你好，我是朱维刚。欢迎你继续跟我学习线性代数，今天我要讲的内容是“数值线性代数的迭代法，以及如何在实践中运用迭代法求解线性方程组”。

大密度线性方程组的计算已经成为了世界上最快计算机的测试标准。2008年，IBM为美国能源部Los Alamos国家实验室建造了“Roadrunner”计算机系统，它的运算速度达到了1.026 petaflop/s（千万亿次/秒，petaflop是衡量计算机性能的一个重要单位，1 petaflop等于每秒钟进行1千万亿次的数学运算）。按摩尔定律计算，现在世界上最快的计算机已经达到了200 petaflop，我国也早就进入了世界前列，并有望实现1 exaflop/s（百亿亿次/秒），成为世界第一。


可能你会有些疑惑，为什么我要在课程后期来讲数值线性代数呢？

那是因为数值线性代数是一门特殊的学科，是特别为计算机上进行线性代数计算服务的，可以说它是研究矩阵运算算法的学科，偏向算法实践与工程设计。有了之前基础知识的铺垫后，学习数值线性代数会更有效，而且它是可以直接运用在计算机科学中的，比如：在图像压缩中，使用奇异值分解（SVD）来节省内存；在深度学习中，使用共轭梯度来加速神经网络的收敛。

## 迭代方法说明

课程内容的前期一直都在用**直接法**来解线性方程组，比如高斯消元法。但在实践中，我们在面对复杂场景时，更多的会使用**迭代法**来求解（也就是所谓的间接法），因为很多场景会用到大型稀疏矩阵。所以，我打算在这里讲讲机器学习中的迭代法应用。这里需要注意，不是说直接法不重要，直接法解决了许多相对简单的问题，也是其他方法的基础。

现在我就来说一说什么是迭代法？

我们还是通过线性方程组$Ax=b$来看看。在这里我们分解$A$，使得$A=S-T$，代入等式后得出：$Sx=Tx+b$（等式①）。

按这样的方式持续下去，通过迭代的方式来解$Sx$。这就类似于把复杂问题层层分解和简化，最终使得这个迭代等式成立：$Sx_{k+1}=Tx_{k}+b$（等式②）。

更具体一点来说，我们其实是从$x_{0}$开始，解$Sx_{1}=Tx_{0}+b$。然后，继续解$Sx_{2}=Tx_{1}+b$。一直到$x_{k+1}$非常接近$x_{k}$时，又或者说残余值$r_{k}=b-Ax_{k}$接近$0$时，迭代停止。由于线性方程组的复杂程度不同，这个过程经历几百次的迭代都是有可能的。所以，迭代法的目标就是**比消元法更快速地逼近真实解**。

那么究竟应该如何快速地逼近真实解呢？

这里，$A=S-T$，$A$的分解成了关键，也就是说$A$的分解目标是**每步的运算速度和收敛速度都要快**。每步的运算速度取决于$S$，而收敛速度取决于“错误”(error)，$e_{k}$，这里的错误 $e_{k}$是$x-x_{k}$，也就是说$x$和$x_{k}$的差应该快速逼近0，我们把错误表示成这样：$e_{k+1}=S^{-1}Te_{k}$（等式③）。

它是等式②和①差后得出的结果，迭代的每一步里，错误都会被$S^{-1}T$乘，如果$S^{-1}T$越小，那逼近0的速度就更快。在极端分解情况下，$S=A$，$T=0$，那$Ax=b$又回来了，第一次迭代就能完成收敛，其中$S^{-1}T$等于0。

但是，这一次迭代的成本太高，我们回到了非迭代方式的原点。所以，你也知道，鱼和熊掌不能兼得，$S$的选择成为了关键。那我们要如何在每一次迭代的速度和快速收敛之间做出平衡呢？我给你$S$选择的几种常见方法：

1. 雅可比方法（Jacobi method）：$S$取$A$的对角部分。
2. 高斯-赛德尔方法（Gauss-Seidel）：$S$取$A$的下三角部分，包含对角。
3. ILU方法（Incomplete LU）：$S=L$估计乘$U$估计。

## 雅可比方法实践

总体介绍了迭代法理论之后，我们就进入迭代法运用的实践环节。

首先，我们先来试试使用雅可比方法解线性方程组，雅克比迭代法是众多迭代法中比较早且较简单的一种。所以，作为迭代法的实践开篇比较合适。让我们设一个2×2的线性方程组：

$$
Ax=b
$$

$$
\left\{\begin{array}{c}
2 u-v=4 \\\
-u+2 v=-2
\end{array}\right.
$$

我们很容易就能得出这个方程组的解如下。

$$
\left[\begin{array}{l}
u \\\
v
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{l}
2 \\\
0
\end{array}\right]
$$

现在我们就用雅可比方法来看看怎么解这个方程组：

首先，我们把线性方程组转换成矩阵形式。

$$
\left[\begin{array}{cc}
2 & -1 \\\
-1 & 2
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
4 \\\
-2
\end{array}\right]
$$

接着，把A的对角线放在等式左边，得出$S$矩阵。

$$
S=\left[\begin{array}{ll}
2 & 0 \\\
0 & 2
\end{array}\right]
$$

其余部分移到等式右边，得出$T$矩阵。

$$
T=\left[\begin{array}{ll}
0 & 1 \\\
1 & 0
\end{array}\right]
$$

于是，雅可比迭代就可以表示成下面这样的形式。

$$
\mathrm{S} x_{k+1}=T x_{k}+\mathrm{b}
$$

$$
\left\{\begin{array}{l}
2 u_{k+1}=v_{k}+4 \\\
2 v_{k+1}=u_{k}-2
\end{array}\right.
$$

现在是时候进行迭代了，我们从$u_{0}=v_{0}=0$开始。

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{0} \\\
v_{0}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{l}
0 \\\
0
\end{array}\right]
$$

第一次迭代后，我们得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{1} \\\
v_{1}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
2 \\\
-1
\end{array}\right]
$$

第二次迭代后得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{2} \\\
v_{2}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{l}
\frac{3}{2} \\\
0
\end{array}\right]
$$

第三次迭代后得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{3} \\\
v_{3}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
2 \\\
-\frac{1}{4}
\end{array}\right]
$$

第四次迭代后得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{4} \\\
v_{4}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{l}
\frac{15}{8} \\\
0
\end{array}\right]
$$

第五次迭代后，我们得到：

$$

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{5} \\
v_{5}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
2 \\
-\frac{1}{16}
\end{array}\right]
$$

经过五次迭代后发现收敛，因为它的结果接近真实解。

$$
真实解
\left[\begin{array}{l}
2 \\
0
\end{array}\right]
$$

现在，再来看一下错误等式，$\mathrm{Se}_{k+1}=T e_{k}$，我们把$S$和$T$代入等式，得出：

$$
\left[\begin{array}{ll}
2 & 0 \\
0 & 2
\end{array}\right] e_{k+1}=\left[\begin{array}{ll}
0 & 1 \\
1 & 0
\end{array}\right] e_{k}
$$

计算$S$的逆矩阵和$T$相乘$S^{-1}T$得出：

$$
e_{k+1}=\left[\begin{array}{cc}
0 & \frac{1}{2} \\
\frac{1}{2} & 0
\end{array}\right] e_{k}
$$

这里，$S$的逆矩阵和T相乘$S^{-1}T$有特征值$\frac{1}{2}$和$-\frac{1}{2}$，所以，它的谱半径是$\rho(B)=\frac{1}{2}$。这里的**谱半径**是用来控制收敛的，所以非常重要。谱半径从数学定义上是：矩阵（或者有界线性算子的谱半径）是指其特征值绝对值集合的上确界。这个概念是不是很难理解？具体谱半径的概念你可以查互联网来获取，为了方便你理解，这里我还是用数学方法来简单表达一下。

$$
B=S^{-1} T=\left[\begin{array}{ll}
0 & \frac{1}{2} \\
\frac{1}{2} & 0
\end{array}\right]
$$

通过$S$的逆矩阵和$T$相乘$S^{-1}T$，我们得到：$|\lambda|_{\max }=\frac{1}{2}$，以及：

$$
\left[\begin{array}{cc}
0 & \frac{1}{2} \\
\frac{1}{2} & 0
\end{array}\right]^{2}=\left[\begin{array}{cc}
\frac{1}{4} & 0 \\
0 & \frac{1}{4}
\end{array}\right]
$$

这里的特征值$\frac{1}{2}$非常小，所以10次迭代后，错误就很低了，即$\frac{1^{10}}{2}=\frac{1}{1024}$。而如果特征值是0.99或者0.999，那很显然迭代次数就要多得多，也就是说需要更多时间来做运算。

## 高斯-赛德尔方法实践

现在我们再来看下高斯-赛德尔方法，高斯-赛德尔迭代可以**节约存储**和**加速迭代**，每迭代一次只需一组存储单元，而雅可比迭代需要两组单元。

$S$取$A$的下三角部分，还是使用之前雅可比方法中的例子，我们得出方程组：

$$
\left\{\begin{array}{c}
u_{k+1}=\frac{1}{2} v_{k}+2 \\
v_{k+1}=\frac{1}{2} u_{k+1}-1
\end{array}\right.
$$

这里有一个比较大的变化，那就是$u_{k}$消失了，通过$v_{k}$，我们可以直接得到$u_{k+1}$和$v_{k+1}$，这样有什么好处呢？两大好处是显而易见的，就是**节约存储**和**加速迭代**。

接下来，我们从$u_{0}=0$，$v_{0}=-1$来测试一下迭代。

第一次迭代后，我们得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{1} \\
v_{1}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
\frac{3}{2} \\
\frac{-1}{4}
\end{array}\right]
$$

第二次迭代后得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{2} \\
v_{2}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{l}
\frac{15}{8} \\
\frac{-1}{16}
\end{array}\right]
$$

第三次迭代后得到：

$$
\left[\begin{array} {l}
u_{3} \\\
v_{3}
\end{array}\right]=\left[\begin{array} {r}
\frac{63}{32} \\\
-\frac{1}{64}
\end{array}\right]
$$

经过三次迭代后发现收敛，因为第三次迭代后的结果接近真实解。

错误经过计算分别是$-1, \frac{-1}{4}, \frac{-1}{16}, \frac{-1}{64}$，和刚才使用雅可比方法得出的错误$2, \frac{1}{2}, \frac{1}{8}, \frac{1}{32}$。比较后我们可以发现，无论是迭代次数还是收敛速度方面，高斯-赛德尔方法比雅可比方法速度快、精确度也高得多。

## 逐次超松弛方法

最后，我们在高斯-赛德尔方法上做个小调整，在迭代中引入一个参数“omega”，$ω$，即超松弛因子。然后选择一个合适的$ω$，使得$S^{-1}T$的谱半径尽可能小，这个方法就叫做逐次超松弛方法（Successive over-relaxation method，简称SOR）。

