Метод сопряженных градиентов

Методы оптимизации

Александр Безносиков

Московский физико-технический институт

28 сентября 2023

ФПМИ

Снова к Коши

- Снова решаем систему линейных уравнений:
$$Ax = b.$$
Ищем $x \in \mathbb{R}^d$
- $A \in \mathbb{R}^{d \times d}$ положительно определенная и $b \in \mathbb{R}^d$.

Сопряженные направления

Определение сопряженных направлений

Множество векторов $\{p_i\}_{i=0}^{n-1}$ будем называть сопряженным относительно положительно определенной матрицы A, если для любых $i \neq j \in \{0, \ldots n-1\}$ следует

$$p_i^T A p_j = 0.$$

Сопряженные направления: линейная независимость

Линейная независимость сопряженных направлений

Сопряженных векторы $\{p_i\}_{i=0}^{n-1}$ является линейно независимыми.

Сопряженные направления: линейная независимость

Доказательство

- От противного:

$$\exists\, i : \quad p_i = \sum_{j \ne i} \lambda_j p_j \ne 0$$

$$\langle p_i; A p_m \rangle$$

$$0 = p_m^T A p_i = p_m^T A \Big(\sum_{j \ne i} \lambda_j p_j \Big) = \sum_{j \ne j} \lambda_j \left(p_m^T A p_j \right)$$

$$= \lambda_m p_m^T A p_m > 0$$

$\lambda_m = 0 \quad m$ - любое $\quad \forall m \;\; \lambda_m = 0$

$p_i = 0 \leftarrow$ прот.

Сопряженные направления: линейная независимость

Доказательство

- От противного: пусть существует p_i такое, что существуют:

$$p_i = \sum_{i \neq j} \lambda_j p_j \text{ для некоторых } \lambda_j \in \mathbb{R}.$$

Сопряженные направления: линейная независимость

Доказательство

- От противного: пусть существует p_i такое, что существуют:

$$p_i = \sum_{i \neq j} \lambda_j p_j \text{ для некоторых } \lambda_j \in \mathbb{R}.$$

- Ударим определением: возьмем скалярное произведение с Ap_m, где $m \neq i$

Сопряженные направления: линейная независимость

Доказательство

- От противного: пусть существует p_i такое, что существуют:

$$p_i = \sum_{i \neq j} \lambda_j p_j \text{ для некоторых } \lambda_j \in \mathbb{R}.$$

- Ударим определением: возьмем скалярное произведение с Ap_m, где $m \neq i$

$$0 = p_m^T A p_i = \sum_{i \neq j} \lambda_j p_m^T A p_j = \lambda_m p_m^T A p_m.$$

Вопрос: почему выполнен первый и последний переходы?

Сопряженные направления: линейная независимость

Доказательство

- От противного: пусть существует p_i такое, что существуют:

$$p_i = \sum_{i \neq j} \lambda_j p_j \text{ для некоторых } \lambda_j \in \mathbb{R}.$$

- Ударим определением: возьмем скалярное произведение с Ap_m, где $m \neq i$

$$0 = p_m^T A p_i = \sum_{i \neq j} \lambda_j p_m^T A p_j = \lambda_m p_m^T A p_m.$$

  Вопрос: почему выполнен первый и последний переходы? Из-за определения сопряженности.

- **Вопрос:** что получили?

Сопряженные направления: линейная независимость

Доказательство

- От противного: пусть существует p_i такое, что существуют:
$$p_i = \sum_{i \neq j} \lambda_j p_j \text{ для некоторых } \lambda_j \in \mathbb{R}.$$
- Ударим определением: возьмем скалярное произведение с Ap_m, где $m \neq i$
$$0 = p_m^T A p_i = \sum_{i \neq j} \lambda_j p_m^T A p_j = \lambda_m p_m^T A p_m.$$
Вопрос: почему выполнен первый и последний переходы? Из-за определения сопряженности.
- **Вопрос:** что получили? $\lambda_m = 0$.

Сопряженные направления: линейная независимость

Доказательство

- От противного: пусть существует p_i такое, что существуют:

$$p_i = \sum_{i \neq j} \lambda_j p_j \text{ для некоторых } \lambda_j \in \mathbb{R}.$$

- Ударим определением: возьмем скалярное произведение с Ap_m, где $m \neq i$

$$0 = p_m^T A p_i = \sum_{i \neq j} \lambda_j p_m^T A p_j = \lambda_m p_m^T A p_m.$$

  Вопрос: почему выполнен первый и последний переходы? Из-за определения сопряженности.

- **Вопрос:** что получили? $\lambda_m = 0$.
- **Вопрос:** что из этого следует?

Сопряженные направления: линейная независимость

Доказательство

- От противного: пусть существует p_i такое, что существуют:

$$p_i = \sum_{i \neq j} \lambda_j p_j \text{ для некоторых } \lambda_j \in \mathbb{R}.$$

- Ударим определением: возьмем скалярное произведение с Ap_m, где $m \neq i$

$$0 = p_m^T A p_i = \sum_{i \neq j} \lambda_j p_m^T A p_j = \lambda_m p_m^T A p_m.$$

  Вопрос: почему выполнен первый и последний переходы? Из-за определения сопряженности.

- **Вопрос:** что получили? $\lambda_m = 0$.
- **Вопрос:** что из этого следует? пробегаем по всем $m \neq i$ и получаем, что $\lambda_m = 0$, а значит $p_i = 0$. Противоречие.

Сопряженные направления: как использовать?

- У нас есть какой-то базис. **Вопрос:** как его можно использовать?

Сопряженные направления: как использовать?

- У нас есть какой-то базис. **Вопрос:** как его можно использовать? Если у нас есть d сопряженных векторов, то они формируют базис. Раскладываем решение:

$$x^* = \sum_{i=0}^{d-1} \lambda_i p_i.$$

Сопряженные направления: как использовать?

- У нас есть какой-то базис. **Вопрос:** как его можно использовать? Если у нас есть d сопряженных векторов, то они формируют базис. Раскладываем решение:

$$x^* = \sum_{i=0}^{d-1} \lambda_i p_i.$$

- **Вопрос:** как найти λ_i?

$\langle Ap_j, x^* \rangle$

$p_j^T A x^* = p_j^T A (\sum \lambda_i p_i) = \sum \lambda_i p_j^T A p_i = \lambda_j p_j^T A p_j$

$p_j^T b$

$\lambda_j = \frac{p_j^T b}{p_j^T A p_j}$

Сопряженные направления: как использовать?

- У нас есть какой-то базис. **Вопрос:** как его можно использовать? Если у нас есть d сопряженных векторов, то они формируют базис. Раскладываем решение:

$$x^* = \sum_{i=0}^{d-1} \lambda_i p_i.$$

- **Вопрос:** как найти λ_i? Возьмем скалярное произведение с Ap_j:

$$p_j^T A x^* = \sum_{i=0}^{d-1} \lambda_i p_j^T A p_i = \lambda_j p_j^T A p_j.$$

Здесь опять воспользовались определением сопряженности.

Сопряженные направления: как использовать?

- У нас есть какой-то базис. **Вопрос:** как его можно использовать? Если у нас есть d сопряженных векторов, то они формируют базис. Раскладываем решение:

$$x^* = \sum_{i=0}^{d-1} \lambda_i p_i.$$

- **Вопрос:** как найти λ_i? Возьмем скалярное произведение с Ap_j:

$$p_j^T A x^* = \sum_{i=0}^{d-1} \lambda_i p_j^T A p_i = \lambda_j p_j^T A p_j.$$

  Здесь опять воспользовались определением сопряженности.
- Заметим, что $Ax^* = b$, тогда $p_j^T b = \lambda_j p_j^T A p_j$.

Сопряженные направления: как использовать?

- У нас есть какой-то базис. **Вопрос:** как его можно использовать? Если у нас есть d сопряженных векторов, то они формируют базис. Раскладываем решение:

$$x^* = \sum_{i=0}^{d-1} \lambda_i p_i.$$

- **Вопрос:** как найти λ_i? Возьмем скалярное произведение с Ap_j:

$$p_j^T A x^* = \sum_{i=0}^{d-1} \lambda_i p_j^T A p_i = \lambda_j p_j^T A p_j.$$

  Здесь опять воспользовались определением сопряженности.
- Заметим, что $Ax^* = b$, тогда $p_j^T b = \lambda_j p_j^T A p_j$.
- Тогда

$$\lambda_j = \frac{p_j^T b}{p_j^T A p_j}.$$

Сопряженные направления: как использовать?

- **Вопрос:** а видно ли какие-то проблемы?

Сопряженные направления: как использовать?

- **Вопрос:** а видно ли какие-то проблемы? Все хорошо кроме того, что мы сами придумали сопряженные направления, сами сказали, что они существуют, а как их получать в реальности пока непонятно.

Сопряженные направления: как использовать?

