{(1)}(\lambda_1 + \lambda_{n+1} - \mu_{\tilde{k}}) = 0$, $Y_{\tilde{k}}^{(2)}(\lambda_1 + \lambda_{n+1} - \mu_{\tilde{k}}) < 0$, $Y_{\tilde{k}}^{(3)}(\lambda_1 + \lambda_{n+1} - \mu_{\tilde{k}}) < 0$, то $Y_{\tilde{k}}(\lambda_1 + \lambda_{n+1} - \mu_{\tilde{k}}) < 0$. Учитывая, что $Y_{\tilde{k}}(\lambda_1) > 0$ и $\mu + \hat{\mu} = \lambda_1 + \lambda_{n+1}$, имеем $\mu_{\tilde{k}+1} < \lambda_1 + \lambda_{n+1} - \mu_{\tilde{k}}$, т. е. $\varepsilon_{\tilde{k}+1} < \varepsilon_{\tilde{k}}$. Аналогично получаем $Y_{\tilde{k}+1}(\lambda_1 + \lambda_{n+1} - \mu_{\tilde{k}+1}) > 0$, $Y_{\tilde{k}+1}(\lambda_1) > 0$, следовательно, $\mu_{\tilde{k}+2} > \lambda_1 + \lambda_{n+1} - \mu_{\tilde{k}+1}$, т. е. $\varepsilon_{\tilde{k}+2} < \varepsilon_{\tilde{k}+1}$ и т. д.

Лемма доказана.

Лемма 3.3. Если $n \geq 2$, то $U_{i^0} \subseteq M$.

Доказательство. Предположим противное, т. е. $U_{i^0} \not\subseteq M$. Так как в силу леммы 2.2 $U_{i^0} \subseteq \bar{M}$, то существует точка $x \in U_{i^0}$, для которой $v(x) = v_{\max}$. Для этой точки выполнено равенство (3.2) (см. соотношения (2.7)).

Опустим x и обозначим $\mu = \mu_{\infty}(x)$, $\hat{\mu} = \hat{\mu}_{\infty}(x)$ (для определенности предполагаем, что $\mu < \hat{\mu}$). В силу леммы 3.2 начиная с некоторого номера \tilde{k} имеют место равенства

$$\mu_{2k} = \mu - \varepsilon_{2k}, \quad \mu_{2k+1} = \hat{\mu} + \varepsilon_{2k+1}, \tag{3.4}$$

где $\varepsilon_{2\tilde{k}} > \varepsilon_{2\tilde{k}+1} > \varepsilon_{2\tilde{k}+2} \dots \rightarrow 0$.

Рассмотрим $\rho_{1,2k}^2$ и $\rho_{i^0,2k}^2$. Выражая μ_{2k} , μ_{2k+1} из (3.4), имеем

$$\begin{aligned} \rho_{1,2k}^2 &= \rho_{1,\infty}^2 + \varepsilon_{2k+1} \frac{\lambda_1(\mu - \lambda_1)}{\hat{\mu}^2 \mu} - \varepsilon_{2k} \frac{\lambda_1(\hat{\mu} - \lambda_1)}{\hat{\mu} \mu^2} + \alpha_{1,2k} \varepsilon_{2k}^2, \\ \rho_{i^0,2k}^2 &= \rho_{i^0,\infty}^2 + \varepsilon_{2k+1} \frac{\lambda(\lambda - \mu)}{\hat{\mu}^2 \mu} + \varepsilon_{2k} \frac{\lambda(\hat{\mu} - \lambda)}{\hat{\mu} \mu^2} + \alpha_{i^0,2k} \varepsilon_{2k}^2, \end{aligned} \tag{3.5}$$

где $\lambda = \lambda_{i^0}$, а величины $\alpha_{1,2k}$, $\alpha_{i^0,2k}$ равномерно ограничены по k . Поскольку $\mu < \lambda < \hat{\mu}$ и $\mu + \hat{\mu} = \lambda_1 + \lambda_{n+1}$, из (3.2), (3.4), (3.5) следует, что при достаточно больших k

$\rho_{1,2k} \leq \rho_{1,\infty} = \rho_{i^0,\infty} \leq \rho_{i^0,2k}$, а поэтому произведение $\prod_{k=0}^m q_{i^0,2k}(x)$ не сходится к нулю при $m \rightarrow \infty$, что противоречит свойству (2.4).

Лемма доказана.

Основным результатом данного пункта является следующая теорема.