SOR方法的方程是：$ωAx=ωb$，矩阵$S$有$A$的对角线，对角线下是$ωA$，等式右边$T$是$S-ωA$，于是，我们还是使用之前雅可比方法中的例子，得到SOR方程组如下。

$$\left\{\begin{array} {c}
2 u_{k+1}=(2-2 \omega) u_{k}+\omega v_{k}+4 \omega \\\
-\omega u_{k+1}+2 v_{k+1}=(2-2 \omega) v_{k}-2 \omega
\end{array}\right.$$

是不是看起来更复杂了？

没关系，其实它只是在我们眼中看起来复杂，对计算机来说是没区别的。对SOR来说，只是多了一个$ω$，而$ω$选择越好就越快。具体$ω$的选择，以及迭代的过程就不赘述了，我给你一个小提示，你可以在“$ω$大于1”和“$ω$小于1”两种情况下来多选择几个$ω$进行尝试，最后你应该会得到结论：

1. 在$ω$大于1时，$ω$越大，迭代的次数就越多，收敛速度就越慢，$ω$接近1时，迭代的次数越小，收敛速度越快。
2. 在$ω$小于1时，$ω$越小，迭代的次数就越多，收敛速度就越慢，$ω$接近1时，迭代的次数越小，收敛速度越快。

所以，SOR迭代法的关键就是$ω$的选择，它可以被看作是高斯-赛德尔法的扩充。

雅可比法、高斯-赛德尔法，以及SOR迭代法都是定常迭代法。接下来我讲一下和定常迭代法不同的另一类方法，也是实践中用的比较多的方法——**共轭梯度法**（Conjugate gradient），它属于Krylov子空间方法。简单来说，Krylov子空间方法是一种 “降维打击”手段，是一种牺牲精度换取速度的方法。

## 共轭梯度法

要讲共轭梯度法，我们要先解释一下“共轭”，共轭就是按一定的规律相配的一对，通俗点说就是孪生。“轭”是牛拉车用的木头，那什么是共轭关系呢？同时拉一辆车的两头牛，就是共轭关系。

我们根据这个定义再来解释一下共轭方向，向量$p, q \in R$， 若满足条件$pAq=0$， 则称$p$和$q$关于$A$是共轭方向，或者$p$和$q$关于$A$共轭。有了共轭和共轭方向的概念后，再来看共轭梯度法就简单多了。共轭梯度法的出现不仅是为了解决梯度下降法的收敛速度慢，而且也避免了牛顿法需要存储和计算黑塞矩阵（Hessian Matrix）并求逆的缺点。

现在来看看共轭梯度算法，设$Ax=b$，其中$A$是一个实对称正定矩阵。

首先，我们设初始值$x_{0}$为$0$或者一个估计值，来计算$r_{0}=b-A x_{0}$。如果$r_{0}$非常小，那$x_{0}$就是结果，如果不是就继续。

接下来设$p_{0}=r_{0}$，$k=0$。现在我们开始迭代循环。

a.计算$\alpha_{k}$ 。

$$\alpha_{k}=\frac{r_{k}^{T} r_{k}}{p_{k}^{T} A p_{k}}$$

b.计算$x_{k+1}$ 。

$$x_{k+1}=x_{k}+\alpha_{k} p_{k}$$

c.计算$r_{k+1}$。

$$r_{k+1}=r_{k}-\alpha_{k} A p_{k}$$

d.如果$r_{k+1}$非常小，循环结束，如果不是就继续。

e.计算$β_{k}$ 。

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

f.计算$p_{k+1}$ 。

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

g.$k=k+1$。

4. 返回结果$x_{k+1}$。

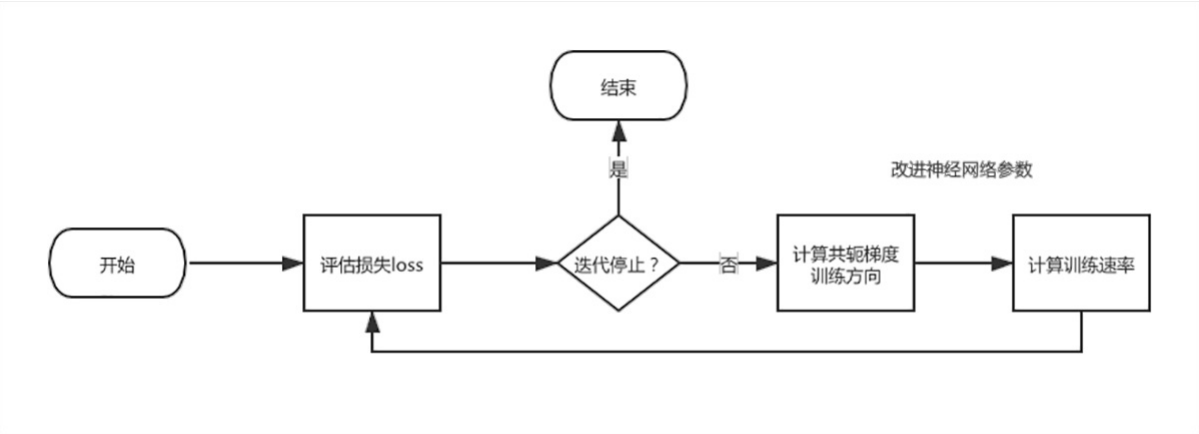
从算法中我们可以看出，共轭梯度法的优点是**存储量小**和**具有步收敛性**。如果你熟悉MATLAB，就会发现共轭梯度法的实现超级简单，只需要短短十几行代码（下方代码来自于MATLAB/GNU Octave的例子）。

```
function x = conjgrad(A, b, x)
    r = b - A * x;
    p = r;
    rsold = r' * r;


    for i = 1:length(b)
        Ap = A * p;
        alpha = rsold / (p' * Ap);
        x = x + alpha * p;
        r = r - alpha * Ap;
        rsnew = r' * r;
        if sqrt(rsnew) < 1e-10
              break;
        end
        p = r + (rsnew / rsold) * p;
        rsold = rsnew;
    end
end
```

## 机器学习中的共轭梯度

共轭梯度法经常被用在训练神经网络中，在实践中已经证明，它是比**梯度下降**更有效的方法，因为就像刚才讲的，它不需要计算黑塞矩阵。那我现在就来讲一讲，使用共轭梯度法的神经网络训练过程。




在整个训练过程中，**参数改进**是重点，当然这也是所有神经网络训练的重点。这个过程是通过计算共轭梯度的训练方向，然后计算训练速率来实现的。在共轭梯度训练算法中，搜索是按共轭方向进行的，也就是说，训练方向是共轭的。所以，收敛速度比梯度下降要快。

现在我们来看训练方向的计算方法。首先，我们设置训练方向向量为$d$，然后，定义一个初始参数向量$w^{0}$，以及一个初始训练方向向量$d^{0}=-g^{0}$，于是，共轭梯度法构造出的训练方向可以表示成：$d^{i+1}=g^{i+1}+d^{i} \cdot \gamma^{i}$。

其中，$g$是梯度向量，$\gamma$是共轭参数。参数通过这个表达式来更新和优化。通常训练速率$\eta$可使用单变量函数优化方法求得。

$$w^{i+1}=w^{i}+d^{i} \cdot \eta^{i}$$

## 本节小结

好了，到这里数值线性代数的迭代法这一讲就结束了，最后我再总结一下前面讲解的内容。

首先，我先解释了数值线性代数，接着再整体讲解了迭代方法。然后，举了一个线性方程组的例子，运用迭代法中的几个比较著名的实践方法：雅可比方法、高斯-赛德尔方法，以及逐次超松弛方法，来解这个线性方程组。最后，我把共轭梯度法用在了深度学习的神经网络训练中。

希望你能在了解了数值线性代数，以及迭代法后，更多地在计算机科学领域中，运用迭代法做矩阵运算。如果有兴趣，你也可以学习其它在实践中使用的迭代法。

## 线性代数练习场

练习时刻到了，这次继续使用第一篇线性方程组里的例子，你可以挑选任意一个迭代法来求解这个线性方程组。

假设，一个旅游团由孩子和大人组成，去程时他们一起坐大巴，每个孩子的票价3元，大人票价3.2元，总共花费118.4元。回程时一起做火车，每个孩子的票价3.5元，大人票价3.6元，总共花费135.2元。请问这个旅游团中有多少孩子和大人？

设小孩人数为$x_{1}$，大人人数为$x_{2}$，于是我们得到了一个方程组：

$$\left\{\begin{array}{c}
3 x_{1}+3.2 x_{2}=118.4 \\\\
3.5 x_{1}+3.6 x_{2}=135.2
\end{array}\right.$$

这个方程组的解是：

$$\left\{\begin{array}{l}
x_{1}=16 \\\\
x_{2}=22
\end{array}\right.$$

你可以计算一下多少次迭代后它能收敛，也就是逼近真实解？以及它的错误$e$又分别是多少？

欢迎在留言区晒出的你的运算过程和结果。如果有收获，也欢迎你把这篇文章分享给你的朋友。

你好，我是朱维刚。欢迎你继续跟我学习线性代数，今天我要讲的内容是“数值线性代数的迭代法，以及如何在实践中运用迭代法求解线性方程组”。

大密度线性方程组的计算已经成为了世界上最快计算机的测试标准。2008年，IBM为美国能源部Los Alamos国家实验室建造了“Roadrunner”计算机系统，它的运算速度达到了1.026 petaflop/s（千万亿次/秒，petaflop是衡量计算机性能的一个重要单位，1 petaflop等于每秒钟进行1千万亿次的数学运算）。按摩尔定律计算，现在世界上最快的计算机已经达到了200 petaflop，我国也早就进入了世界前列，并有望实现1 exaflop/s（百亿亿次/秒），成为世界第一。


可能你会有些疑惑，为什么我要在课程后期来讲数值线性代数呢？

那是因为数值线性代数是一门特殊的学科，是特别为计算机上进行线性代数计算服务的，可以说它是研究矩阵运算算法的学科，偏向算法实践与工程设计。有了之前基础知识的铺垫后，学习数值线性代数会更有效，而且它是可以直接运用在计算机科学中的，比如：在图像压缩中，使用奇异值分解（SVD）来节省内存；在深度学习中，使用共轭梯度来加速神经网络的收敛。

## 迭代方法说明

课程内容的前期一直都在用**直接法**来解线性方程组，比如高斯消元法。但在实践中，我们在面对复杂场景时，更多的会使用**迭代法**来求解（也就是所谓的间接法），因为很多场景会用到大型稀疏矩阵。所以，我打算在这里讲讲机器学习中的迭代法应用。这里需要注意，不是说直接法不重要，直接法解决了许多相对简单的问题，也是其他方法的基础。

现在我就来说一说什么是迭代法？

我们还是通过线性方程组$Ax=b$来看看。在这里我们分解$A$，使得$A=S-T$，代入等式后得出：$Sx=Tx+b$（等式①）。

按这样的方式持续下去，通过迭代的方式来解$Sx$。这就类似于把复杂问题层层分解和简化，最终使得这个迭代等式成立：$Sx_{k+1}=Tx_{k}+b$（等式②）。