- **Вопрос:** а видно ли какие-то проблемы? Все хорошо кроме того, что мы сами придумали сопряженные направления, сами сказали, что они существуют, а как их получать в реальности пока непонятно.
- Начнем превращать рассуждения в некоторый итеративный метод:

$$\boxed{x^{k+1} = x^k + \alpha_k p_k.}$$

Т.е. предполагается, что мы на каждой итерации будем искать новое p_k и подбивать к нему α_k.

Метод сопряженных градиентов: α

Мы уже более менее поняли, как искать α, когда искали λ. **Вопрос:** $\lambda = \alpha$?

Метод сопряженных градиентов: α

Мы уже более менее поняли, как искать α, когда искали λ. **Вопрос:** $\lambda = \alpha$? Не всегда. Итеративная схема с α:

$$x^{k+1} = x^0 + \sum_{i=0}^{k} \alpha_i p_i.$$

Метод сопряженных градиентов: α

Мы уже более менее поняли, как искать α, когда искали λ. **Вопрос:** $\lambda = \alpha$? Не всегда. Итеративная схема с α:

$$x^{k+1} = x^0 + \sum_{i=0}^{k} \alpha_i p_i.$$

Итеративная схема с λ:

$$x^{k+1} = \sum_{i=0}^{k} \lambda_i p_i.$$

$x^0 = 0$

Метод сопряженных градиентов: α

Мы уже более менее поняли, как искать α, когда искали λ. **Вопрос:** $\lambda = \alpha$? Не всегда. Итеративная схема с α:

$$x^{k+1} = x^0 + \sum_{i=0}^{k} \alpha_i p_i.$$

Итеративная схема с λ:

$$x^{k+1} = \sum_{i=0}^{k} \lambda_i p_i.$$

Получается, что $\alpha_i = \lambda_i$, если $x^0 = 0$.

Метод сопряженных градиентов: α

Мы уже более менее поняли, как искать α, когда искали λ. **Вопрос:** $\lambda = \alpha$? Не всегда. Итеративная схема с α:

$$x^{k+1} = x^0 + \sum_{i=0}^{k} \alpha_i p_i.$$

$x^{k+1} - x^0$

Итеративная схема с λ:

$$x^{k+1} = \sum_{i=0}^{k} \lambda_i p_i.$$

Получается, что $\alpha_i = \lambda_i$, если $x^0 = 0$. Нужна формула поиска α, так как стартовать из 0 хорошо, но, возможно, у нас есть более близкий кандидат в качестве стартовой точки.

Метод сопряженных градиентов: α

- Можно разложить x^0 по базису и найти для него $\tilde{\lambda}_i$:

$$x^0 = \sum \tilde{\lambda}_i p_i$$

Метод сопряженных градиентов: α

- Можно разложить x^0 по базису и найти для него $\tilde{\lambda}_i$:

$$x^0 = \sum_{i=0}^{d-1} \tilde{\lambda}_i p_i, \text{ где } \tilde{\lambda}_i = \frac{p_i^T A x_0}{p_i^T A p_i}.$$

$x^{(k+1)} =$

Метод сопряженных градиентов: α

- Можно разложить x^0 по базису и найти для него $\tilde{\lambda}_i$:

$$x^0 = \sum_{i=0}^{d-1} \tilde{\lambda}_i p_i, \text{ где } \tilde{\lambda}_i = \frac{p_i^T A x_0}{p_i^T A p_i}.$$

- Тогда справедливо следующее утверждение:

$$x^{k+1} = x^0 + \sum_{i=0}^{k} \alpha_i p_i = x^0 + \sum_{i=0}^{k} \left(\frac{p_i^T A x_0}{p_i^T A p_i} + \alpha_i \right) p_i = \sum_{i=0}^{k} \lambda_i p_i = \sum_{i=0}^{k} \frac{p_i^T b}{p_i^T A p_i} p_i.$$

Метод сопряженных градиентов: α

- Можно разложить x^0 по базису и найти для него $\tilde{\lambda}_i$:

$$x^0 = \sum_{i=0}^{d-1} \tilde{\lambda}_i p_i, \text{ где } \tilde{\lambda}_i = \frac{p_i^T A x_0}{p_i^T A p_i}.$$

- Тогда справедливо следующее утверждение:

$$x^0 + \sum_{i=0}^{k} \alpha_i p_i = \cancel{x^0 +} \sum_{i=0}^{k} \left(\frac{p_i^T A x_0}{p_i^T A p_i} + \alpha_i \right) p_i = \sum_{i=0}^{k} \lambda_i p_i = \sum_{i=0}^{k} \frac{p_i^T b}{p_i^T A p_i} p_i.$$

- Получаем

$$\alpha_k = \boxed{\frac{p_k^T (b - A x^0)}{p_k^T A p_k}}.$$

Метод сопряженных градиентов: α

- Результат уже нормальный, можно чуть-чуть еще докрутить:

$$p_k^T A(x^k - x^0) = 0.$$

Вопрос: почему? $(x^k - x^0) = \sum_{i=0}^{k-1} \alpha_i p_i$, а p_i и p_k сопряженные относительно A.

Метод сопряженных градиентов: α

- Результат уже нормальный, можно чуть-чуть еще докрутить:

$$p_k^T A(x^k - x^0) = 0.$$

Вопрос: почему? $(x^k - x^0) = \sum_{i=0}^{k-1} \alpha_i p_i$, а p_i и p_k сопряженные относительно A.

- Тогда можно так:

$$\alpha_k = \frac{p_k^T (b - Ax^k)}{p_k^T A p_k} = -\frac{p_k^T r_k}{p_k^T A p_k}.$$

Здесь введено обозначение $r_k = Ax^k - b$.

Метод сопряженных градиентов: физический смысл α

- Рассмотрим шаг метода $x^{k+1} = x^k + \alpha_k p_k$, а также функцию

$$f(x) = \frac{1}{2}x^T Ax - bx.$$

Метод сопряженных градиентов: физический смысл α

- Рассмотрим шаг метода $x^{k+1} = x^k + \alpha_k p_k$, а также функцию

$$f(x) = \frac{1}{2}x^T Ax - bx.$$

- **Вопрос:** что это за функция?

Метод сопряженных градиентов: физический смысл α

- Рассмотрим шаг метода $x^{k+1} = x^k + \alpha_k p_k$, а также функцию

$$f(x) = \frac{1}{2}x^T Ax - bx.$$

- **Вопрос:** что это за функция? Ее минимизация эквивалентна поиску решения системы уравнений: $\nabla f(x^*) = Ax^* - b = 0$.

Метод сопряженных градиентов: физический смысл α

- Рассмотрим шаг метода $x^{k+1} = x^k + \alpha_k p_k$, а также функцию

$$f(x) = \frac{1}{2}x^T Ax - bx.$$

- **Вопрос:** что это за функция? Ее минимизация эквивалентна поиску решения системы уравнений: $\nabla f(x^*) = Ax^* - b = 0$.
- Рассмотрим:

$$g(\alpha) = f(x^k + \alpha p_k).$$

$$\alpha = \frac{p_k^T (b - Ax^{(k)})}{p_k^T A p_k}$$

Где у этой функции минимум по α^*?

$$f(x^k + \alpha p_k) = \frac{1}{2}(x^k + \alpha p_k)^T A (x^k + \alpha p_k) - b^T (x^k + \alpha p_k)$$

$$= \underbrace{} + \underbrace{\alpha^2 \cdot \frac{1}{2} p_k^T A p_k + \alpha p_k^T A x^k - \alpha b^T p_k}$$

