第四讲 线性方程组迭代方法

目录

https://math.ecnu.edu.cn/~jypan/Teaching/NA

4-4 共轭梯度法

4.4 共轭梯度法

https://math.ecnu.edu.cn/~jypan/Teaching/NA

（预处理）共轭梯度法是当前求解 **大规模（稀疏）对称正定** 方程组的首选方法

线性方程组与二次规划问题

定理 设 $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 对称正定，则 x_* 是 $Ax=b$ 的解当且仅当 x_* 是**最小化问题**

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} \boxed{\Phi(x) \triangleq \frac{1}{2}x^\intercal Ax - b^\intercal x}$$

的解，即 $\Phi(x)$ 的最小值点.　(板书)

$$\boxed{\text{求解 } Ax=b \quad \Longleftrightarrow \quad \text{计算 } \Phi(x) \text{ 的最小值点}}$$

求解最小化问题的线搜索方法

线搜索方法

求解最小化问题 $\min_{x\in\mathbb{R}^n} \Phi(x)$ 的一类常用方法是 **线搜索方法**:

给定初始值 $x^{(0)}$, 确定一个使得 $\Phi(x)$ 变小的方向 $p_1 \in \mathbb{R}^n$, 即 **下降方向**, 满足 $\|p_1\| = 1$, 然后计算步长 $\alpha_1 \in \mathbb{R}_+$, 使得 $\Phi(x)$ 沿该下降方向达到最小, 即

$$\boxed{x^{(1)} = x^{(0)} + \alpha_1 p_1, \quad \text{其中} \quad \alpha_1 = \operatorname*{argmin}_{\alpha>0} \Phi\big(x^{(0)} + \alpha p_1\big)}.$$

怎么计算步长

由于 A 对称正定, 直接计算可得

$$
\begin{aligned}
\Phi\left(x^{(0)}+\alpha p_1\right) &= \frac{1}{2}\left(x^{(0)}+\alpha p_1\right)^{\intercal} A\left(x^{(0)}+\alpha p_1\right) - b^{\intercal}\left(x^{(0)}+\alpha p_1\right) \\
&= \frac{1}{2}\alpha^2 p_1^{\intercal} A p_1 + \alpha p_1^{\intercal} A x^{(0)} + \frac{1}{2}\left(x^{(0)}\right)^{\intercal} A x^{(0)} - b^{\intercal} x^{(0)} - \alpha b^{\intercal} p_1 \\
&= \frac{1}{2}\alpha^2 p_1^{\intercal} A p_1 - \alpha p_1^{\intercal} r_0 + \Phi\left(x^{(0)}\right),
\end{aligned}
$$

其中 $r_0 = b - Ax^{(0)}$.

这是关于 α 的一元二次函数, 且二次项系数为正, 所以

$$
\alpha_1 = \operatorname*{argmin}_{\alpha>0} \Phi\left(x^{(0)}+\alpha p_1\right) = \frac{p_1^{\intercal} r_0}{p_1^{\intercal} A p_1}.
$$

4-4-1 最速下降法

根据多元函数的 Taylor 展开公式, 我们有

$$\Phi(x) = \Phi\big(x^{(0)}\big) + \big(x - x^{(0)}\big)^{\mathsf{T}} \nabla\Phi\big(x^{(0)}\big) + o\big(\|x - x^{(0)}\|\big).$$

记 p 为 $x - x^{(0)}$ 所在的方向, 即 $p = \dfrac{x - x^{(0)}}{\|x - x^{(0)}\|}$, 则

$$\big(x - x^{(0)}\big)^{\mathsf{T}} \nabla\Phi\big(x^{(0)}\big) = \|x - x^{(0)}\| \cdot p^{\mathsf{T}} \nabla\Phi\big(x^{(0)}\big).$$

因此, 只要满足 $p^{\mathsf{T}} \nabla\Phi\big(x^{(0)}\big) < 0$, 则 p 就是 下降方向.

最速下降法

最速下降方向与最速下降法

下降速度最快的方向 $\to p^{\mathsf{T}}\nabla\Phi\big(x^{(0)}\big)$ 最小.

由 Cauchy-Schwarz 不等式可知

$$\left|p^{\mathsf{T}}\nabla\Phi\big(x^{(0)}\big)\right| \le \|p\|\cdot\|\nabla\Phi\big(x^{(0)}\big)\|,$$

等号当且仅当 p 与 $\nabla\Phi\big(x^{(0)}\big)$ 共线时成立.