更具体一点来说，我们其实是从$x_{0}$开始，解$Sx_{1}=Tx_{0}+b$。然后，继续解$Sx_{2}=Tx_{1}+b$。一直到$x_{k+1}$非常接近$x_{k}$时，又或者说残余值$r_{k}=b-Ax_{k}$接近$0$时，迭代停止。由于线性方程组的复杂程度不同，这个过程经历几百次的迭代都是有可能的。所以，迭代法的目标就是**比消元法更快速地逼近真实解**。

那么究竟应该如何快速地逼近真实解呢？

这里，$A=S-T$，$A$的分解成了关键，也就是说$A$的分解目标是**每步的运算速度和收敛速度都要快**。每步的运算速度取决于$S$，而收敛速度取决于“错误”(error)，$e_{k}$，这里的错误 $e_{k}$是$x-x_{k}$，也就是说$x$和$x_{k}$的差应该快速逼近0，我们把错误表示成这样：$e_{k+1}=S^{-1}Te_{k}$（等式③）。

它是等式②和①差后得出的结果，迭代的每一步里，错误都会被$S^{-1}T$乘，如果$S^{-1}T$越小，那逼近0的速度就更快。在极端分解情况下，$S=A$，$T=0$，那$Ax=b$又回来了，第一次迭代就能完成收敛，其中$S^{-1}T$等于0。

但是，这一次迭代的成本太高，我们回到了非迭代方式的原点。所以，你也知道，鱼和熊掌不能兼得，$S$的选择成为了关键。那我们要如何在每一次迭代的速度和快速收敛之间做出平衡呢？我给你$S$选择的几种常见方法：

1. 雅可比方法（Jacobi method）：$S$取$A$的对角部分。
2. 高斯-赛德尔方法（Gauss-Seidel）：$S$取$A$的下三角部分，包含对角。
3. ILU方法（Incomplete LU）：$S=L$估计乘$U$估计。

## 雅可比方法实践

总体介绍了迭代法理论之后，我们就进入迭代法运用的实践环节。

首先，我们先来试试使用雅可比方法解线性方程组，雅克比迭代法是众多迭代法中比较早且较简单的一种。所以，作为迭代法的实践开篇比较合适。让我们设一个2×2的线性方程组：

$$
Ax=b
$$

$$
\left\{\begin{array}{c}
2 u-v=4 \\\
-u+2 v=-2
\end{array}\right.
$$

我们很容易就能得出这个方程组的解如下。

$$
\left[\begin{array}{l}
u \\\
v
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{l}
2 \\\
0
\end{array}\right]
$$

现在我们就用雅可比方法来看看怎么解这个方程组：

首先，我们把线性方程组转换成矩阵形式。

$$

\left[\begin{array}{cc}
2 & -1 \\\
-1 & 2
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
4 \\\
-2
\end{array}\right]
$$

接着，把A的对角线放在等式左边，得出$S$矩阵。

$$
S=\left[\begin{array}{ll}
2 & 0 \\\
0 & 2
\end{array}\right]
$$

其余部分移到等式右边，得出$T$矩阵。

$$
T=\left[\begin{array}{ll}
0 & 1 \\\
1 & 0
\end{array}\right]
$$

于是，雅可比迭代就可以表示成下面这样的形式。

$$
\mathrm{S} x_{k+1}=T x_{k}+\mathrm{b}
$$

$$
\left\{\begin{array}{l}
2 u_{k+1}=v_{k}+4 \\\
2 v_{k+1}=u_{k}-2
\end{array}\right.
$$

现在是时候进行迭代了，我们从$u_{0}=v_{0}=0$开始。

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{0} \\\
v_{0}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{l}
0 \\\
0
\end{array}\right]
$$

第一次迭代后，我们得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{1} \\\
v_{1}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
2 \\\
-1
\end{array}\right]
$$

第二次迭代后得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{2} \\\
v_{2}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{l}
\frac{3}{2} \\\
0
\end{array}\right]
$$

第三次迭代后得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{3} \\\
v_{3}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
2 \\\
-\frac{1}{4}
\end{array}\right]
$$

第四次迭代后得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{4} \\\
v_{4}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{l}
\frac{15}{8} \\\
0
\end{array}\right]
$$

第五次迭代后，我们得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{5} \\\
v_{5}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
2 \\\

-\frac{1}{16}
\end{array}\right]
$$

经过五次迭代后发现收敛，因为它的结果接近真实解。

$$
真实解
\left[\begin{array}{l}
2 \\\
0
\end{array}\right]
$$

现在，再来看一下错误等式，$\mathrm{Se}_{k+1}=T e_{k}$，我们把$S$和$T$代入等式，得出：

$$
\left[\begin{array}{ll}
2 & 0 \\\
0 & 2
\end{array}\right] e_{k+1}=\left[\begin{array}{ll}
0 & 1 \\\
1 & 0
\end{array}\right] e_{k}
$$

计算$S$的逆矩阵和$T$相乘$S^{-1}T$得出：

$$
e_{k+1}=\left[\begin{array}{cc}
0 & \frac{1}{2} \\\
\frac{1}{2} & 0
\end{array}\right] e_{k}
$$

这里，$S$的逆矩阵和T相乘$S^{-1}T$有特征值$\frac{1}{2}$和$-\frac{1}{2}$，所以，它的谱半径是$\rho(B)=\frac{1}{2}$。这里的**谱半径**是用来控制收敛的，所以非常重要。谱半径从数学定义上是：矩阵（或者有界线性算子的谱半径）是指其特征值绝对值集合的上确界。这个概念是不是很难理解？具体谱半径的概念你可以查互联网来获取，为了方便你理解，这里我还是用数学方法来简单表达一下。

$$
B=S^{-1} T=\left[\begin{array}{ll}
0 & \frac{1}{2} \\\
\frac{1}{2} & 0
\end{array}\right]
$$

通过$S$的逆矩阵和$T$相乘$S^{-1}T$，我们得到：$|\lambda|_{\max }=\frac{1}{2}$，以及：

$$
\left[\begin{array}{cc}
0 & \frac{1}{2} \\\
\frac{1}{2} & 0
\end{array}\right]^{2}=\left[\begin{array}{cc}
\frac{1}{4} & 0 \\\
0 & \frac{1}{4}
\end{array}\right]
$$

这里的特征值$\frac{1}{2}$非常小，所以10次迭代后，错误就很低了，即$\frac{1^{10}}{2}=\frac{1}{1024}$。而如果特征值是0.99或者0.999，那很显然迭代次数就要多得多，也就是说需要更多时间来做运算。

## 高斯-赛德尔方法实践

现在我们再来看下高斯-赛德尔方法，高斯-赛德尔迭代可以**节约存储**和**加速迭代**，每迭代一次只需一组存储单元，而雅可比迭代需要两组单元。

$S$取$A$的下三角部分，还是使用之前雅可比方法中的例子，我们得出方程组：

$$
\left\{\begin{array}{c}
u_{k+1}=\frac{1}{2} v_{k}+2 \\\
v_{k+1}=\frac{1}{2} u_{k+1}-1
\end{array}\right.
$$

这里有一个比较大的变化，那就是$u_{k}$消失了，通过$v_{k}$，我们可以直接得到$u_{k+1}$和$v_{k+1}$，这样有什么好处呢？两大好处是显而易见的，就是**节约存储**和**加速迭代**。

接下来，我们从$u_{0}=0$，$v_{0}=-1$来测试一下迭代。

第一次迭代后，我们得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{1} \\\
v_{1}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
\frac{3}{2} \\\
\frac{-1}{4}
\end{array}\right]
$$

第二次迭代后得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{2} \\\
v_{2}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{l}
\frac{15}{8} \\\
\frac{-1}{16}
\end{array}\right]
$$

第三次迭代后得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{3} \\\
v_{3}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{r}

\frac{63}{32} \\\
-\frac{1}{64}
\end{array}\right]
$$

经过三次迭代后发现收敛，因为第三次迭代后的结果接近真实解。

错误经过计算分别是$-1, \frac{-1}{4}, \frac{-1}{16}, \frac{-1}{64}$，和刚才使用雅可比方法得出的错误$2, \frac{1}{2}, \frac{1}{8}, \frac{1}{32}$。比较后我们可以发现，无论是迭代次数还是收敛速度方面，高斯-赛德尔方法比雅可比方法速度快、精确度也高得多。

## 逐次超松弛方法

最后，我们在高斯-赛德尔方法上做个小调整，在迭代中引入一个参数“omega”，$ω$，即超松弛因子。然后选择一个合适的$ω$，使得$S^{-1}T$的谱半径尽可能小，这个方法就叫做逐次超松弛方法（Successive over-relaxation method，简称SOR）。

SOR方法的方程是：$ωAx=ωb$，矩阵$S$有$A$的对角线，对角线下是$ωA$，等式右边$T$是$S-ωA$，于是，我们还是使用之前雅可比方法中的例子，得到SOR方程组如下。

$$\left\{\begin{array}{c}
2 u_{k+1}=(2-2 \omega) u_{k}+\omega v_{k}+4 \omega \\\
-\omega u_{k+1}+2 v_{k+1}=(2-2 \omega) v_{k}-2 \omega
\end{array}\right.$$

是不是看起来更复杂了？

没关系，其实它只是在我们眼中看起来复杂，对计算机来说是没区别的。对SOR来说，只是多了一个$ω$，而$ω$选择越好就越快。具体$ω$的选择，以及迭代的过程就不赘述了，我给你一个小提示，你可以在“$ω$大于1”和“$ω$小于1”两种情况下来多选择几个$ω$进行尝试，最后你应该会得到结论：

1. 在$ω$大于1时，$ω$越大，迭代的次数就越多，收敛速度就越慢，$ω$接近1时，迭代的次数越小，收敛速度越快。
2. 在$ω$小于1时，$ω$越小，迭代的次数就越多，收敛速度就越慢，$ω$接近1时，迭代的次数越小，收敛速度越快。

所以，SOR迭代法的关键就是$ω$的选择，它可以被看作是高斯-赛德尔法的扩充。

雅可比法、高斯-赛德尔法，以及SOR迭代法都是定常迭代法。接下来我讲一下和定常迭代法不同的另一类方法，也是实践中用的比较多的方法——**共轭梯度法**（Conjugate gradient），它属于Krylov子空间方法。简单来说，Krylov子空间方法是一种 “降维打击” 手段，是一种牺牲精度换取速度的方法。

## 共轭梯度法

要讲共轭梯度法，我们要先解释一下“共轭”，共轭就是按一定的规律相配的一对，通俗点说就是孪生。“轭”是牛拉车用的木头，那什么是共轭关系呢？同时拉一辆车的两头牛，就是共轭关系。