Метод сопряженных градиентов: физический смысл α

- Рассмотрим шаг метода $x^{k+1} = x^k + \alpha_k p_k$, а также функцию

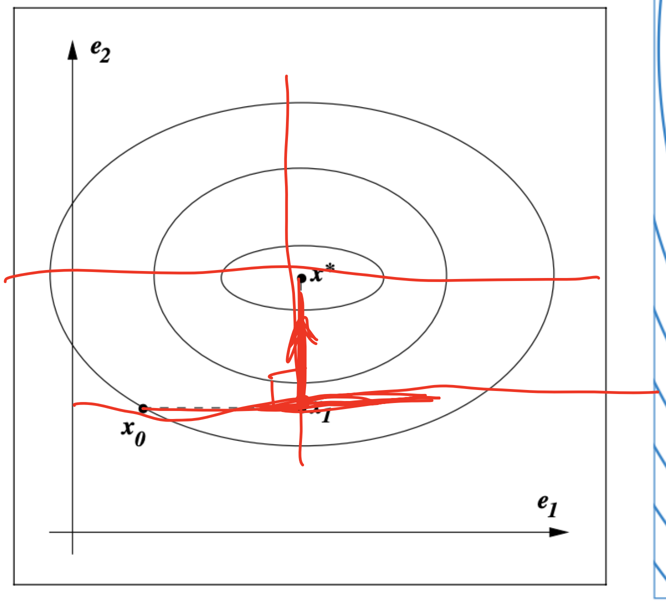
$$f(x) = \frac{1}{2} x^T A x - bx.$$

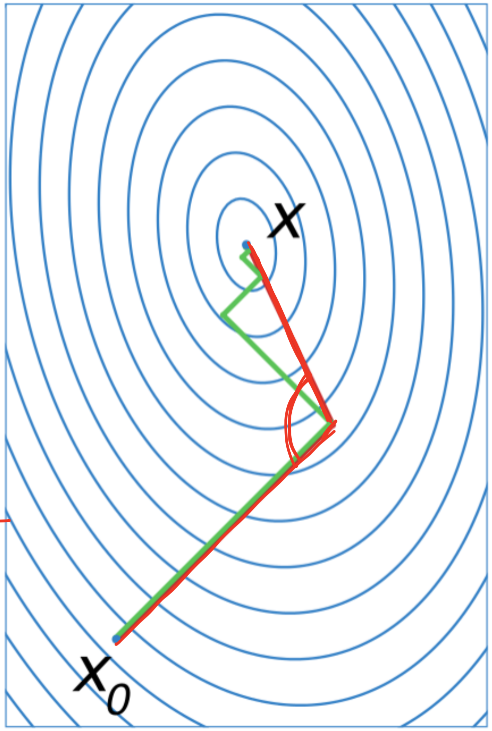
- **Вопрос:** что это за функция? Ее минимизация эквивалентна поиску решения системы уравнений: $\nabla f(x^*) = Ax^* - b = 0$.
- Рассмотрим:

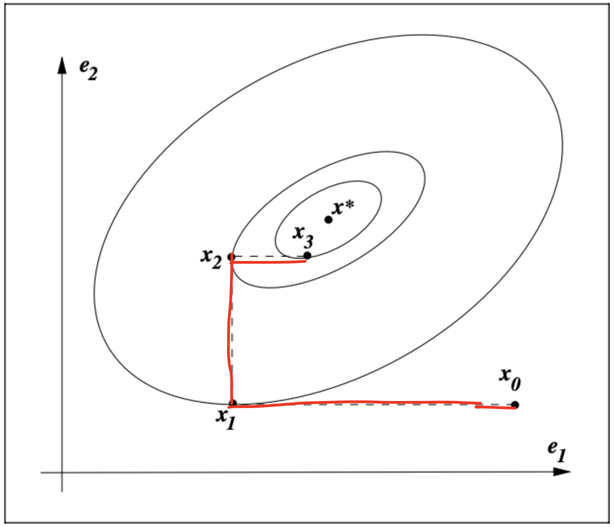
$$g(\alpha) = f(x^k + \alpha p_k).$$

Где у этой функции минимум по α^*? $\alpha^* = \frac{p_k^T(b - Ax^k)}{p_k^T A p_k} = \alpha_k$. Эта и есть физика — минимизация вдоль p_k.

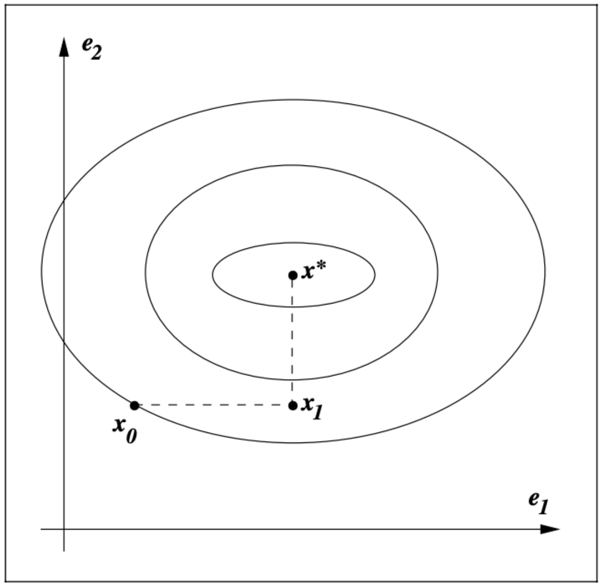
Метод сопряженных градиентов: физический смысл α

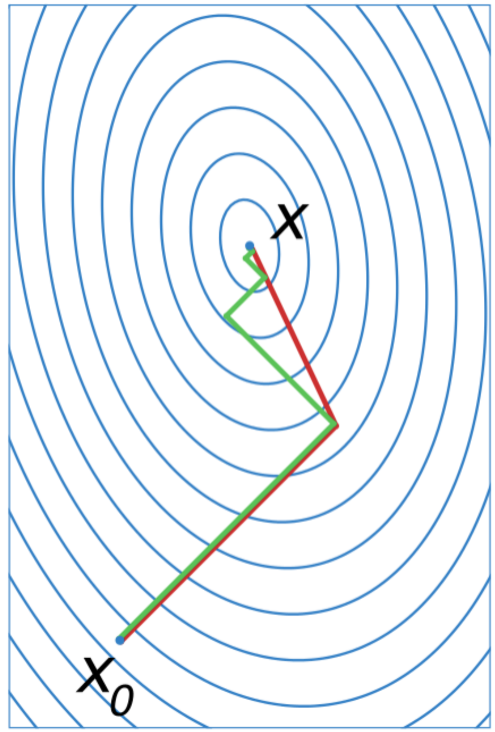


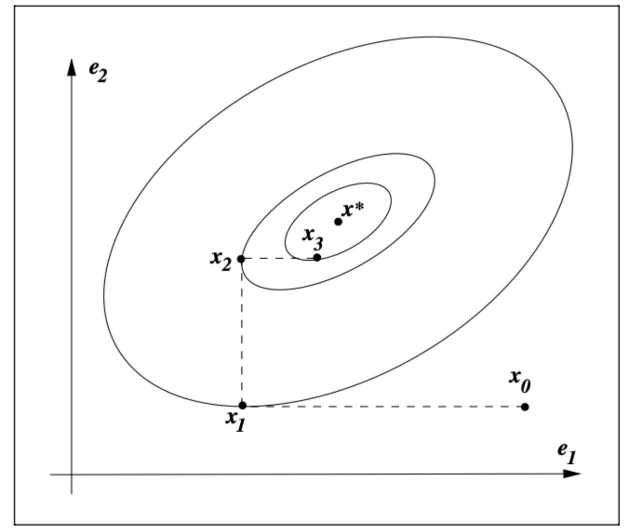




Метод сопряженных градиентов: физический смысл α

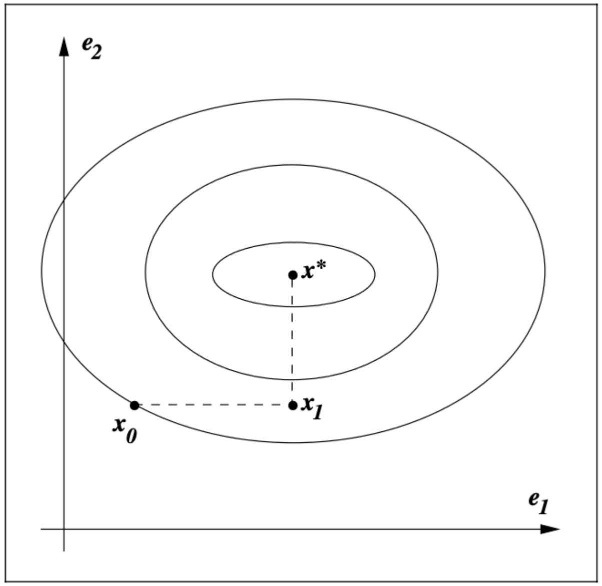


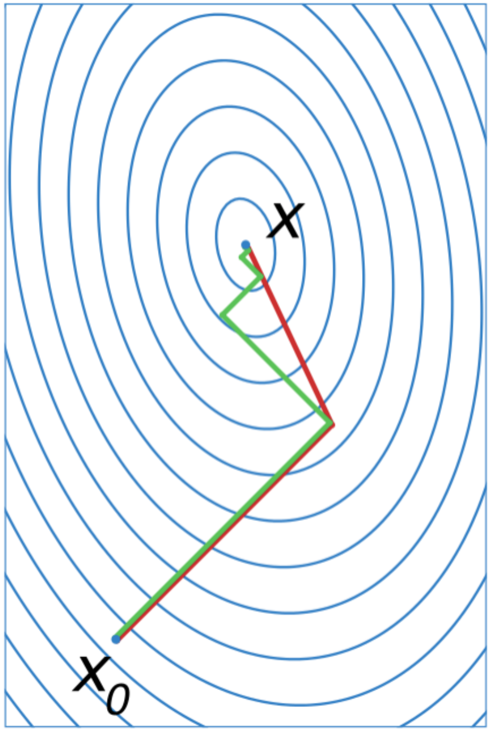


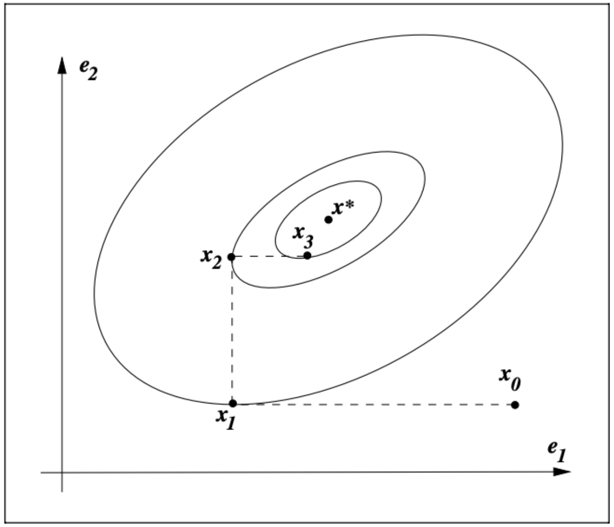


- На второй картинке показано, что сопряженные направления не ортогональны (в привычном смысле этого смысла слова).