因此当 $p = -\dfrac{\nabla\Phi\big(x^{(0)}\big)}{\|\nabla\Phi\big(x^{(0)}\big)\|}$ 时, $p^{\mathsf{T}}\nabla\Phi\big(x^{(0)}\big)$ 达到最小.

我们称该下降方向为**最速下降方向**, 相应的线搜索方法为**最速下降法**.

由于最速下降方向就是 $\Phi(x)$ 在当前迭代点处的负梯度方向, 因此也称为**负梯度方向法**.

注: 讲义中 $p = -\dfrac{\nabla\Phi\big(x^{(0)}\big)}{\nabla\Phi\big(x^{(0)}\big)}$, 分母漏写了范数.

最速下降法的迭代格式

- 最速下降法的一般格式可表示为

$$x^{(k)} = x^{(k-1)} + \alpha_k p_k, \quad k = 1, 2, \ldots,$$

其中 $p_k = -\nabla\Phi\left(x^{(k-1)}\right) = b - Ax^{(k-1)} = r_{k-1}, \quad \alpha_k = \dfrac{p_k^\intercal r_{k-1}}{p_k^\intercal A p_k} = \dfrac{r_{k-1}^\intercal r_{k-1}}{r_{k-1}^\intercal A r_{k-1}}$

> 实际计算时, 我们无需对下降方向 p_k 进行单位化

算法 最速下降法 (Steepest Descent Algorithm)

1: 给定初值 $x^{(0)}$, 令 $k=1$
2: **while** not converge **do**
3: 　　计算负梯度方向 (残量) $r_{k-1} = b - Ax^{(k-1)}$ 和步长 $\alpha_k = (r_{k-1}^\intercal r_{k-1})/(r_{k-1}^\intercal A r_{k-1})$
4: 　　计算 $x^{(k)} = x^{(k-1)} + \alpha_k p_k$, 其中 $p_k = r_{k-1}$
5: 　　令 $k = k+1$
6: **end while**

最速下降法的收敛性

定理 设 $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 对称正定, 则对任意初值 $x^{(0)}$, 最速下降法都收敛, 且

$$\frac{\left\|x^{(k+1)} - x_*\right\|_A}{\left\|x^{(k)} - x_*\right\|_A} \leq \frac{\kappa - 1}{\kappa + 1},$$

其中 κ 为 A 的谱条件数, 范数 $\|x\|_A \triangleq \sqrt{x^\intercal Ax}$.

(留作课外自习, 可以参见矩阵计算或最优化方法的相关教材)

最速下降法举例

例 用最速下降法求解 $Ax=b$, 其中 $A=\begin{bmatrix}15 & 2\\ 2 & 15\end{bmatrix}$, $b=\begin{bmatrix}17\\17\end{bmatrix}$, 初值 $x^{(0)}=\begin{bmatrix}-0.5\\0\end{bmatrix}$.

k	x	relres
1	$[0.94896898, 1.06454864]$	3.54e-02
2	$[0.99757851, 0.99838567]$	1.61e-03
3	$[0.99991762, 1.00010420]$	5.71e-05
4	$[0.99999609, 0.99999739]$	2.61e-06
5	$[0.99999987, 1.00000017]$	9.21e-08

"relres" 表示相对残量

$$\text{relres}=\frac{\|b-Ax^{(k)}\|_2}{\|b-Ax^{(0)}\|_2}$$

(Iter_steepest_descent_01.m)

最速下降法的局部最优性

由步长的选取方法可知, 最速下降法的迭代解具有下面的最优性

$$
x^{(k)} = \underset{x \in x^{(k-1)} + \mathrm{span}\{p_k\}}{\operatorname{argmin}} \Phi(x)
$$

由于舍弃了 Taylor 展开式中的高阶项, 因此最速下降方向是局部最优的

4-4-2 共轭梯度法

最速下降法的不足

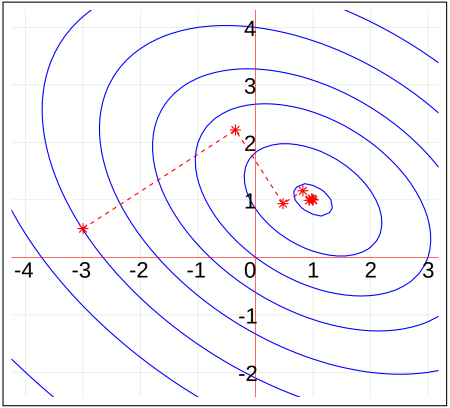
最速下降法每次选取下降方向时只考虑局部最优, 无法保证下降方向 $p_1, p_2, \ldots$ 线性无关, 这意味着迭代过程可能会出现 "之" 字型, 即同一个下降方向可能会多次出现, 这就会导致收敛速度变得非常缓慢.