我们根据这个定义再来解释一下共轭方向，向量$p, q \in R$， 若满足条件$pAq=0$， 则称$p$和$q$关于$A$是共轭方向，或者$p$和$q$关于$A$共轭。有了共轭和共轭方向的概念后，再来看共轭梯度法就简单多了。共轭梯度法的出现不仅是为了解决梯度下降法的收敛速度慢，而且也避免了牛顿法需要存储和计算黑塞矩阵（Hessian Matrix）并求逆的缺点。

现在来看看共轭梯度算法，设$Ax=b$，其中$A$是一个实对称正定矩阵。

首先，我们设初始值$x_{0}$为$0$或者一个估计值，来计算$r_{0}:=b-A x_{0}$。如果$r_{0}$非常小，那$x_{0}$就是结果，如果不是就继续。

接下来设$p_{0}:=r_{0}$，$k:=0$。现在我们开始迭代循环。

a.计算$\alpha_{k}$ 。

$$\alpha_{k}:=\frac{r_{k}^{T} r_{k}}{p_{k}^{T} A p_{k}}$$

b.计算$x_{k+1}$ 。

$$x_{k+1}:=x_{k}+\alpha_{k} p_{k}$$

c.计算$r_{k+1}$。

$$r_{k+1}:=r_{k}-\alpha_{k} A p_{k}$$

d.如果$r_{k+1}$非常小，循环结束，如果不是就继续。

e.计算$β_{k}$ 。

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

f.计算$p_{k+1}$ 。

$$p_{k+1}:=r_{k+1}+\beta_{k} p_{k}$$

g.$k:=k+1$。

4. 返回结果$x_{k+1}$。

从算法中我们可以看出，共轭梯度法的优点是**存储量小**和**具有步收敛性**。如果你熟悉MATLAB，就会发现共轭梯度法的实现超级简单，只需要短短十几行代码（下方代码来自于MATLAB/GNU Octave的

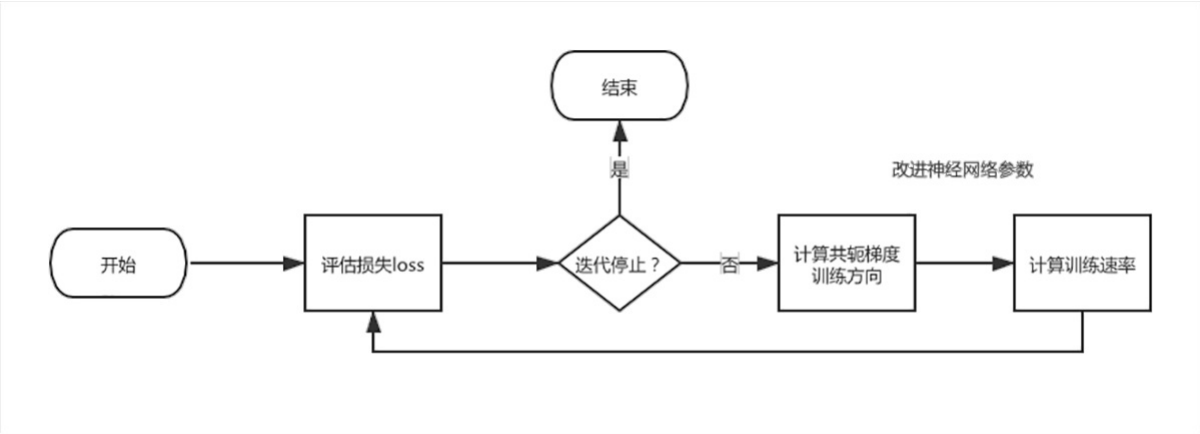
例子）。

```
function x = conjgrad(A, b, x)
    r = b - A * x;
    p = r;
    rsold = r' * r;


    for i = 1:length(b)
        Ap = A * p;
        alpha = rsold / (p' * Ap);
        x = x + alpha * p;
        r = r - alpha * Ap;
        rsnew = r' * r;
        if sqrt(rsnew) < 1e-10
              break;
        end
        p = r + (rsnew / rsold) * p;
        rsold = rsnew;
    end
end
```

## 机器学习中的共轭梯度

共轭梯度法经常被用在训练神经网络中，在实践中已经证明，它是比**梯度下降**更有效的方法，因为就像刚才讲的，它不需要计算黑塞矩阵。那我现在就来讲一讲，使用共轭梯度法的神经网络训练过程。




在整个训练过程中，**参数改进**是重点，当然这也是所有神经网络训练的重点。这个过程是通过计算共轭梯度的训练方向，然后计算训练速率来实现的。在共轭梯度训练算法中，搜索是按共轭方向进行的，也就是说，训练方向是共轭的。所以，收敛速度比梯度下降要快。

现在我们来看训练方向的计算方法。首先，我们设置训练方向向量为$d$，然后，定义一个初始参数向量$w^{0}$，以及一个初始训练方向向量$d^{0}=-g^{0}$，于是，共轭梯度法构造出的训练方向可以表示成：$d^{i+1}=g^{i+1}+d^{i} \cdot \gamma^{i}$。

其中，$g$是梯度向量，$\gamma$是共轭参数。参数通过这个表达式来更新和优化。通常训练速率$\eta$可使用单变量函数优化方法求得。

$$w^{i+1}=w^{i}+d^{i} \cdot \eta^{i}$$

## 本节小结

好了，到这里数值线性代数的迭代法这一讲就结束了，最后我再总结一下前面讲解的内容。

首先，我先解释了数值线性代数，接着再整体讲解了迭代方法。然后，举了一个线性方程组的例子，运用迭代法中的几个比较著名的实践方法：雅可比方法、高斯-赛德尔方法，以及逐次超松弛方法，来解这个线性方程组。最后，我把共轭梯度法用在了深度学习的神经网络训练中。

希望你能在了解了数值线性代数，以及迭代法后，更多地在计算机科学领域中，运用迭代法做矩阵运算。如果有兴趣，你也可以学习其它在实践中使用的迭代法。

## 线性代数练习场

练习时刻到了，这次继续使用第一篇线性方程组里的例子，你可以挑选任意一个迭代法来求解这个线性方程组。

假设，一个旅游团由孩子和大人组成，去程时他们一起坐大巴，每个孩子的票价3元，大人票价3.2元，总共花费118.4元。回程时一起做火车，每个孩子的票价3.5元，大人票价3.6元，总共花费135.2元。请问这个旅游团中有多少孩子和大人？

设小孩人数为$x_{1}$，大人人数为$x_{2}$，于是我们得到了一个方程组：

$$\left\{\begin{array}{c}
3 x_{1}+3.2 x_{2}=118.4 \\\
3.5 x_{1}+3.6 x_{2}=135.2
\end{array}\right.$$

这个方程组的解是：

$$\left\{\begin{array}{l}
x_{1}=16 \\\
x_{2}=22
\end{array}\right.$$

你可以计算一下多少次迭代后它能收敛，也就是逼近真实解？以及它的错误$e$又分别是多少？

欢迎在留言区晒出的你的运算过程和结果。如果有收获，也欢迎你把这篇文章分享给你的朋友。

你好，我是朱维刚。欢迎你继续跟我学习线性代数，今天我要讲的内容是“数值线性代数的迭代法，以及如何在实践中运用迭代法求解线性方程组”。

大密度线性方程组的计算已经成为了世界上最快计算机的测试标准。2008年，IBM为美国能源部Los Alamos国家实验室建造了“Roadrunner”计算机系统，它的运算速度达到了1.026 petaflop/s（千万亿次/秒，petaflop是衡量计算机性能的一个重要单位，1 petaflop等于每秒钟进行1千万亿次的数学运算）。按摩尔定律计算，现在世界上最快的计算机已经达到了200 petaflop，我国也早就进入了世界前列，并有望实现1 exaflop/s（百亿亿次/秒），成为世界第一。


可能你会有些疑惑，为什么我要在课程后期来讲数值线性代数呢？

那是因为数值线性代数是一门特殊的学科，是特别为计算机上进行线性代数计算服务的，可以说它是研究矩阵运算算法的学科，偏向算法实践与工程设计。有了之前基础知识的铺垫后，学习数值线性代数会更有效，而且它是可以直接运用在计算机科学中的，比如：在图像压缩中，使用奇异值分解（SVD）来节省内存；在深度学习中，使用共轭梯度来加速神经网络的收敛。

## 迭代方法说明

课程内容的前期一直都在用**直接法**来解线性方程组，比如高斯消元法。但在实践中，我们在面对复杂场景时，更多的会使用**迭代法**来求解（也就是所谓的间接法），因为很多场景会用到大型稀疏矩阵。所以，我打算在这里讲讲机器学习中的迭代法应用。这里需要注意，不是说直接法不重要，直接法解决了许多相对简单的问题，也是其他方法的基础。

现在我就来说一说什么是迭代法？

我们还是通过线性方程组$Ax=b$来看看。在这里我们分解$A$，使得$A=S-T$，代入等式后得出：$Sx=Tx+b$（等式①）。

按这样的方式持续下去，通过迭代的方式来解$Sx$。这就类似于把复杂问题层层分解和简化，最终使得这个迭代等式成立：$Sx_{k+1}=Tx_{k}+b$（等式②）。

更具体一点来说，我们其实是从$x_{0}$开始，解$Sx_{1}=Tx_{0}+b$。然后，继续解$Sx_{2}=Tx_{1}+b$。一直到$x_{k+1}$非常接近$x_{k}$时，又或者说残余值$r_{k}=b-Ax_{k}$接近$0$时，迭代停止。由于线性方程组的复杂程度不同，这个过程经历几百次的迭代都是有可能的。所以，迭代法的目标就是**比消元法更快速地逼近真实解**。

那么究竟应该如何快速地逼近真实解呢？

这里，$A=S-T$，$A$的分解成了关键，也就是说$A$的分解目标是**每步的运算速度和收敛速度都要快**。每步的运算速度取决于$S$，而收敛速度取决于“错误”(error)，$e_{k}$，这里的错误 $e_{k}$是$x-x_{k}$，也就是说$x$和$x_{k}$的差应该快速逼近0，我们把错误表示成这样：$e_{k+1}=S^{-1}Te_{k}$（等式③）。

它是等式②和①差后得出的结果，迭代的每一步里，错误都会被$S^{-1}T$乘，如果$S^{-1}T$越小，那逼近0的速度就更快。在极端分解情况下，$S=A$，$T=0$，那$Ax=b$又回来了，第一次迭代就能完成收敛，其中$S^{-1}T$等于0。

但是，这一次迭代的成本太高，我们回到了非迭代方式的原点。所以，你也知道，鱼和熊掌不能兼得，$S$的选择成为了关键。那我们要如何在每一次迭代的速度和快速收敛之间做出平衡呢？我给你$S$选择的几种常见方法：

1. 雅可比方法（Jacobi method）：$S$取$A$的对角部分。
2. 高斯-赛德尔方法（Gauss-Seidel）：$S$取$A$的下三角部分，包含对角。
3. ILU方法（Incomplete LU）：$S=L$估计乘$U$估计。