Метод сопряженных градиентов: физический смысл α







- На второй картинке показано, что сопряженные направления не ортогональны (в привычном смысле этого смысла слова).
- На третьей картинке направления не являются сопряженным относительно A из-за этого возникают проблемы.

Метод сопряженных градиентов: физический смысл α

Физический смысл p

Если $\{p_i\}_{i=0}^k$ сопряженные направления, то для любого $k \geq 0$ и $i \leq k$ справедливо:

$$r_{k+1}^T p_i = 0 \text{ то же самое, что } \langle \underbrace{\nabla f(x^{k+1})}_{}, p_i \rangle.$$

$$r_k = A x^k - b$$

Метод сопряженных градиентов: физический смысл α

Доказательство

- По индукции. **База:** $r_1^T p_0 \overset{?}{=} 0$

$$r_1 = Ax^1 - b = A(x^0 + \alpha_0 p_0) - b = \underbrace{Ax^0 - b}_{r_0} + \alpha_0 A p_0$$

$$= r_0 + \alpha_0 A p_0$$

$$r_1^T p_0 = \underbrace{r_0^T p_0 + \alpha_0 p_0^T A p_0}_{=0} \qquad \alpha_0 = -\frac{r_0^T p_0}{p_0^T A p_0}$$

Метод сопряженных градиентов: физический смысл α

Доказательство

- По индукции. **База:** $r_1 = Ax^1 - b = Ax^0 - b + \alpha_0 A p_0 = r_0 + \alpha_0 A p_0$, в силу выбора $\alpha_0 = 0$:
$$p_0^T r_1 = p_0^T r_0 + \alpha_0 p_0^T A p_0 = 0.$$

Метод сопряженных градиентов: физический смысл α

Доказательство

- По индукции. **База:** $r_1 = Ax^1 - b = Ax^0 - b + \alpha_0 A p_0 = r_0 + \alpha_0 A p_0$, в силу выбора $\alpha_0 = 0$:
$$p_0^T r_1 = p_0^T r_0 + \alpha_0 p_0^T A p_0 = 0.$$
- **Предположение:** пусть предположение верно для всех $i \leq k$.

Метод сопряженных градиентов: физический смысл α

Доказательство

- По индукции. **База:** $r_1 = Ax^1 - b = Ax^0 - b + \alpha_0 A p_0 = r_0 + \alpha_0 A p_0$, в силу выбора $\alpha_0 = \cancel{0}$:
$$p_0^T r_1 = p_0^T r_0 + \alpha_0 p_0^T A p_0 = 0.$$
- **Предположение:** пусть предположение верно для всех $i \leq k$.
- **Переход:** докажем для $k+1$.

$$r_{k+1} = Ax^{k+1} - b = Ax^k - b + \alpha_k A p_k = r_k + \alpha_k A p_k$$

$$r_{k+1}^T p_k = r_k^T p_k + \alpha_k p_k^T A p_k = 0 \quad \alpha_k$$

$$r_{k+1}^T p_i = \underbrace{r_k^T p_i}_{=0 \text{ инд}} + \underbrace{\alpha_k p_k^T A p_i}_{=0 \text{ сопр}} = 0, \quad i<k$$

Метод сопряженных градиентов: физический смысл α

Доказательство

- По индукции. **База:** $r_1 = Ax^1 - b = Ax^0 - b + \alpha_0 Ap_0 = r_0 + \alpha_0 Ap_0$, в силу выбора $\alpha_0 = 0$:
$$p_0^T r_1 = p_0^T r_0 + \alpha_0 p_0^T Ap_0 = 0.$$
- **Предположение:** пусть предположение верно для всех $i \leq k$.
- **Переход:** докажем для $k+1$. Рассмотрим:
$$r_{k+1} = Ax^{k+1} - b = Ax^k - b + \alpha_k Ap_k = r_k + \alpha_k Ap_k.$$

Метод сопряженных градиентов: физический смысл α

Доказательство

- По индукции. **База:** $r_1 = Ax^1 - b = Ax^0 - b + \alpha_0 Ap_0 = r_0 + \alpha_0 Ap_0$, в силу выбора $\alpha_0 = 0$:
$$p_0^T r_1 = p_0^T r_0 + \alpha_0 p_0^T Ap_0 = 0.$$
- **Предположение:** пусть предположение верно для всех $i \leq k$.
- **Переход:** докажем для $k+1$. Рассмотрим:
$$r_{k+1} = Ax^{k+1} - b = Ax^k - b + \alpha_k Ap_k = r_k + \alpha_k Ap_k.$$

Откуда в силу выбора α_k
$$p_k^T r_{k+1} = p_k^T r_k + \alpha_k p_k^T Ap_k = 0.$$

Для $i < k$:
$$p_i^T r_{k+1} = p_i^T r_k + \alpha_k p_i^T Ap_k = 0.$$

Вопрос: почему?

Метод сопряженных градиентов: физический смысл α

Доказательство

- По индукции. **База:** $r_1 = Ax^1 - b = Ax^0 - b + \alpha_0 A p_0 = r_0 + \alpha_0 A p_0$, в силу выбора $\alpha_0 = 0$:
$$p_0^T r_1 = p_0^T r_0 + \alpha_0 p_0^T A p_0 = 0.$$
- **Предположение:** пусть предположение верно для всех $i \leq k$.
- **Переход:** докажем для $k+1$. Рассмотрим:
$$r_{k+1} = Ax^{k+1} - b = Ax^k - b + \alpha_k A p_k = r_k + \alpha_k A p_k.$$

Откуда в силу выбора α_k
$$p_k^T r_{k+1} = p_k^T r_k + \alpha_k p_k^T A p_k = 0.$$

Для $i < k$:
$$p_i^T r_{k+1} = p_i^T r_k + \alpha_k p_i^T A p_k = 0.$$

Вопрос: почему? В силу индукции и сопряженности.

Метод сопряженных градиентов: p

- Пора уже искать p.
- **Вопрос:** что хотим потребовать от техники поиска p (вспомните, например, процедуру Грама-Шмидта)?

Метод сопряженных градиентов: p

- Пора уже искать p.
- **Вопрос:** что хотим потребовать от техники поиска p (вспомните, например, процедуру Грама-Шмидта)? «Дешевизну» подсчета p_k:

$$p_k = -r_k + \beta_k p_{k-1},$$

где β_k – некоторый коэффициент. Чтобы найти p_k нужно знать только p_{k-1} и r_k, а старые r_i и p_i можно уже забыть (они учтены в x^k).

$$x^{k+1} = x^k + \alpha_k p_k$$

Метод сопряженных градиентов: p

- Пора уже искать p.
- **Вопрос:** что хотим потребовать от техники поиска p (вспомните, например, процедуру Грама-Шмидта)? «Дешевизну» подсчета p_k:
$$p_k = -r_k + \beta_k p_{k-1},$$
где β_k – некоторый коэффициент. Чтобы найти p_k нужно знать только p_{k-1} и r_k, а старые r_i и p_i можно уже забыть (они учтены в x^k).
- **Вопрос:** как найти β_k?