最速下降法的不足

例 用最速下降法求解 $Ax=b$, 其中 $A=\begin{bmatrix}2 & 1\\ 1 & 3\end{bmatrix}$, $b=\begin{bmatrix}3\\ 4\end{bmatrix}$, 初值 $x^{(0)}=\begin{bmatrix}-3\\ 0.5\end{bmatrix}$.

k	x	relres
1	$[-0.3498, 2.2148]$	2.70e-01
2	$[0.4784, 0.9348]$	1.30e-01
3	$[0.8240, 1.1584]$	3.52e-02
4	$[0.9320, 0.9915]$	1.70e-02
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
14	$[1.0000, 1.0000]$	6.41e-07

(Iter_steepest_descent_02.m)



A-共轭

为了改善最速下降法的收敛性质, 需要对下降方向进行改进, 由此, **共轭方向法**应运而生.

定义 设 $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 对称正定, 若非零向量 $x, y \in \mathbb{R}^n$ 满足

$$y^\intercal A x = 0,$$

则称 x 和 y 是 A-共轭的, 也称 A-正交的.

为什么 A-共轭

为什么选取 A-共轭的向量作为下降方向

设 $p_1, p_2, \ldots, p_n$ 相互 A-共轭, 则 $p_1, p_2, \ldots, p_n$ 线性无关, 因此构成 $\mathbb{R}^n$ 的一组基.

对任意给定的初值 $x^{(0)}$, 我们可以设

$$x_* - x^{(0)} = \alpha_1 p_1 + \alpha_2 p_2 + \cdots + \alpha_n p_n.$$

两边分别左乘 $p_k^\intercal A$, 可得

$$\alpha_k = \frac{p_k^\intercal A\left(x_* - x^{(0)}\right)}{p_k^\intercal A p_k} = \frac{p_k^\intercal \left(b - Ax^{(0)}\right)}{p_k^\intercal A p_k}, \quad k = 1, 2, \ldots, n.$$

这意味着可以通过下降方向 $p_1, p_2, \ldots, p_n$ 和右端项 b, 以及 $x^{(0)}$ 将方程组的解表示出来.

如果采用一组正交基作为下降方向, 也可以得到类似结论, 但 α_i 的表达式中包含 x_*.

共轭方向法

考虑到算法的实用性, 当 n 很大时, 通常不需计算所有的 α_k, 而只要计算前面部分, 得到一个满足精度要求的近似解即可. 因此, 我们把 $x_* = x^{(0)} + \alpha_1 p_1 + \cdots$ 看作是一个迭代过程:

$$x^{(k)} = x^{(k-1)} + \alpha_k p_k, \quad k = 1, 2, \ldots.$$

共轭方向法

以相互 A-共轭的向量作为下降方向的线搜索方法就称为 **共轭方向法**.

- 改写 α_k 的计算公式: 由于 $x^{(k-1)} - x^{(0)} = \alpha_1 p_1 + \alpha_2 p_2 + \cdots + \alpha_{k-1} p_{k-1}$, 所以 $p_k^\intercal A\left(x^{(k-1)} - x^{(0)}\right) = 0$, 即 $p_k^\intercal A x^{(0)} = p_k^\intercal A x^{(k-1)}$, 因此

$$\alpha_k = \frac{p_k^\intercal\left(b - Ax^{(0)}\right)}{p_k^\intercal A p_k} = \frac{p_k^\intercal\left(b - Ax^{(k-1)}\right)}{p_k^\intercal A p_k} = \frac{p_k^\intercal r_{k-1}}{p_k^\intercal A p_k}.$$

共轭方向法的全局最优性

相比于最速下降法的局部最优性:

$$x^{(k)} = \operatorname*{argmin}_{x \in x^{(k-1)} + \mathrm{span}\{p_k\}} \Phi(x),$$

共轭方向法具有全局最优性.

定理 设 $x^{(k)}$ 是由共轭方向法得到的迭代解, 则

$$x^{(k)} = \operatorname*{argmin}_{x \in x^{(0)} + \mathrm{span}\{p_1, p_2, \ldots, p_k\}} \Phi(x).$$

(留作课外自习, 可以参见最优化方法的相关教材)

共轭方向法有限步终止性质: 若不考虑舍入误差, 则至多 n 次迭代后, $x^{(k)}$ 就是精确解.