## 雅可比方法实践

总体介绍了迭代法理论之后，我们就进入迭代法运用的实践环节。

首先，我们先来试试使用雅可比方法解线性方程组，雅克比迭代法是众多迭代法中比较早且较简单的一种。所以，作为迭代法的实践开篇比较合适。让我们设一个2×2的线性方程组：

$$
Ax=b
$$

$$
\left\{\begin{array}{c}
2 u-v=4 \\\
-u+2 v=-2
\end{array}\right.
$$

我们很容易就能得出这个方程组的解如下。

$$
\left[\begin{array}{l}
u \\\
v
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{l}
2 \\\
0
\end{array}\right]
$$

现在我们就用雅可比方法来看看怎么解这个方程组：

首先，我们把线性方程组转换成矩阵形式。

$$

\left[\begin{array}{cc}
2 & -1 \\\
-1 & 2
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
4 \\\
-2
\end{array}\right]
$$

接着，把A的对角线放在等式左边，得出$S$矩阵。

$$
S=\left[\begin{array}{ll}
2 & 0 \\\
0 & 2
\end{array}\right]
$$

其余部分移到等式右边，得出$T$矩阵。

$$
T=\left[\begin{array}{ll}
0 & 1 \\\
1 & 0
\end{array}\right]
$$

于是，雅可比迭代就可以表示成下面这样的形式。

$$
\mathrm{S} x_{k+1}=T x_{k}+\mathrm{b}
$$

$$
\left\{\begin{array}{l}
2 u_{k+1}=v_{k}+4 \\\
2 v_{k+1}=u_{k}-2
\end{array}\right.
$$

现在是时候进行迭代了，我们从$u_{0}=v_{0}=0$开始。

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{0} \\\
v_{0}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{l}
0 \\\
0
\end{array}\right]
$$

第一次迭代后，我们得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{1} \\\
v_{1}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
2 \\\
-1
\end{array}\right]
$$

第二次迭代后得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{2} \\\
v_{2}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{l}
\frac{3}{2} \\\
0
\end{array}\right]
$$

第三次迭代后得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{3} \\\
v_{3}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
2 \\\
-\frac{1}{4}
\end{array}\right]
$$

第四次迭代后得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{4} \\\
v_{4}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{l}
\frac{15}{8} \\\
0
\end{array}\right]
$$

第五次迭代后，我们得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{5} \\\
v_{5}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
2 \\\

-\frac{1}{16}
\end{array}\right]
$$

经过五次迭代后发现收敛，因为它的结果接近真实解。

$$
真实解
\left[\begin{array}{l}
2 \\\
0
\end{array}\right]
$$

现在，再来看一下错误等式，$\mathrm{Se}_{k+1}=T e_{k}$，我们把$S$和$T$代入等式，得出：

$$
\left[\begin{array}{ll}
2 & 0 \\\
0 & 2
\end{array}\right] e_{k+1}=\left[\begin{array}{ll}
0 & 1 \\\
1 & 0
\end{array}\right] e_{k}
$$

计算$S$的逆矩阵和$T$相乘$S^{-1}T$得出：

$$
e_{k+1}=\left[\begin{array}{cc}
0 & \frac{1}{2} \\\
\frac{1}{2} & 0
\end{array}\right] e_{k}
$$

这里，$S$的逆矩阵和T相乘$S^{-1}T$有特征值$\frac{1}{2}$和$-\frac{1}{2}$，所以，它的谱半径是$\rho(B)=\frac{1}{2}$。这里的**谱半径**是用来控制收敛的，所以非常重要。谱半径从数学定义上是：矩阵（或者有界线性算子的谱半径）是指其特征值绝对值集合的上确界。这个概念是不是很难理解？具体谱半径的概念你可以查互联网来获取，为了方便你理解，这里我还是用数学方法来简单表达一下。

$$
B=S^{-1} T=\left[\begin{array}{ll}
0 & \frac{1}{2} \\\
\frac{1}{2} & 0
\end{array}\right]
$$

通过$S$的逆矩阵和$T$相乘$S^{-1}T$，我们得到：$|\lambda|_{\max }=\frac{1}{2}$，以及：

$$
\left[\begin{array}{cc}
0 & \frac{1}{2} \\\
\frac{1}{2} & 0
\end{array}\right]^{2}=\left[\begin{array}{cc}
\frac{1}{4} & 0 \\\
0 & \frac{1}{4}
\end{array}\right]
$$

这里的特征值$\frac{1}{2}$非常小，所以10次迭代后，错误就很低了，即$\frac{1^{10}}{2}=\frac{1}{1024}$。而如果特征值是0.99或者0.999，那很显然迭代次数就要多得多，也就是说需要更多时间来做运算。

## 高斯-赛德尔方法实践

现在我们再来看下高斯-赛德尔方法，高斯-赛德尔迭代可以**节约存储**和**加速迭代**，每迭代一次只需一组存储单元，而雅可比迭代需要两组单元。

$S$取$A$的下三角部分，还是使用之前雅可比方法中的例子，我们得出方程组：

$$
\left\{\begin{array}{c}
u_{k+1}=\frac{1}{2} v_{k}+2 \\\
v_{k+1}=\frac{1}{2} u_{k+1}-1
\end{array}\right.
$$

这里有一个比较大的变化，那就是$u_{k}$消失了，通过$v_{k}$，我们可以直接得到$u_{k+1}$和$v_{k+1}$，这样有什么好处呢？两大好处是显而易见的，就是**节约存储**和**加速迭代**。

接下来，我们从$u_{0}=0$，$v_{0}=-1$来测试一下迭代。

第一次迭代后，我们得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{1} \\\
v_{1}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
\frac{3}{2} \\\
\frac{-1}{4}
\end{array}\right]
$$

第二次迭代后得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{2} \\\
v_{2}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{l}
\frac{15}{8} \\\
\frac{-1}{16}
\end{array}\right]
$$

第三次迭代后得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{3} \\\
v_{3}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{r}

\frac{63}{32} \\\
-\frac{1}{64}
\end{array}\right]
$$

经过三次迭代后发现收敛，因为第三次迭代后的结果接近真实解。

错误经过计算分别是$-1, \frac{-1}{4}, \frac{-1}{16}, \frac{-1}{64}$，和刚才使用雅可比方法得出的错误$2, \frac{1}{2}, \frac{1}{8}, \frac{1}{32}$。比较后我们可以发现，无论是迭代次数还是收敛速度方面，高斯-赛德尔方法比雅可比方法速度快、精确度也高得多。

## 逐次超松弛方法

最后，我们在高斯-赛德尔方法上做个小调整，在迭代中引入一个参数“omega”，$ω$，即超松弛因子。然后选择一个合适的$ω$，使得$S^{-1}T$的谱半径尽可能小，这个方法就叫做逐次超松弛方法（Successive over-relaxation method，简称SOR）。

SOR方法的方程是：$ωAx=ωb$，矩阵$S$有$A$的对角线，对角线下是$ωA$，等式右边$T$是$S-ωA$，于是，我们还是使用之前雅可比方法中的例子，得到SOR方程组如下。

$$\left\{\begin{array}{c}
2 u_{k+1}=(2-2 \omega) u_{k}+\omega v_{k}+4 \omega \\\
-\omega u_{k+1}+2 v_{k+1}=(2-2 \omega) v_{k}-2 \omega
\end{array}\right.$$

是不是看起来更复杂了？

没关系，其实它只是在我们眼中看起来复杂，对计算机来说是没区别的。对SOR来说，只是多了一个$ω$，而$ω$选择越好就越快。具体$ω$的选择，以及迭代的过程就不赘述了，我给你一个小提示，你可以在“$ω$大于1”和“$ω$小于1”两种情况下来多选择几个$ω$进行尝试，最后你应该会得到结论：

1. 在$ω$大于1时，$ω$越大，迭代的次数就越多，收敛速度就越慢，$ω$接近1时，迭代的次数越小，收敛速度越快。
2. 在$ω$小于1时，$ω$越小，迭代的次数就越多，收敛速度就越慢，$ω$接近1时，迭代的次数越小，收敛速度越快。

所以，SOR迭代法的关键就是$ω$的选择，它可以被看作是高斯-赛德尔法的扩充。

雅可比法、高斯-赛德尔法，以及SOR迭代法都是定常迭代法。接下来我讲一下和定常迭代法不同的另一类方法，也是实践中用的比较多的方法——**共轭梯度法**（Conjugate gradient），它属于Krylov子空间方法。简单来说，Krylov子空间方法是一种 “降维打击” 手段，是一种牺牲精度换取速度的方法。

## 共轭梯度法

要讲共轭梯度法，我们要先解释一下“共轭”，共轭就是按一定的规律相配的一对，通俗点说就是孪生。“轭”是牛拉车用的木头，那什么是共轭关系呢？同时拉一辆车的两头牛，就是共轭关系。

我们根据这个定义再来解释一下共轭方向，向量$p, q \in R$， 若满足条件$pAq=0$， 则称$p$和$q$关于$A$是共轭方向，或者$p$和$q$关于$A$共轭。有了共轭和共轭方向的概念后，再来看共轭梯度法就简单多了。共轭梯度法的出现不仅是为了解决梯度下降法的收敛速度慢，而且也避免了牛顿法需要存储和计算黑塞矩阵（Hessian Matrix）并求逆的缺点。

现在来看看共轭梯度算法，设$Ax=b$，其中$A$是一个实对称正定矩阵。

首先，我们设初始值$x_{0}$为$0$或者一个估计值，来计算$r_{0}:=b-A x_{0}$。如果$r_{0}$非常小，那$x_{0}$就是结果，如果不是就继续。

接下来设$p_{0}:=r_{0}$，$k:=0$。现在我们开始迭代循环。

a.计算$\alpha_{k}$ 。

$$\alpha_{k}:=\frac{r_{k}^{T} r_{k}}{p_{k}^{T} A p_{k}}$$

b.计算$x_{k+1}$ 。

$$x_{k+1}:=x_{k}+\alpha_{k} p_{k}$$

c.计算$r_{k+1}$。

$$r_{k+1}:=r_{k}-\alpha_{k} A p_{k}$$

d.如果$r_{k+1}$非常小，循环结束，如果不是就继续。

e.计算$β_{k}$ 。

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

f.计算$p_{k+1}$ 。

$$p_{k+1}:=r_{k+1}+\beta_{k} p_{k}$$

g.$k:=k+1$。

4. 返回结果$x_{k+1}$。

从算法中我们可以看出，共轭梯度法的优点是**存储量小**和**具有步收敛性**。如果你熟悉MATLAB，就会发现共轭梯度法的实现超级简单，只需要短短十几行代码（下方代码来自于MATLAB/GNU Octave的