Метод сопряженных градиентов: p

- Пора уже искать p.
- **Вопрос:** что хотим потребовать от техники поиска p (вспомните, например, процедуру Грама-Шмидта)? «Дешевизну» подсчета p_k:

$$p_k = -r_k + \beta_k p_{k-1},$$

где β_k – некоторый коэффициент. Чтобы найти p_k нужно знать только p_{k-1} и r_k, а старые r_i и p_i можно уже забыть (они учтены в x^k).
- **Вопрос:** как найти β_k? Сопряженность p_k и p_{k-1}:

$$0 = p_{k-1}^T A p_k = -p_{k-1}^T A r_k + \beta_k p_{k-1}^T A p_{k-1},$$

Метод сопряженных градиентов: p

- Пора уже искать p.
- **Вопрос:** что хотим потребовать от техники поиска p (вспомните, например, процедуру Грама-Шмидта)? «Дешевизну» подсчета p_k:
$$p_k = -r_k + \beta_k p_{k-1},$$
где β_k – некоторый коэффициент. Чтобы найти p_k нужно знать только p_{k-1} и r_k, а старые r_i и p_i можно уже забыть (они учтены в x^k).
- **Вопрос:** как найти β_k? Сопряженность p_k и p_{k-1}:
$$0 = p_{k-1}^T A p_k = -p_{k-1}^T A r_k + \beta_k p_{k-1}^T A p_{k-1},$$
откуда
$$\beta_k = \frac{p_{k-1}^T A r_k}{p_{k-1}^T A p_{k-1}}.$$

Метод сопряженных градиентов

Алгоритм 1 Метод сопряженных градиентов

Вход: стартовая точка $x^0 \in \mathbb{R}^d$, $r_0 = Ax_0 - b$, $p_0 = -r_0$ количество итераций K

for $k = 0, 1, \dots, K-1$ **do**

$$\alpha_k = -\frac{r_k^T p_k}{p_k^T A p_k}$$

$$x^{k+1} = x^k + \alpha_k p_k$$

$$r_{k+1} = Ax^{k+1} - b$$

$$\beta_{k+1} = \frac{r_{k+1}^T A p_k}{p_k^T A p_k}$$

$$p_{k+1} = -r_{k+1} + \beta_{k+1} p_k$$

end for

Выход: x^K

Метод сопряженных градиентов

Алгоритм 2 Метод сопряженных градиентов

Вход: стартовая точка $x^0 \in \mathbb{R}^d$, $r_0 = Ax_0 - b$, $p_0 = -r_0$ количество итераций K

for $k = 0, 1, \ldots, K-1$ **do**

$\quad \alpha_k = -\frac{r_k^T p_k}{p_k^T A p_k}$

$\quad x^{k+1} = x^k + \alpha_k p_k$

$\quad r_{k+1} = Ax^{k+1} - b$

$\quad \beta_{k+1} = \frac{r_{k+1}^T A p_k}{p_k^T A p_k}$

$\quad p_{k+1} = -r_{k+1} + \beta_{k+1} p_k$

end for

Выход: x^K

Вопрос: а почему вдруг градиентов то?

Метод сопряженных градиентов

Алгоритм 3 Метод сопряженных градиентов

Вход: стартовая точка $x^0 \in \mathbb{R}^d$, $r_0 = Ax_0 - b$, $p_0 = -r_0$ количество итераций K

1: **for** $k = 0, 1, \ldots, K-1$ **do**
2: $\quad \alpha_k = -\frac{r_k^T p_k}{p_k^T A p_k}$
3: $\quad x^{k+1} = x^k + \alpha_k p_k$
4: $\quad r_{k+1} = Ax^{k+1} - b$
5: $\quad \beta_{k+1} = \frac{r_{k+\mathbf{1}}^T A p_k}{p_k^T A p_k}$
6: $\quad p_{k+1} = -r_{k+1} + \beta_{k+1} p_k$
7: **end for**

Выход: x^K

Вопрос: а почему вдруг градиентов то? $r_k = Ax^k - b = \nabla f(x^k)$. Это стоит запомнить.

Метод сопряженных градиентов: доказательство

- **Вопрос:** а может мы уже доказали оценку на сходимость?

Метод сопряженных градиентов: доказательство

- **Вопрос:** а может мы уже доказали оценку на сходимость? Близки к этому, мы знаем, что если все $\{p_i\}$ сопряженные направления, то нам хватит d шагов, чтобы восстановить коэффициенты для x^* в базисе из $\{p_i\}$.

Метод сопряженных градиентов: доказательство

- **Вопрос:** а может мы уже доказали оценку на сходимость? Близки к этому, мы знаем, что если все $\{p_i\}$ сопряженные направления, то нам хватит d шагов, чтобы восстановить коэффициенты для x^* в базисе из $\{p_i\}$.
- **Вопрос:** Знаем ли, что все $\{p_i\}$ сопряженные?

Метод сопряженных градиентов: доказательство

- **Вопрос:** а может мы уже доказали оценку на сходимость? Близки к этому, мы знаем, что если все $\{p_i\}$ сопряженные направления, то нам хватит d шагов, чтобы восстановить коэффициенты для x^* в базисе из $\{p_i\}$.
- **Вопрос:** Знаем ли, что все $\{p_i\}$ сопряженные? Нет, мы знаем только, что p_k и p_{k-1} сопряжены в силу подбора β_k. Надо показать более широкое утверждение:

Для любого $k \geq 1$ для любого $i < k$ выполняется $p_k^T A p_i = 0.$

Метод сопряженных градиентов: доказательство

- Идем по индукции.

Метод сопряженных градиентов: доказательство

- Идем по индукции.
- **База:** p_0 и p_1 сопряжены в силу подбора β_1.

Метод сопряженных градиентов: доказательство

- Идем по индукции.
- **База:** p_0 и p_1 сопряжены в силу подбора β_1.
- **Предположение:** пусть для $k \geq 1$ все $\{p_i\}_{i=0}^{k}$ сопряженные.

Метод сопряженных градиентов: доказательство

- Идем по индукции.
- **База:** p_0 и p_1 сопряжены в силу подбора β_1.
- **Предположение:** пусть для $k \geq 1$ все $\{p_i\}_{i=0}^{k}$ сопряженные.
- **Переход:** Докажем для $k+1$.

Метод сопряженных градиентов: доказательство

- Идем по индукции.
- **База:** p_0 и p_1 сопряжены в силу подбора β_1.
- **Предположение:** пусть для $k \geq 1$ все $\{p_i\}_{i=0}^k$ сопряженные.
- **Переход:** Докажем для $k+1$. p_{k+1} и p_k сопряжены в силу подбора β_{k+1}. $i < k$

$$p_{k+1}^T A p_i =$$

Метод сопряженных градиентов: доказательство

- Идем по индукции.
- **База:** p_0 и p_1 сопряжены в силу подбора β_1.
- **Предположение:** пусть для $k \geq 1$ все $\{p_i\}_{i=0}^k$ сопряженные.
- **Переход:** Докажем для $k+1$. p_{k+1} и p_k сопряжены в силу подбора β_{k+1}. Рассмотрим $i < k$:

$$p_{k+1}^T A p_i = -r_{k+1}^T A p_i + \beta_{k+1} \underbrace{p_k^T A p_i}_{=0} = -r_{k+1}^T A p_i.$$

Метод сопряженных градиентов: доказательство

- Идем по индукции.
- **База:** p_0 и p_1 сопряжены в силу подбора β_1.
- **Предположение:** пусть для $k \geq 1$ все $\{p_i\}_{i=0}^{k}$ сопряженные.
- **Переход:** Докажем для $k+1$. p_{k+1} и p_k сопряжены в силу подбора β_{k+1}. Рассмотрим $i < k$:

$$p_{k+1}^T A p_i = -r_{k+1}^T A p_i + \beta_{k+1} p_k^T A p_i = -r_{k+1}^T A p_i.$$

Вопрос: почему валиден второй переход?

Метод сопряженных градиентов: доказательство

- Идем по индукции.
- **База:** p_0 и p_1 сопряжены в силу подбора β_1.
- **Предположение:** пусть для $k \geq 1$ все $\{p_i\}_{i=0}^k$ сопряженные.
- **Переход:** Докажем для $k+1$. p_{k+1} и p_k сопряжены в силу подбора β_{k+1}. Рассмотрим $i < k$:

$$p_{k+1}^T A p_i = -r_{k+1}^T A p_i + \beta_{k+1} p_k^T A p_i = -r_{k+1}^T A p_i.$$

Вопрос: почему валиден второй переход? в силу предположения индукции и того, что $i < k$.

Метод сопряженных градиентов: доказательство

- Идем по индукции.
- **База:** p_0 и p_1 сопряжены в силу подбора β_1.
- **Предположение:** пусть для $k \geq 1$ все $\{p_i\}_{i=0}^k$ сопряженные.
- **Переход:** Докажем для $k+1$. p_{k+1} и p_k сопряжены в силу подбора β_{k+1}. Рассмотрим $i < k$:

  $$p_{k+1}^T A p_i = -r_{k+1}^T A p_i + \beta_{k+1} p_k^T A p_i = -r_{k+1}^T A p_i.$$

  Вопрос: почему валиден второй переход? в силу предположения индукции и того, что $i < k$.
- Осталось показать, что $-r_{k+1}^T A p_i = 0$. Запомним это.