共轭方向的构造方法

如何构造相互 A-共轭的下降方向

- 首先需要指出的是, 这样的向量组并不唯一.
  事实上, 与 Gram-Schmidt 正交化过程类似, 任何一组线性无关的向量组都可以构造出一组相互 A-共轭的向量组.
- 目前最成功的是共轭梯度 (Conjugate Gradient) 下降方向.
  它是在最速下降方向的基础上, 通过递推方法来构造的, 可以看作是将最速下降方向进行 A-共轭化, 或者是对最速下降方向的改进.

共轭梯度下降方向的构造

❶ 给定 $x^{(0)}$, 取 $\Phi(x)$ 在 $x^{(0)}$ 处的负梯度方向:

$$p_1 = -\nabla\Phi\big(x^{(0)}\big) = r_0 = b - Ax^{(0)}$$

❷ 以 p_1 为下降方向, 计算近似解 $x^{(1)}$:

$$x^{(1)} = x^{(0)} + \alpha_1 p_1, \text{ 其中 } \alpha_1 = \frac{p_1^\intercal r_0}{p_1^\intercal A p_1}$$

❸ 计算 $\Phi(x)$ 在 $x^{(1)}$ 处的负梯度方向: $-\nabla\Phi\big(x^{(1)}\big) = r_1 = b - Ax^{(1)} = r_0 - \alpha_1 A p_1$,

将其与 p_1 进行 A-共轭化, 得到下降方向 p_2:

$$p_2 = r_1 + \beta_1 p_1, \text{ 其中 } \beta_1 = -\frac{r_1^\intercal A p_1}{p_1^\intercal A p_1}$$

▶ 以此类推, 我们就可以得到相互 A-共轭的下降方向 $p_1, p_2, \ldots, p_k, \ldots$
该过程同时也把近似解 $x^{(k)}$ 和残量 r_k 计算出来了.

简化运算

在计算 p_{k+1} 时, 需要将 r_k 与所有 $p_1, p_2, \ldots, p_k$ 进行 A-共轭化, 计算量较大.

事实上, 由于 A 对称正定, 我们只需将 r_k 与 p_k 进行 A-共轭化即可, 即

$$p_{k+1} = r_k + \beta_k p_k, \quad \text{其中} \quad \beta_k = -\frac{r_k^\intercal A p_k}{p_k^\intercal A p_k}.$$

这样不仅可以简化计算, 同时可以证明 p_{k+1} 与 $p_1, p_2, \ldots, p_{k-1}$ 都 A-共轭.

定理 设 $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 对称正定, 共轭梯度法迭代 m 步后 $(m < n)$, 对任意 k $(k \leq m)$ 有

(1) $r_k^\intercal r_i = 0, \quad i = 0, 1, 2, \ldots, k-1;$

(2) $r_k^\intercal p_i = 0, \quad i = 1, 2, \ldots, k;$

(3) $p_{k+1}^\intercal A p_i = 0, \quad i = 1, 2, \ldots, k;$

(4) $\mathrm{span}\{r_0, r_1, \ldots, r_k\} = \mathrm{span}\{p_1, p_2, \ldots, p_{k+1}\} = \mathrm{span}\{r_0, Ar_0, \ldots, A^k r_0\}.$

(留作课外自习, 可以参见矩阵计算或最优化方法的相关教材)

共轭梯度法迭代格式

于是共轭梯度法可描述为

$$\begin{cases} x^{(k)} = x^{(k-1)} + \alpha_k p_k, \quad \text{其中} \quad \alpha_k = \dfrac{p_k^\intercal r_{k-1}}{p_k^\intercal A p_k}, \\ r_k = b - Ax^{(k)} = r_{k-1} - \alpha_k A p_k, \\ p_{k+1} = r_k + \beta_k p_k, \quad \text{其中} \quad \beta_k = -\dfrac{r_k^\intercal A p_k}{p_k^\intercal A p_k}, \end{cases} \qquad k = 1, 2, \dots,$$

进一步简化计算: 利用 r_k 的正交性和 p_k 的 A-共轭性, 可得

推论 共轭梯度法中的 α_k 和 β_k 可以通过下面的公式计算

$$\alpha_k = \frac{r_{k-1}^\intercal r_{k-1}}{p_k^\intercal A p_k}, \quad \beta_k = \frac{r_k^\intercal r_k}{r_{k-1}^\intercal r_{k-1}}.$$

共轭梯度法的算法描述

算法 共轭梯度法 (Conjugate Gradient Algorithm)