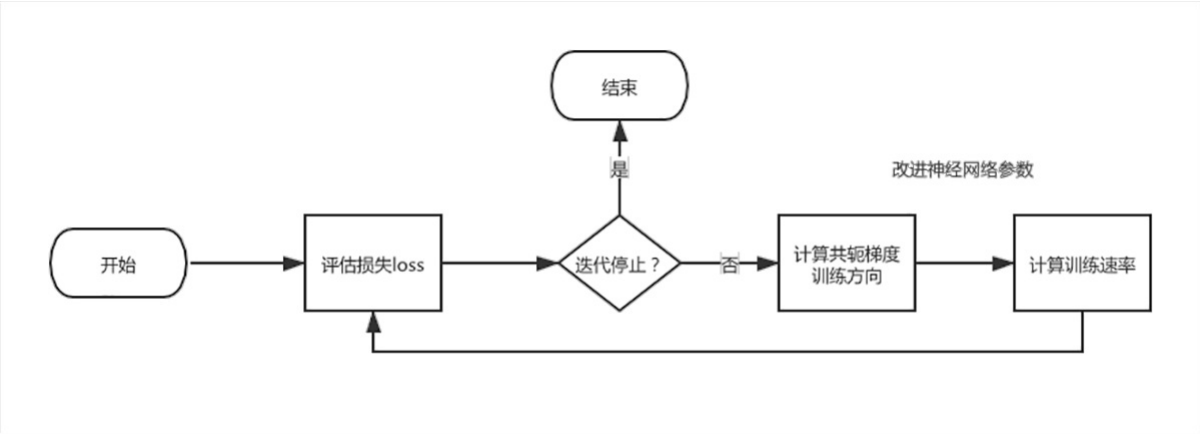
例子）。

```
function x = conjgrad(A, b, x)
    r = b - A * x;
    p = r;
    rsold = r' * r;


    for i = 1:length(b)
        Ap = A * p;
        alpha = rsold / (p' * Ap);
        x = x + alpha * p;
        r = r - alpha * Ap;
        rsnew = r' * r;
        if sqrt(rsnew) < 1e-10
              break;
        end
        p = r + (rsnew / rsold) * p;
        rsold = rsnew;
    end
end
```

## 机器学习中的共轭梯度

共轭梯度法经常被用在训练神经网络中，在实践中已经证明，它是比**梯度下降**更有效的方法，因为就像刚才讲的，它不需要计算黑塞矩阵。那我现在就来讲一讲，使用共轭梯度法的神经网络训练过程。




在整个训练过程中，**参数改进**是重点，当然这也是所有神经网络训练的重点。这个过程是通过计算共轭梯度的训练方向，然后计算训练速率来实现的。在共轭梯度训练算法中，搜索是按共轭方向进行的，也就是说，训练方向是共轭的。所以，收敛速度比梯度下降要快。

现在我们来看训练方向的计算方法。首先，我们设置训练方向向量为$d$，然后，定义一个初始参数向量$w^{0}$，以及一个初始训练方向向量$d^{0}=-g^{0}$，于是，共轭梯度法构造出的训练方向可以表示成：$d^{i+1}=g^{i+1}+d^{i} \cdot \gamma^{i}$。

其中，$g$是梯度向量，$\gamma$是共轭参数。参数通过这个表达式来更新和优化。通常训练速率$\eta$可使用单变量函数优化方法求得。

$$w^{i+1}=w^{i}+d^{i} \cdot \eta^{i}$$

## 本节小结

好了，到这里数值线性代数的迭代法这一讲就结束了，最后我再总结一下前面讲解的内容。

首先，我先解释了数值线性代数，接着再整体讲解了迭代方法。然后，举了一个线性方程组的例子，运用迭代法中的几个比较著名的实践方法：雅可比方法、高斯-赛德尔方法，以及逐次超松弛方法，来解这个线性方程组。最后，我把共轭梯度法用在了深度学习的神经网络训练中。

希望你能在了解了数值线性代数，以及迭代法后，更多地在计算机科学领域中，运用迭代法做矩阵运算。如果有兴趣，你也可以学习其它在实践中使用的迭代法。

## 线性代数练习场

练习时刻到了，这次继续使用第一篇线性方程组里的例子，你可以挑选任意一个迭代法来求解这个线性方程组。

假设，一个旅游团由孩子和大人组成，去程时他们一起坐大巴，每个孩子的票价3元，大人票价3.2元，总共花费118.4元。回程时一起做火车，每个孩子的票价3.5元，大人票价3.6元，总共花费135.2元。请问这个旅游团中有多少孩子和大人？

设小孩人数为$x_{1}$，大人人数为$x_{2}$，于是我们得到了一个方程组：

$$\left\{\begin{array}{c}
3 x_{1}+3.2 x_{2}=118.4 \\\
3.5 x_{1}+3.6 x_{2}=135.2
\end{array}\right.$$

这个方程组的解是：

$$\left\{\begin{array}{l}
x_{1}=16 \\\
x_{2}=22
\end{array}\right.$$

你可以计算一下多少次迭代后它能收敛，也就是逼近真实解？以及它的错误$e$又分别是多少？

欢迎在留言区晒出的你的运算过程和结果。如果有收获，也欢迎你把这篇文章分享给你的朋友。

你好，我是朱维刚。欢迎你继续跟我学习线性代数，今天我要讲的内容是“数值线性代数的迭代法，以及如何在实践中运用迭代法求解线性方程组”。

大密度线性方程组的计算已经成为了世界上最快计算机的测试标准。2008年，IBM为美国能源部Los Alamos国家实验室建造了“Roadrunner”计算机系统，它的运算速度达到了1.026 petaflop/s（千万亿次/秒，petaflop是衡量计算机性能的一个重要单位，1 petaflop等于每秒钟进行1千万亿次的数学运算）。按摩尔定律计算，现在世界上最快的计算机已经达到了200 petaflop，我国也早就进入了世界前列，并有望实现1 exaflop/s（百亿亿次/秒），成为世界第一。


可能你会有些疑惑，为什么我要在课程后期来讲数值线性代数呢？

那是因为数值线性代数是一门特殊的学科，是特别为计算机上进行线性代数计算服务的，可以说它是研究矩阵运算算法的学科，偏向算法实践与工程设计。有了之前基础知识的铺垫后，学习数值线性代数会更有效，而且它是可以直接运用在计算机科学中的，比如：在图像压缩中，使用奇异值分解（SVD）来节省内存；在深度学习中，使用共轭梯度来加速神经网络的收敛。

## 迭代方法说明

课程内容的前期一直都在用**直接法**来解线性方程组，比如高斯消元法。但在实践中，我们在面对复杂场景时，更多的会使用**迭代法**来求解（也就是所谓的间接法），因为很多场景会用到大型稀疏矩阵。所以，我打算在这里讲讲机器学习中的迭代法应用。这里需要注意，不是说直接法不重要，直接法解决了许多相对简单的问题，也是其他方法的基础。

现在我就来说一说什么是迭代法？

我们还是通过线性方程组$Ax=b$来看看。在这里我们分解$A$，使得$A=S-T$，代入等式后得出：$Sx=Tx+b$（等式①）。

按这样的方式持续下去，通过迭代的方式来解$Sx$。这就类似于把复杂问题层层分解和简化，最终使得这个迭代等式成立：$Sx_{k+1}=Tx_{k}+b$（等式②）。

更具体一点来说，我们其实是从$x_{0}$开始，解$Sx_{1}=Tx_{0}+b$。然后，继续解$Sx_{2}=Tx_{1}+b$。一直到$x_{k+1}$非常接近$x_{k}$时，又或者说残余值$r_{k}=b-Ax_{k}$接近$0$时，迭代停止。由于线性方程组的复杂程度不同，这个过程经历几百次的迭代都是有可能的。所以，迭代法的目标就是**比消元法更快速地逼近真实解**。

那么究竟应该如何快速地逼近真实解呢？

这里，$A=S-T$，$A$的分解成了关键，也就是说$A$的分解目标是**每步的运算速度和收敛速度都要快**。每步的运算速度取决于$S$，而收敛速度取决于“错误”(error)，$e_{k}$，这里的错误 $e_{k}$是$x-x_{k}$，也就是说$x$和$x_{k}$的差应该快速逼近0，我们把错误表示成这样：$e_{k+1}=S^{-1}Te_{k}$（等式③）。

它是等式②和①差后得出的结果，迭代的每一步里，错误都会被$S^{-1}T$乘，如果$S^{-1}T$越小，那逼近0的速度就更快。在极端分解情况下，$S=A$，$T=0$，那$Ax=b$又回来了，第一次迭代就能完成收敛，其中$S^{-1}T$等于0。

但是，这一次迭代的成本太高，我们回到了非迭代方式的原点。所以，你也知道，鱼和熊掌不能兼得，$S$的选择成为了关键。那我们要如何在每一次迭代的速度和快速收敛之间做出平衡呢？我给你$S$选择的几种常见方法：

1. 雅可比方法（Jacobi method）：$S$取$A$的对角部分。
2. 高斯-赛德尔方法（Gauss-Seidel）：$S$取$A$的下三角部分，包含对角。
3. ILU方法（Incomplete LU）：$S=L$估计乘$U$估计。

## 雅可比方法实践

总体介绍了迭代法理论之后，我们就进入迭代法运用的实践环节。

首先，我们先来试试使用雅可比方法解线性方程组，雅克比迭代法是众多迭代法中比较早且较简单的一种。所以，作为迭代法的实践开篇比较合适。让我们设一个2×2的线性方程组：

$$
Ax=b
$$

$$
\left\{\begin{array}{c}
2 u-v=4 \\\
-u+2 v=-2
\end{array}\right.
$$

我们很容易就能得出这个方程组的解如下。

$$
\left[\begin{array}{l}
u \\\
v
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{l}
2 \\\
0
\end{array}\right]
$$

现在我们就用雅可比方法来看看怎么解这个方程组：

首先，我们把线性方程组转换成矩阵形式。

$$

\left[\begin{array}{cc}
2 & -1 \\\
-1 & 2
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
4 \\\
-2
\end{array}\right]
$$

接着，把A的对角线放在等式左边，得出$S$矩阵。

$$
S=\left[\begin{array}{ll}
2 & 0 \\\
0 & 2
\end{array}\right]
$$

其余部分移到等式右边，得出$T$矩阵。

$$
T=\left[\begin{array}{ll}
0 & 1 \\\
1 & 0
\end{array}\right]
$$

于是，雅可比迭代就可以表示成下面这样的形式。

$$
\mathrm{S} x_{k+1}=T x_{k}+\mathrm{b}
$$

$$
\left\{\begin{array}{l}
2 u_{k+1}=v_{k}+4 \\\
2 v_{k+1}=u_{k}-2
\end{array}\right.
$$

现在是时候进行迭代了，我们从$u_{0}=v_{0}=0$开始。

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{0} \\\
v_{0}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{l}
0 \\\
0
\end{array}\right]
$$

第一次迭代后，我们得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{1} \\\
v_{1}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
2 \\\
-1
\end{array}\right]
$$

第二次迭代后得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{2} \\\
v_{2}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{l}
\frac{3}{2} \\\
0
\end{array}\right]
$$

第三次迭代后得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{3} \\\
v_{3}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
2 \\\
-\frac{1}{4}
\end{array}\right]
$$