Метод сопряженных градиентов: доказательство

- Доказаем, что для $k \geq 0$ выполнено $\operatorname{span}\{r_0, \ldots r_k\} = \operatorname{span}\{r_0, \ldots A^k r_0\}$ и $\operatorname{span}\{p_0, \ldots p_k\} = \operatorname{span}\{r_0, \ldots A^k r_0\}$.

Крыловские пр-ва

A, r_0

Метод сопряженных градиентов: доказательство

- Докажем, что для $k \geq 0$ выполнено $\mathrm{span}\{r_0, \dots r_k\} = \mathrm{span}\{r_0, \dots A^k r_0\}$ и $\mathrm{span}\{p_0, \dots p_k\} = \mathrm{span}\{r_0, \dots A^k r_0\}$.
- По индукции. **База:** следует из инициализации.

p r_0

$p_0 = -r_0$

Метод сопряженных градиентов: доказательство

- Докажем, что для $k \geq 0$ выполнено $\mathrm{span}\{r_0, \ldots r_k\} = \mathrm{span}\{r_0, \ldots A^k r_0\}$ и $\mathrm{span}\{p_0, \ldots p_k\} = \mathrm{span}\{r_0, \ldots A^k r_0\}$.
- По индукции. **База:** следует из инициализации.
- **Предположение:** пусть верно для всех $i \leq k$.

$k+1$

$\mathrm{span}\{r_0, \ldots r_k\} \subseteq \mathrm{span}\{\ldots kr\}$

$\supseteq$

Метод сопряженных градиентов: доказательство

- Докажем, что для $k \geq 0$ выполнено $\text{span}\{r_0, \dots r_k\} = \text{span}\{r_0, \dots A^k r_0\}$ и $\text{span}\{p_0, \dots p_k\} = \text{span}\{r_0, \dots A^k r_0\}$.
- По индукции. **База:** следует из инициализации.
- **Предположение:** пусть верно для всех $i \leq k$.
- **Переход:** докажем для $k+1$. Используя предположение: $r_k \in \text{span}\{r_0, \dots A^k r_0\}$ и $A p_k \in A\,\text{span}\{A r_0, \dots A^{k+1} r_0\}$.

r_0

$$r_{k+1} = r_k + \alpha_k A p_k$$

$r_k \in \text{span}(Kr(k))$

$\alpha_k A p_k \in A\,\text{span}\{Kr(k)\} \in \text{span}(Kr(k+1))$

$$r_{k+1} \in \text{span}(Kr(k+1))$$

$$\text{span}(r_0 \dots r_{k+1}) \subseteq \text{span}(Kr(k+1))$$

Метод сопряженных градиентов: доказательство

- Докажем, что для $k \geq 0$ выполнено $\mathrm{span}\{r_0, \dots r_k\} = \mathrm{span}\{r_0, \dots A^k r_0\}$ и $\mathrm{span}\{p_0, \dots p_k\} = \mathrm{span}\{r_0, \dots A^k r_0\}$.
- По индукции. **База:** следует из инициализации.
- **Предположение:** пусть верно для всех $i \leq k$.
- **Переход:** докажем для $k+1$. Используя предположение: $r_k \in \mathrm{span}\{r_0, \dots A^k r_0\}$ и $p_k \in \mathrm{span}\{r_0, \dots A^k r_0\}$. Тогда $Ap_k \in \mathrm{span}\{Ar_0, \dots A^{k+1} r_0\}$.

Метод сопряженных градиентов: доказательство

- Докажем, что для $k \geq 0$ выполнено $\text{span}\{r_0, \dots r_k\} = \text{span}\{r_0, \dots A^k r_0\}$ и $\text{span}\{p_0, \dots p_k\} = \text{span}\{r_0, \dots A^k r_0\}$.
- По индукции. **База:** следует из инициализации.
- **Предположение:** пусть верно для всех $i \leq k$.
- **Переход:** докажем для $k+1$. Используя предположение: $r_k \in \text{span}\{r_0, \dots A^k r_0\}$ и $p_k \in \text{span}\{r_0, \dots A^k r_0\}$. Тогда $Ap_k \in \text{span}\{Ar_0, \dots A^{k+1} r_0\}$.А зная, что $r_{k+1} = r_k + \alpha_k A p_k$, получаем одно включение $r_{k+1} \in \{r_0, \dots A^{k+1} r_0\}$.

Метод сопряженных градиентов: доказательство

- Докажем, что для $k \geq 0$ выполнено $\operatorname{span}\{r_0, \dots r_k\} = \operatorname{span}\{r_0, \dots A^k r_0\}$ и $\operatorname{span}\{p_0, \dots p_k\} = \operatorname{span}\{r_0, \dots A^k r_0\}$.

  $A^{k+1} r_0$
- По индукции. **База:** следует из инициализации.
- **Предположение:** пусть верно для всех $i \leq k$.
- **Переход:** докажем для $k+1$. Используя предположение: $r_k \in \operatorname{span}\{r_0, \dots A^k r_0\}$ и $p_k \in \operatorname{span}\{r_0, \dots A^k r_0\}$. Тогда $Ap_k \in \operatorname{span}\{Ar_0, \dots A^{k+1} r_0\}$.А зная, что $r_{k+1} = r_k + \alpha_k A p_k$, получаем одно включение $r_{k+1} \in \{r_0, \dots A^{k+1} r_0\}$. Откуда $\operatorname{span}\{r_0, \dots r_{k+1}\} \subseteq \operatorname{span}\{r_0, \dots A^{k+1} r_0\}$, но нам нужно равенство.

$$A^{k+1} r_0 = A(A^k r_0) \in A \operatorname{span}\{p_0 \dots p_k\}$$
$$\in \operatorname{span}\{Ap_0 \dots Ap_k\} \subseteq \operatorname{span}\{r_0 \dots r_{k+1}\}$$

$$r_{i+1} = r_i + \alpha_i A p_i$$

$$\boxed{Ap_i = \frac{r_{i+1} - r_i}{\alpha_i}} \in \operatorname{span}(r_{i+1}, r_i)$$

Метод сопряженных градиентов: доказательство

- Докажем, что для $k \geq 0$ выполнено $\mathrm{span}\{r_0, \dots r_k\} = \mathrm{span}\{r_0, \dots A^k r_0\}$ и $\mathrm{span}\{p_0, \dots p_k\} = \mathrm{span}\{r_0, \dots A^k r_0\}$.
- По индукции. **База:** следует из инициализации.
- **Предположение:** пусть верно для всех $i \leq k$.
- **Переход:** докажем для $k+1$. Используя предположение: $r_k \in \mathrm{span}\{r_0, \dots A^k r_0\}$ и $p_k \in \mathrm{span}\{r_0, \dots A^k r_0\}$. Тогда $Ap_k \in \mathrm{span}\{Ar_0, \dots A^{k+1} r_0\}$.А зная, что $r_{k+1} = r_k + \alpha_k A p_k$, получаем одно включение $r_{k+1} \in \{r_0, \dots A^{k+1} r_0\}$. Откуда $\mathrm{span}\{r_0, \dots r_{k+1}\} \subseteq \mathrm{span}\{r_0, \dots A^{k+1} r_0\}$, но нам нужно равенство. Заметим, что из второго предположения: $A^{k+1} r_0 = A(A^k r_0) \in \mathrm{span}\{Ap_0, \dots Ap_k\}$.

Метод сопряженных градиентов: доказательство

- Докажем, что для $k \geq 0$ выполнено $\operatorname{span}\{r_0, \dots r_k\} = \operatorname{span}\{r_0, \dots A^k r_0\}$ и $\operatorname{span}\{p_0, \dots p_k\} = \operatorname{span}\{r_0, \dots A^k r_0\}$.
- По индукции. **База:** следует из инициализации.
- **Предположение:** пусть верно для всех $i \leq k$.
- **Переход:** докажем для $k+1$. Используя предположение: $r_k \in \operatorname{span}\{r_0, \dots A^k r_0\}$ и $p_k \in \operatorname{span}\{r_0, \dots A^k r_0\}$. Тогда $Ap_k \in \operatorname{span}\{Ar_0, \dots A^{k+1} r_0\}$.А зная, что $r_{k+1} = r_k + \alpha_k A p_k$, получаем одно включение $r_{k+1} \in \{r_0, \dots A^{k+1} r_0\}$. Откуда $\operatorname{span}\{r_0, \dots r_{k+1}\} \subseteq \operatorname{span}\{r_0, \dots A^{k+1} r_0\}$, но нам нужно равенство. Заметим, что из второго предположения: $A^{k+1} r_0 = A(A^k r_0) \in \operatorname{span}\{Ap_0, \dots Ap_k\}$. Так как $(r_{i+1} - r_i)/\alpha_i = Ap_i$ получаем, что $A^{k+1} r_0 \in \operatorname{span}\{r_0, \dots r_{k+1}\}$.