Теорема 3.1. *Если $n \geq 2$, то $U \subseteq M \subseteq N \subseteq \bar{M}$, $P \subseteq V$, а функция v почти всюду (по мере Лебега) непрерывна на симплексе \bar{S} .*

Доказательство. Из лемм 3.1, 3.3 следует, что $U \subseteq M \subseteq N$. Покажем, что $N \subseteq \bar{M}$.

Действительно, пусть x принадлежит S_* . Если $x \in \{S_1, \dots, S_{n+1}\}$, то, очевидно, x принадлежит P ; в противном случае $T^\infty x \notin \bar{S}_{1,n+1}$. Поскольку S^* всюду плотно в \bar{S} , в любой окрестности точки x существует $y \in S^*$. В силу (2.1) $T^\infty y \in S_{1,n+1}$, следовательно, отображение T^∞ претерпевает разрыв в точке x и x принадлежит P . Таким образом, $S_* \subseteq P$ и $N \subseteq S^*$.

Предположим теперь, что существует x , принадлежащее $N \setminus \bar{M}$. Тогда $v(x) \notin \bar{\Delta}$ и существует окрестность O числа $v(x)$, не пересекающаяся с $\bar{\Delta}$. Поскольку множество U всюду плотно в \bar{S} (следствие леммы 2.1), в любой окрестности точки x существует $y \in U$. Но $U \subseteq M$, следовательно, $v(y) \in \Delta$, т. е. $v(y) \notin O$. Поэтому x принадлежит P , что противоречит предположению $x \in N \setminus \bar{M}$. Таким образом, $N \subseteq \bar{M}$.

Для доказательства того, что $P \subseteq V$, заметим, что $U \subseteq N$, следовательно, $P = \bar{S} \setminus N \subseteq \bar{S} \setminus U = V$.

Наконец, в силу леммы 2.1, $\vartheta(V) = 0$, поэтому $\vartheta(P) = 0$, т. е. функция v почти всюду (по мере Лебега) непрерывна на симплексе \bar{S} .

Теорема доказана.

Следствие 3.1. *Асимптотическая скорость сходимости \tilde{v} двухслойного метода почти всюду (по мере Лебега) непрерывна.*

Замечание 3.1. Из теоремы 3.1 вытекает следующее, по мнению авторов, интересное утверждение: если x — точка разрыва функции v , то итерационная последовательность $\{T^k x, k = 0, 1, \dots\}$ принадлежит, за исключением конечного числа начальных членов, некоторой грани симплекса \bar{S} .

Замечание 3.2. Теорема 3.1 характеризует область непрерывности функции v с точностью до множества $R = \bar{M} \setminus M$. Можно показать, что:

- 1) $R \subseteq V$, $\vartheta(R) = 0$;
- 2) если на множестве $R \cap S_{1,n+1}$ (состоящем из двух точек) функция v непрерывна, то она непрерывна на всем множестве R ;
- 3) функция v не дифференцируема на R .

1. Fletcher R. A limited memory steepest descent method // Math. Program. A. – 2012. – 135. – P. 413 – 436.
2. Roberta de Asmundis, Daniela di Serafino, Filippo Riccio, Gerardo Toraldo. On spectral properties of steepest descent methods // Optim. Methods and Software for Inverse Problems. – 2012. – P. 1 – 20.

3. *Kees van den Doel, Uri Ascher.* The chaotic nature of faster gradient descent methods. – Univ. British Columbia, Canada. – 2011. – P. 1 – 27.
4. *Narushima Y., Wakamatsu T., Yabe H.* Extended Barzilai – Borwein method for unconstrained minimization problems // *Pacif. J. Optim.* – 2010. – **6**, № 3. – P. 591 – 613.
5. *Andretta M., Birgin E. G., Martinez J. M.* Partial spectral projected gradient method with active-set strategy for linearly constrained optimization // *Numer. Algorithms.* – 2010. – **53**. – P. 23 – 52.
6. *Barzilai J., Borwein J. M.* Two-point step size gradient methods // *IMA J. Numer. Anal.* – 1988. – **8**. – P. 141 – 148.
7. *Самарский А. А., Николаев Е. С.* Методы решения сеточных уравнений. – М.: Наука, 1978. – 592 с.
8. *Akaike H.* On a successive transformation of probability distribution and its application to the analysis of the optimum gradient method // *Ann. Inst. Statist. Math. Tokyo.* – 1959. – **11**. – P. 1 – 16.

Получено 11.02.13