第四次迭代后得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{4} \\\
v_{4}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{l}
\frac{15}{8} \\\
0
\end{array}\right]
$$

第五次迭代后，我们得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{5} \\\
v_{5}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
2 \\\

-\frac{1}{16}
\end{array}\right]
$$

经过五次迭代后发现收敛，因为它的结果接近真实解。

$$
真实解
\left[\begin{array}{l}
2 \\\
0
\end{array}\right]
$$

现在，再来看一下错误等式，$\mathrm{Se}_{k+1}=T e_{k}$，我们把$S$和$T$代入等式，得出：

$$
\left[\begin{array}{ll}
2 & 0 \\\
0 & 2
\end{array}\right] e_{k+1}=\left[\begin{array}{ll}
0 & 1 \\\
1 & 0
\end{array}\right] e_{k}
$$

计算$S$的逆矩阵和$T$相乘$S^{-1}T$得出：

$$
e_{k+1}=\left[\begin{array}{cc}
0 & \frac{1}{2} \\\
\frac{1}{2} & 0
\end{array}\right] e_{k}
$$

这里，$S$的逆矩阵和T相乘$S^{-1}T$有特征值$\frac{1}{2}$和$-\frac{1}{2}$，所以，它的谱半径是$\rho(B)=\frac{1}{2}$。这里的**谱半径**是用来控制收敛的，所以非常重要。谱半径从数学定义上是：矩阵（或者有界线性算子的谱半径）是指其特征值绝对值集合的上确界。这个概念是不是很难理解？具体谱半径的概念你可以查互联网来获取，为了方便你理解，这里我还是用数学方法来简单表达一下。

$$
B=S^{-1} T=\left[\begin{array}{ll}
0 & \frac{1}{2} \\\
\frac{1}{2} & 0
\end{array}\right]
$$

通过$S$的逆矩阵和$T$相乘$S^{-1}T$，我们得到：$|\lambda|_{\max }=\frac{1}{2}$，以及：

$$
\left[\begin{array}{cc}
0 & \frac{1}{2} \\\
\frac{1}{2} & 0
\end{array}\right]^{2}=\left[\begin{array}{cc}
\frac{1}{4} & 0 \\\
0 & \frac{1}{4}
\end{array}\right]
$$

这里的特征值$\frac{1}{2}$非常小，所以10次迭代后，错误就很低了，即$\frac{1^{10}}{2}=\frac{1}{1024}$。而如果特征值是0.99或者0.999，那很显然迭代次数就要多得多，也就是说需要更多时间来做运算。

## 高斯-赛德尔方法实践

现在我们再来看下高斯-赛德尔方法，高斯-赛德尔迭代可以**节约存储**和**加速迭代**，每迭代一次只需一组存储单元，而雅可比迭代需要两组单元。

$S$取$A$的下三角部分，还是使用之前雅可比方法中的例子，我们得出方程组：

$$
\left\{\begin{array}{c}
u_{k+1}=\frac{1}{2} v_{k}+2 \\\
v_{k+1}=\frac{1}{2} u_{k+1}-1
\end{array}\right.
$$

这里有一个比较大的变化，那就是$u_{k}$消失了，通过$v_{k}$，我们可以直接得到$u_{k+1}$和$v_{k+1}$，这样有什么好处呢？两大好处是显而易见的，就是**节约存储**和**加速迭代**。

接下来，我们从$u_{0}=0$，$v_{0}=-1$来测试一下迭代。

第一次迭代后，我们得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{1} \\\
v_{1}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
\frac{3}{2} \\\
\frac{-1}{4}
\end{array}\right]
$$

第二次迭代后得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{2} \\\
v_{2}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{l}
\frac{15}{8} \\\
\frac{-1}{16}
\end{array}\right]
$$

第三次迭代后得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{3} \\\
v_{3}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{r}

\frac{63}{32} \\\
-\frac{1}{64}
\end{array}\right]
$$

经过三次迭代后发现收敛，因为第三次迭代后的结果接近真实解。

错误经过计算分别是$-1, \frac{-1}{4}, \frac{-1}{16}, \frac{-1}{64}$，和刚才使用雅可比方法得出的错误$2, \frac{1}{2}, \frac{1}{8}, \frac{1}{32}$。比较后我们可以发现，无论是迭代次数还是收敛速度方面，高斯-赛德尔方法比雅可比方法速度快、精确度也高得多。

## 逐次超松弛方法

最后，我们在高斯-赛德尔方法上做个小调整，在迭代中引入一个参数“omega”，$ω$，即超松弛因子。然后选择一个合适的$ω$，使得$S^{-1}T$的谱半径尽可能小，这个方法就叫做逐次超松弛方法（Successive over-relaxation method，简称SOR）。

SOR方法的方程是：$ωAx=ωb$，矩阵$S$有$A$的对角线，对角线下是$ωA$，等式右边$T$是$S-ωA$，于是，我们还是使用之前雅可比方法中的例子，得到SOR方程组如下。

$$\left\{\begin{array}{c}
2 u_{k+1}=(2-2 \omega) u_{k}+\omega v_{k}+4 \omega \\\
-\omega u_{k+1}+2 v_{k+1}=(2-2 \omega) v_{k}-2 \omega
\end{array}\right.$$

是不是看起来更复杂了？

没关系，其实它只是在我们眼中看起来复杂，对计算机来说是没区别的。对SOR来说，只是多了一个$ω$，而$ω$选择越好就越快。具体$ω$的选择，以及迭代的过程就不赘述了，我给你一个小提示，你可以在“$ω$大于1”和“$ω$小于1”两种情况下来多选择几个$ω$进行尝试，最后你应该会得到结论：

1. 在$ω$大于1时，$ω$越大，迭代的次数就越多，收敛速度就越慢，$ω$接近1时，迭代的次数越小，收敛速度越快。
2. 在$ω$小于1时，$ω$越小，迭代的次数就越多，收敛速度就越慢，$ω$接近1时，迭代的次数越小，收敛速度越快。

所以，SOR迭代法的关键就是$ω$的选择，它可以被看作是高斯-赛德尔法的扩充。

雅可比法、高斯-赛德尔法，以及SOR迭代法都是定常迭代法。接下来我讲一下和定常迭代法不同的另一类方法，也是实践中用的比较多的方法——**共轭梯度法**（Conjugate gradient），它属于Krylov子空间方法。简单来说，Krylov子空间方法是一种 “降维打击” 手段，是一种牺牲精度换取速度的方法。

## 共轭梯度法

要讲共轭梯度法，我们要先解释一下“共轭”，共轭就是按一定的规律相配的一对，通俗点说就是孪生。“轭”是牛拉车用的木头，那什么是共轭关系呢？同时拉一辆车的两头牛，就是共轭关系。

我们根据这个定义再来解释一下共轭方向，向量$p, q \in R$， 若满足条件$pAq=0$， 则称$p$和$q$关于$A$是共轭方向，或者$p$和$q$关于$A$共轭。有了共轭和共轭方向的概念后，再来看共轭梯度法就简单多了。共轭梯度法的出现不仅是为了解决梯度下降法的收敛速度慢，而且也避免了牛顿法需要存储和计算黑塞矩阵（Hessian Matrix）并求逆的缺点。

现在来看看共轭梯度算法，设$Ax=b$，其中$A$是一个实对称正定矩阵。

首先，我们设初始值$x_{0}$为$0$或者一个估计值，来计算$r_{0}:=b-A x_{0}$。如果$r_{0}$非常小，那$x_{0}$就是结果，如果不是就继续。

接下来设$p_{0}:=r_{0}$，$k:=0$。现在我们开始迭代循环。

a.计算$\alpha_{k}$ 。

$$\alpha_{k}:=\frac{r_{k}^{T} r_{k}}{p_{k}^{T} A p_{k}}$$

b.计算$x_{k+1}$ 。

$$x_{k+1}:=x_{k}+\alpha_{k} p_{k}$$

c.计算$r_{k+1}$。

$$r_{k+1}:=r_{k}-\alpha_{k} A p_{k}$$

d.如果$r_{k+1}$非常小，循环结束，如果不是就继续。

e.计算$β_{k}$ 。

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

f.计算$p_{k+1}$ 。

$$p_{k+1}:=r_{k+1}+\beta_{k} p_{k}$$

g.$k:=k+1$。

4. 返回结果$x_{k+1}$。

从算法中我们可以看出，共轭梯度法的优点是**存储量小**和**具有步收敛性**。如果你熟悉MATLAB，就会发现共轭梯度法的实现超级简单，只需要短短十几行代码（下方代码来自于MATLAB/GNU Octave的

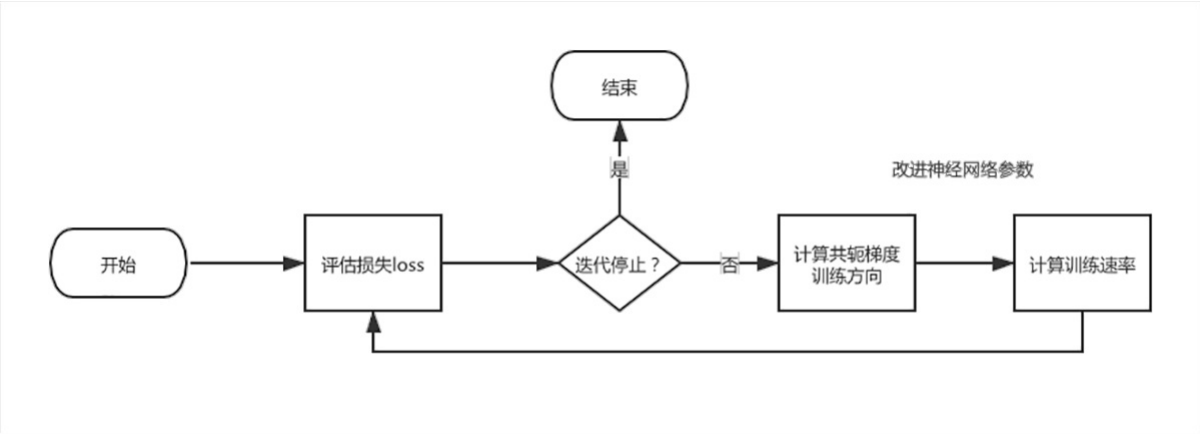
例子）。

```
function x = conjgrad(A, b, x)
    r = b - A * x;
    p = r;
    rsold = r' * r;


    for i = 1:length(b)
        Ap = A * p;
        alpha = rsold / (p' * Ap);
        x = x + alpha * p;
        r = r - alpha * Ap;
        rsnew = r' * r;
        if sqrt(rsnew) < 1e-10
              break;
        end
        p = r + (rsnew / rsold) * p;
        rsold = rsnew;
    end
end
```

## 机器学习中的共轭梯度

共轭梯度法经常被用在训练神经网络中，在实践中已经证明，它是比**梯度下降**更有效的方法，因为就像刚才讲的，它不需要计算黑塞矩阵。那我现在就来讲一讲，使用共轭梯度法的神经网络训练过程。