Метод сопряженных градиентов: доказательство

- Докажем, что для $k \geq 0$ выполнено $\mathrm{span}\{r_0, \dots r_k\} = \mathrm{span}\{r_0, \dots A^k r_0\}$ и $\mathrm{span}\{p_0, \dots p_k\} = \mathrm{span}\{r_0, \dots A^k r_0\}$.
- По индукции. **База:** следует из инициализации.
- **Предположение:** пусть верно для всех $i \leq k$.
- **Переход:** докажем для $k+1$. Используя предположение: $r_k \in \mathrm{span}\{r_0, \dots A^k r_0\}$ и $p_k \in \mathrm{span}\{r_0, \dots A^k r_0\}$. Тогда $Ap_k \in \mathrm{span}\{Ar_0, \dots A^{k+1} r_0\}$.А зная, что $r_{k+1} = r_k + \alpha_k A p_k$, получаем одно включение $r_{k+1} \in \{r_0, \dots A^{k+1} r_0\}$. Откуда $\mathrm{span}\{r_0, \dots r_{k+1}\} \subseteq \mathrm{span}\{r_0, \dots A^{k+1} r_0\}$, но нам нужно равенство. Заметим, что из второго предположения: $A^{k+1} r_0 = A(A^k r_0) \in \mathrm{span}\{Ap_0, \dots Ap_k\}$. Так как $(r_{i+1} - r_i)/\alpha_i = Ap_i$ получаем, что $A^{k+1} r_0 \in \mathrm{span}\{r_0, \dots r_{k+1}\}$. Отсюда $\mathrm{span}\{r_0, \dots A^{k+1} r_0\} \subseteq \mathrm{span}\{r_0, \dots r_{k+1}\}$. Включение в обе стороны доказано.

Метод сопряженных градиентов: доказательство

- Остался еще переход для второй части.

Метод сопряженных градиентов: доказательство

- Остался еще переход для второй части.
- По правилу подсчета p_{k+1}:

$$\underline{\mathrm{span}\{p_0, \dots p_{k+1}\}} = \underline{\mathrm{span}\{p_0, \dots p_k, r_{k+1}\}}.$$

$p_{k+1} = -r_{k+1} + \beta p_k$

Метод сопряженных градиентов: доказательство

- Остался еще переход для второй части.
- По правилу подсчета p_{k+1}:

$$\operatorname{span}\{p_0, \dots p_{k+1}\} = \underbrace{\operatorname{span}\{p_0, \dots p_k}_{Kr(k)}, r_{k+1}\}.$$

- По второму предположению индукции:

$$\operatorname{span}\{p_0, \dots p_{k+1}\} = \underbrace{\operatorname{span}\{r_0, \dots A^k r_0}, r_{k+1}\}.$$

$\{r_0 \dots r_{k+1}\} \in \operatorname{span}\{Kr(k+1)\}$

Метод сопряженных градиентов: доказательство

- Остался еще переход для второй части.
- По правилу подсчета p_{k+1}:

$$\mathrm{span}\{p_0, \dots p_{k+1}\} = \mathrm{span}\{p_0, \dots p_k, r_{k+1}\}.$$

- По второму предположению индукции:

$$\mathrm{span}\{p_0, \dots p_{k+1}\} = \mathrm{span}\{r_0, \dots A^k r_0, r_{k+1}\}.$$

- По первому предположению:

$$\mathrm{span}\{p_0, \dots p_{k+1}\} = \mathrm{span}\{r_0, \dots r_k, r_{k+1}\}.$$

$= \mathrm{span}(Kr(k+1))$

Метод сопряженных градиентов: доказательство

- Остался еще переход для второй части.
- По правилу подсчета p_{k+1}:

$$\operatorname{span}\{p_0, \dots p_{k+1}\} = \operatorname{span}\{p_0, \dots p_k, r_{k+1}\}.$$

- По второму предположению индукции:

$$\operatorname{span}\{p_0, \dots p_{k+1}\} = \operatorname{span}\{r_0, \dots A^k r_0, r_{k+1}\}.$$

- По первому предположению:

$$\operatorname{span}\{p_0, \dots p_{k+1}\} = \operatorname{span}\{r_0, \dots r_k, r_{k+1}\}.$$

- По только что доказанному:

$$\operatorname{span}\{p_0, \dots p_{k+1}\} = \operatorname{span}\{r_0, \dots, A^{k+1} r_0\}.$$

Метод сопряженных градиентов: доказательство

- Возвращаемся к $-r_{k+1}^T A p_i = 0$ для $i < k$.

Метод сопряженных градиентов: доказательство

$p_0 .. p_{i+1}$

- Возвращаемся к $-r_{k+1}^T A p_i = 0$ для $i < k$.
- Теперь мы знаем, что

$$p_i \in \underline{\mathrm{span}\{r_0, \dots, A^i r_0\}}.$$

$Ap_i \in \mathrm{span}(Kr(i+1))$

$i+1 \le k$

$Kr(i+1) = \mathrm{span}(p_0 .. p_{i+1})$

все сопр [illegible] (не [illegible].)

$r_{k+1}^T p_j = 0$

$j = 0 .. i+1$

Метод сопряженных градиентов: доказательство

- Возвращаемся к $-r_{k+1}^T A p_i = 0$ для $i < k$.
- Теперь мы знаем, что
$$p_i \in \operatorname{span}\{r_0, \dots, A^i r_0\}.$$
- Откуда $$Ap_i \in \operatorname{span}\{Ar_0, \dots, A^{i+1} r_0\}.$$

Метод сопряженных градиентов: доказательство

- Возвращаемся к $-r_{k+1}^T A p_i = 0$ для $i < k$.
- Теперь мы знаем, что
$$p_i \in \mathrm{span}\{r_0, \ldots, A^i r_0\}.$$
- Откуда $$Ap_i \in \mathrm{span}\{Ar_0, \ldots, A^{i+1} r_0\}.$$
- Из только, что доказанного
$$Ap_i \in \mathrm{span}\{Ar_0, \ldots, A^{i+1} r_0\} \subseteq \mathrm{span}\{p_0, \ldots, p_{i+1}\}.$$

Метод сопряженных градиентов: доказательство

- Возвращаемся к $-r_{k+1}^T A p_i = 0$ для $i < k$.
- Теперь мы знаем, что
$$p_i \in \text{span}\{r_0, \dots, A^i r_0\}.$$
- Откуда $$Ap_i \in \text{span}\{Ar_0, \dots, A^{i+1} r_0\}.$$
- Из только, что доказанного
$$Ap_i \in \text{span}\{Ar_0, \dots, A^{i+1} r_0\} \subseteq \text{span}\{p_0, \dots, p_{i+1}\}.$$
- Но все p_j для j от 0 до i ортогональны r^{k+1} в силу то, что $\{p_j\}$ сопряженные в силу предположения индукции. А значит получили то, что нужно.

Метод сопряженных градиентов: сходимость

Теорема о сходимости метода сопряженных градиентов

Метод сопряженных градиентов для решения системы линейных уравнений с квадратной положительно определенной матрицей размера d находит точное решение за не более чем d итераций.

Метод сопряженных градиентов: сходимость

Теорема о сходимости метода сопряженных градиентов

Метод сопряженных градиентов для решения системы линейных уравнений с квадратной положительно определенной матрицей размера d находит точное решение за не более чем d итераций.

Эквивалентно минимизации сильной выпуклой квадратичной задачи.

Метод сопряженных градиентов: сходимость

- **Вопрос:** то, что получили плохо или хорошо?

$A \succ$

Метод сопряженных градиентов: сходимость

- **Вопрос:** то, что получили плохо или хорошо? На самом деле не очень. И метод сопрояженных градиентов в момент своего появления 70 лет назад столкнулся с этой проблемой. Т.е. для *точного* решения системы уравнений конкурентен, но не особо популярен.

Метод сопряженных градиентов: сходимость

- **Вопрос:** то, что получили плохо или хорошо? На самом деле не очень. И метод сопрояженных градиентов в момент своего появления 70 лет назад столкнулся с этой проблемой. Т.е. для *точного* решения системы уравнений конкурентен, но не особо популярен.
- Ключевое слово в предыдущем абзаце «*точного*». Метод сопряженных градиентов можно останавливать раньше, он итеративный. А это уже интереснее.

Метод сопряженных градиентов: сходимость

- **Вопрос:** то, что получили плохо или хорошо? На самом деле не очень. И метод сопрояженных градиентов в момент своего появления 70 лет назад столкнулся с этой проблемой. Т.е. для *точного* решения системы уравнений конкурентен, но не особо популярен.
- Ключевое слово в предыдущем абзаце «*точного*». Метод сопряженных градиентов можно останавливать раньше, он итеративный. А это уже интереснее.
- Есть особенности сходимости, которые делают метод еще быстрее.