给定初值 $x^{(0)}$
计算 $r_0 = b - Ax^{(0)}$, 并令 $p_1 = r_0$, $k = 1$
while not converge **do**
    计算 $x^{(k)} = x^{(k-1)} + \alpha_k p_k$,   其中 $\alpha_k = \dfrac{r_{k-1}^{\intercal} r_{k-1}}{p_k^{\intercal} A p_k}$
    计算 $r_k = r_{k-1} - \alpha_k A p_k$
    计算 $p_{k+1} = r_k + \beta_k p_k$,   其中 $\beta_k = \dfrac{r_k^{\intercal} r_k}{r_{k-1}^{\intercal} r_{k-1}}$
end while

共轭梯度法的收敛性

定理 设 $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 对称正定, 则对任意初值 $x^{(0)}$, 共轭梯度法都收敛, 且

$$\frac{\left\|x^{(k)} - x_*\right\|_A}{\left\|x^{(0)} - x_*\right\|_A} \leq 2\left(\frac{\sqrt{\kappa}-1}{\sqrt{\kappa}+1}\right)^k,$$

其中 κ 为 A 的谱条件数, 范数 $\|x\|_A \triangleq \sqrt{x^{\mathsf{T}}Ax}$.

(留作课外自习, 可以参见矩阵计算的相关教材)

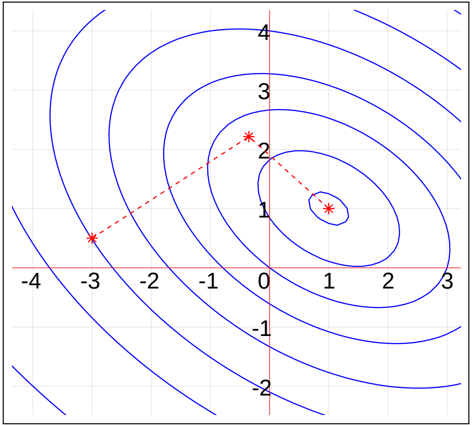
由此可知, 共轭梯度法每次迭代的误差下降率为 $\dfrac{\sqrt{\kappa}-1}{\sqrt{\kappa}+1}$.

共轭梯度法举例（一）

例 用共轭梯度法求解 $Ax=b$, 其中 $A=\begin{bmatrix}2 & 1\\ 1 & 3\end{bmatrix}$, $b=\begin{bmatrix}3\\ 4\end{bmatrix}$, 初值 $x^{(0)}=\begin{bmatrix}-3\\ 0.5\end{bmatrix}$.

k	x	relres
1	$[-0.3498, 2.2148]$	2.70e-01
2	$[1.0000, 1.0000]$	4.39e-17

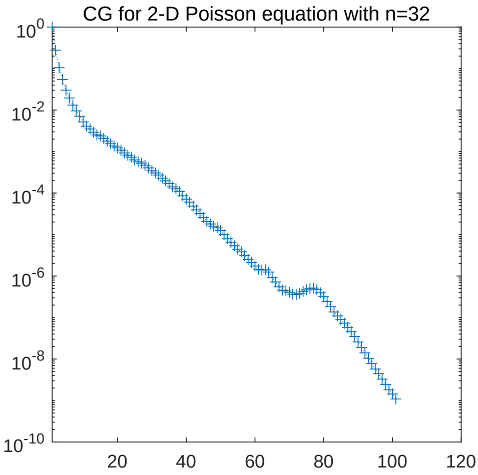
(Iter_CG_01.m)

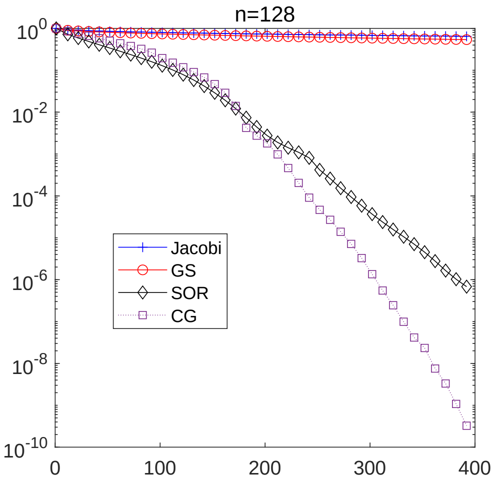


共轭梯度法举例（二）

例 用共轭梯度法求解离散二维 Poission 方程.

(Iter_CG_gallery.m), (Iter_CG_Jacobi_GS_SOR_Poisson2D.m)





谢谢

THANK YOU