Метод сопряженных градиентов: сходимость

Теорема о сходимости метода сопряженных градиентов

Метод сопряженных градиентов для решения системы линейных уравнений с квадратной положительно определенной матрицей размера d находит точное решение за не более чем r итераций, где r – число уникальных собственных значений матрицы.

Метод сопряженных градиентов: сходимость

Теорема о сходимости метода сопряженных градиентов

Метод сопряженных градиентов для решения системы линейных уравнений с квадратной положительно определенной матрицей размера d находит точное решение за не более чем r итераций, где r – число уникальных собственных значений матрицы.

Теорема о сходимости метода сопряженных градиентов

Метод сопряженных градиентов для решения системы линейных уравнений с квадратной положительно определенной матрицей размера d имеет следующую оценку сходимости:

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

Здесь $\|x\|_A^2 = x^TAx$ и $\kappa(A) = \lambda_{\max}(A)/\lambda_{\min}(A)$.

Метод сопряженных градиентов: сходимость

Теорема о сходимости метода сопряженных градиентов

Метод сопряженных градиентов для решения системы линейных уравнений с квадратной положительно определенной матрицей размера d находит точное решение за не более чем r итераций, где r – число уникальных собственных значений матрицы.

Теорема о сходимости метода сопряженных градиентов

Метод сопряженных градиентов для решения системы линейных уравнений с квадратной положительно определенной матрицей размера d имеет следующую оценку сходимости:

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

Здесь $\|x\|_A^2 = x^T A x$ и $\kappa(A) = \lambda_{\max}(A)/\lambda_{\min}(A)$.

Вопрос: а для какого метода справедлива похожая оценка?

Метод сопряженных градиентов: сходимость

Теорема о сходимости метода сопряженных градиентов

Метод сопряженных градиентов для решения системы линейных уравнений с квадратной положительно определенной матрицей размера d находит точное решение за не более чем r итераций, где r – число уникальных собственных значений матрицы.

Теорема о сходимости метода сопряженных градиентов

Метод сопряженных градиентов для решения системы линейных уравнений с квадратной положительно определенной матрицей размера d имеет следующую оценку сходимости:

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

Здесь $\|x\|_A^2 = x^T A x$ и $\kappa(A) = \lambda_{\max}(A)/\lambda_{\min}(A)$.

Вопрос: а для какого метода справедлива похожая оценка?
Ускоренный градиентный метод.

Метод сопряженных градиентов

Алгоритм 4 Метод сопряженных градиентов (классическая версия)

Вход: стартовая точка $x^0 \in \mathbb{R}^d$, $r_0 = Ax_0 - b$, $p_0 = -r_0$ количество итераций K

for $k = 0, 1, \ldots, K-1$ **do**

$$\alpha_k = -\frac{r_k^T r_k}{p_k^T A p_k}$$

$$x^{k+1} = x^k + \alpha_k p_k$$

$$r_{k+1} = r_k + \alpha_k A p_k$$

$$\beta_{k+1} = \frac{r_{k+1}^T r_{k+1}}{r_k^T r_k}$$

$$p_{k+1} = -r_{k+1} + \beta_{k+1} p_k$$

end for

Выход: x^K

$r_k = Ax^k - b$

Метод сопряженных градиентов

Алгоритм 5 Метод сопряженных градиентов (классическая версия)

Вход: стартовая точка $x^0 \in \mathbb{R}^d$, $r_0 = Ax_0 - b$, $p_0 = -r_0$ количество итераций K

1: **for** $k = 0, 1, \ldots, K-1$ **do**

2: $\quad \alpha_k = -\frac{r_k^T r_k}{p_k^T A p_k}$

3: $\quad x^{k+1} = x^k + \alpha_k p_k$

4: $\quad r_{k+1} = r_k + \alpha_k A p_k$

5: $\quad \beta_{k+1} = \frac{r_{k+1}^T r_{k+1}}{r_k^T r_k}$

6: $\quad p_{k+1} = -r_{k+1} + \beta_{k+1} p_k$

7: **end for**

Выход: x^K

Вспомним, что градиент то «зашит» в $r_k = Ax^k - b = \nabla f(x^k)$.

Метод сопряженных градиентов для произвольной задачи

Алгоритм 6 Метод сопряженных градиентов (Флетчер - Ривс)

Вход: стартовая точка $x^0 \in \mathbb{R}^d$, $p_0 = -\nabla f(x_0)$ количество итераций K

1: **for** $k = 0, 1, \dots, K-1$ **do**
2: $\alpha_k = ?$
3: $x^{k+1} = x^k + \alpha_k p_k$
4: $\beta_{k+1} = \frac{\langle \nabla f(x^{k+1}), \nabla f(x^{k+1}) \rangle}{\langle \nabla f(x^k), \nabla f(x^k) \rangle}$
5: $p_{k+1} = -\nabla f(x^{k+1}) + \beta_{k+1} p_k$
6: **end for**

Выход: x^K

Метод сопряженных градиентов для произвольной задачи

Алгоритм 7 Метод сопряженных градиентов (Флетчер - Ривс)

Вход: стартовая точка $x^0 \in \mathbb{R}^d$, $p_0 = -\nabla f(x_0)$ количество итераций K

1: **for** $k = 0, 1, \dots, K-1$ **do**

2: $\quad \alpha_k = ?$

3: $\quad x^{k+1} = x^k + \alpha_k p_k$

4: $\quad \beta_{k+1} = \frac{\langle \nabla f(x^{k+1}), \nabla f(x^{k+1}) \rangle}{\langle \nabla f(x^k), \nabla f(x^k) \rangle}$

5: $\quad p_{k+1} = -\nabla f(x^{k+1}) + \beta_{k+1} p_k$

6: **end for**

Выход: x^K

Вопрос: как искать шаг α_k?

$f(x^k + \alpha p_k)$

Метод сопряженных градиентов для произвольной задачи

Алгоритм 8 Метод сопряженных градиентов (Флетчер - Ривс)

Вход: стартовая точка $x^0 \in \mathbb{R}^d$, $p_0 = -\nabla f(x_0)$ количество итераций K

1: **for** $k = 0, 1, \dots, K-1$ **do**

2: $\quad \alpha_k = ?$

3: $\quad x^{k+1} = x^k + \alpha_k p_k$

4: $\quad \beta_{k+1} = \frac{\langle \nabla f(x^{k+1}), \nabla f(x^{k+1}) \rangle}{\langle \nabla f(x^k), \nabla f(x^k) \rangle}$

5: $\quad p_{k+1} = -\nabla f\left(x^{k+1}\right) + \beta_{k+1} p_k$

6: **end for**

Выход: x^K

Вопрос: как искать шаг α_k? Мы хотим минимизировать вдоль направления p_k, получаем одномерную функцию зависящую от α. Вспомним про бинпоиск и золотое сечение.

Метод сопряженных градиентов для произвольной задачи

Алгоритм 9 Метод сопряженных градиентов (Полак - Рибьер)

Вход: стартовая точка $x^0 \in \mathbb{R}^d$, $p_0 = -\nabla f(x_0)$ количество итераций K

1: **for** $k = 0, 1, \ldots, K-1$ **do**

2: $\alpha_k =$ Линейный поиск

3: $x^{k+1} = x^k + \alpha_k p_k$

4: $\beta_{k+1} = \frac{\langle \nabla f(x^{k+1}), \nabla f(x^{k+1}) - \nabla f(x^k) \rangle}{\langle \nabla f(x^k), \nabla f(x^k) \rangle}$

5: $p_{k+1} = -\nabla f(x^{k+1}) + \cancel{\beta_{k+1} p_k}$

6: **end for**

Выход: x^K

Метод сопряженных градиентов для произвольной задачи

- Обобщения работают неплохо, но гарантии в теории далеко не самые оптимистичные.

Метод сопряженных градиентов для произвольной задачи

- Обобщения работают неплохо, но гарантии в теории далеко не самые оптимистичные.
- Лучше иногда делать «рестарты». В данном случае «рестарты» предполагают иногда брать $\beta_k = 0$, забывая историю. **Вопрос:** итерация какого метода тогда получится?

Метод сопряженных градиентов для произвольной задачи

- Обобщения работают неплохо, но гарантии в теории далеко не самые оптимистичные.
- Лучше иногда делать «рестарты». В данном случае «рестарты» предполагают иногда брать $\beta_k = 0$, забывая историю. **Вопрос:** итерация какого метода тогда получится? Градиентный спуск.

Метод сопряженных градиентов для произвольной задачи

- Обобщения работают неплохо, но гарантии в теории далеко не самые оптимистичные.
- Лучше иногда делать «рестарты». В данном случае «рестарты» предполагают иногда брать $\beta_k = 0$, забывая историю. **Вопрос:** итерация какого метода тогда получится? Градиентный спуск.
- Подходит как метод «стартер», которым из начальной неизвестной точки, можно близко, но не совсем точно подойти к решению.