在整个训练过程中，**参数改进**是重点，当然这也是所有神经网络训练的重点。这个过程是通过计算共轭梯度的训练方向，然后计算训练速率来实现的。在共轭梯度训练算法中，搜索是按共轭方向进行的，也就是说，训练方向是共轭的。所以，收敛速度比梯度下降要快。

现在我们来看训练方向的计算方法。首先，我们设置训练方向向量为$d$，然后，定义一个初始参数向量$w^{0}$，以及一个初始训练方向向量$d^{0}=-g^{0}$，于是，共轭梯度法构造出的训练方向可以表示成：$d^{i+1}=g^{i+1}+d^{i} \cdot \gamma^{i}$。

其中，$g$是梯度向量，$\gamma$是共轭参数。参数通过这个表达式来更新和优化。通常训练速率$\eta$可使用单变量函数优化方法求得。

$$w^{i+1}=w^{i}+d^{i} \cdot \eta^{i}$$

## 本节小结

好了，到这里数值线性代数的迭代法这一讲就结束了，最后我再总结一下前面讲解的内容。

首先，我先解释了数值线性代数，接着再整体讲解了迭代方法。然后，举了一个线性方程组的例子，运用迭代法中的几个比较著名的实践方法：雅可比方法、高斯-赛德尔方法，以及逐次超松弛方法，来解这个线性方程组。最后，我把共轭梯度法用在了深度学习的神经网络训练中。

希望你能在了解了数值线性代数，以及迭代法后，更多地在计算机科学领域中，运用迭代法做矩阵运算。如果有兴趣，你也可以学习其它在实践中使用的迭代法。

## 线性代数练习场

练习时刻到了，这次继续使用第一篇线性方程组里的例子，你可以挑选任意一个迭代法来求解这个线性方程组。

假设，一个旅游团由孩子和大人组成，去程时他们一起坐大巴，每个孩子的票价3元，大人票价3.2元，总共花费118.4元。回程时一起做火车，每个孩子的票价3.5元，大人票价3.6元，总共花费135.2元。请问这个旅游团中有多少孩子和大人？

设小孩人数为$x_{1}$，大人人数为$x_{2}$，于是我们得到了一个方程组：

$$\left\{\begin{array}{c}
3 x_{1}+3.2 x_{2}=118.4 \\\
3.5 x_{1}+3.6 x_{2}=135.2
\end{array}\right.$$

这个方程组的解是：

$$\left\{\begin{array}{l}
x_{1}=16 \\\
x_{2}=22
\end{array}\right.$$

你可以计算一下多少次迭代后它能收敛，也就是逼近真实解？以及它的错误$e$又分别是多少？

欢迎在留言区晒出的你的运算过程和结果。如果有收获，也欢迎你把这篇文章分享给你的朋友。

你好，我是朱维刚。欢迎你继续跟我学习线性代数，今天我要讲的内容是“数值线性代数的迭代法，以及如何在实践中运用迭代法求解线性方程组”。

大密度线性方程组的计算已经成为了世界上最快计算机的测试标准。2008年，IBM为美国能源部Los Alamos国家实验室建造了“Roadrunner”计算机系统，它的运算速度达到了1.026 petaflop/s（千万亿次/秒，petaflop是衡量计算机性能的一个重要单位，1 petaflop等于每秒钟进行1千万亿次的数学运算）。按摩尔定律计算，现在世界上最快的计算机已经达到了200 petaflop，我国也早就进入了世界前列，并有望实现1 exaflop/s（百亿亿次/秒），成为世界第一。


可能你会有些疑惑，为什么我要在课程后期来讲数值线性代数呢？

那是因为数值线性代数是一门特殊的学科，是特别为计算机上进行线性代数计算服务的，可以说它是研究矩阵运算算法的学科，偏向算法实践与工程设计。有了之前基础知识的铺垫后，学习数值线性代数会更有效，而且它是可以直接运用在计算机科学中的，比如：在图像压缩中，使用奇异值分解（SVD）来节省内存；在深度学习中，使用共轭梯度来加速神经网络的收敛。

## 迭代方法说明

课程内容的前期一直都在用**直接法**来解线性方程组，比如高斯消元法。但在实践中，我们在面对复杂场景时，更多的会使用**迭代法**来求解（也就是所谓的间接法），因为很多场景会用到大型稀疏矩阵。所以，我打算在这里讲讲机器学习中的迭代法应用。这里需要注意，不是说直接法不重要，直接法解决了许多相对简单的问题，也是其他方法的基础。

现在我就来说一说什么是迭代法？

我们还是通过线性方程组$Ax=b$来看看。在这里我们分解$A$，使得$A=S-T$，代入等式后得出：$Sx=Tx+b$（等式①）。

按这样的方式持续下去，通过迭代的方式来解$Sx$。这就类似于把复杂问题层层分解和简化，最终使得这个迭代等式成立：$Sx_{k+1}=Tx_{k}+b$（等式②）。

更具体一点来说，我们其实是从$x_{0}$开始，解$Sx_{1}=Tx_{0}+b$。然后，继续解$Sx_{2}=Tx_{1}+b$。一直到$x_{k+1}$非常接近$x_{k}$时，又或者说残余值$r_{k}=b-Ax_{k}$接近$0$时，迭代停止。由于线性方程组的复杂程度不同，这个过程经历几百次的迭代都是有可能的。所以，迭代法的目标就是**比消元法更快速地逼近真实解**。

那么究竟应该如何快速地逼近真实解呢？

这里，$A=S-T$，$A$的分解成了关键，也就是说$A$的分解目标是**每步的运算速度和收敛速度都要快**。每步的运算速度取决于$S$，而收敛速度取决于“错误”(error)，$e_{k}$，这里的错误 $e_{k}$是$x-x_{k}$，也就是说$x$和$x_{k}$的差应该快速逼近0，我们把错误表示成这样：$e_{k+1}=S^{-1}Te_{k}$（等式③）。

它是等式②和①差后得出的结果，迭代的每一步里，错误都会被$S^{-1}T$乘，如果$S^{-1}T$越小，那逼近0的速度就更快。在极端分解情况下，$S=A$，$T=0$，那$Ax=b$又回来了，第一次迭代就能完成收敛，其中$S^{-1}T$等于0。

但是，这一次迭代的成本太高，我们回到了非迭代方式的原点。所以，你也知道，鱼和熊掌不能兼得，$S$的选择成为了关键。那我们要如何在每一次迭代的速度和快速收敛之间做出平衡呢？我给你$S$选择的几种常见方法：

1. 雅可比方法（Jacobi method）：$S$取$A$的对角部分。
2. 高斯-赛德尔方法（Gauss-Seidel）：$S$取$A$的下三角部分，包含对角。
3. ILU方法（Incomplete LU）：$S=L$估计乘$U$估计。

## 雅可比方法实践

总体介绍了迭代法理论之后，我们就进入迭代法运用的实践环节。

首先，我们先来试试使用雅可比方法解线性方程组，雅克比迭代法是众多迭代法中比较早且较简单的一种。所以，作为迭代法的实践开篇比较合适。让我们设一个2×2的线性方程组：

$$
Ax=b
$$

$$
\left\{\begin{array}{c}
2 u-v=4 \\\
-u+2 v=-2
\end{array}\right.
$$

我们很容易就能得出这个方程组的解如下。

$$
\left[\begin{array}{l}
u \\\
v
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{l}
2 \\\
0
\end{array}\right]
$$

现在我们就用雅可比方法来看看怎么解这个方程组：

首先，我们把线性方程组转换成矩阵形式。

$$

\left[\begin{array}{cc}
2 & -1 \\\
-1 & 2
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
4 \\\
-2
\end{array}\right]
$$

接着，把A的对角线放在等式左边，得出$S$矩阵。

$$
S=\left[\begin{array}{ll}
2 & 0 \\\
0 & 2
\end{array}\right]
$$

其余部分移到等式右边，得出$T$矩阵。

$$
T=\left[\begin{array}{ll}
0 & 1 \\\
1 & 0
\end{array}\right]
$$

于是，雅可比迭代就可以表示成下面这样的形式。

$$
\mathrm{S} x_{k+1}=T x_{k}+\mathrm{b}
$$

$$
\left\{\begin{array}{l}
2 u_{k+1}=v_{k}+4 \\\
2 v_{k+1}=u_{k}-2
\end{array}\right.
$$

现在是时候进行迭代了，我们从$u_{0}=v_{0}=0$开始。

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{0} \\\
v_{0}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{l}
0 \\\
0
\end{array}\right]
$$

第一次迭代后，我们得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{1} \\\
v_{1}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
2 \\\
-1
\end{array}\right]
$$

第二次迭代后得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{2} \\\
v_{2}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{l}
\frac{3}{2} \\\
0
\end{array}\right]
$$

第三次迭代后得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{3} \\\
v_{3}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
2 \\\
-\frac{1}{4}
\end{array}\right]
$$

第四次迭代后得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{4} \\\
v_{4}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{l}
\frac{15}{8} \\\
0
\end{array}\right]
$$

第五次迭代后，我们得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{5} \\\
v_{5}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
2 \\\

-\frac{1}{16}
\end{array}\right]
$$

经过五次迭代后发现收敛，因为它的结果接近真实解。

$$
真实解
\left[\begin{array}{l}
2 \\\
0
\end{array}\right]
$$

现在，再来看一下错误等式，$\mathrm{Se}_{k+1}=T e_{k}$，我们把$S$和$T$代入等式，得出：

$$
\left[\begin{array}{ll}
2 & 0 \\\
0 & 2
\end{array}\right] e_{k+1}=\left[\begin{array}{ll}
0 & 1 \\\
1 & 0
\end{array}\right] e_{k}
$$

计算$S$的逆矩阵和$T$相乘$S^{-1}T$得出：

$$
e_{k+1}=\left[\begin{array}{cc}
0 & \frac{1}{2} \\\
\frac{1}{2} & 0
\end{array}\right] e_{k}
$$

这里，$S$的逆矩阵和T相乘$S^{-1}T$有特征值$\frac{1}{2}$和$-\frac{1}{2}$，所以，它的谱半径是$\rho(B)=\frac{1}{2}$。这里的**谱半径**是用来控制收敛的，所以非常重要。谱半径从数学定义上是：矩阵（或者有界线性算子的谱半径）是指其特征值绝对值集合的上确界。这个概念是不是很难理解？具体谱半径的概念你可以查互联网来获取，为了方便你理解，这里我还是用数学方法来简单表达一下。

$$
B=S^{-1} T=\left[\begin{array}{ll}
0 & \frac{1}{2} \\\
\frac{1}{2} & 0
\end{array}\right]
$$

通过$S$的逆矩阵和$T$相乘$S^{-1}T$，我们得到：$|\lambda|_{\max }=\frac{1}{2}$，以及：

$$
\left[\begin{array}{cc}
0 & \frac{1}{2} \\\
\frac{1}{2} & 0
\end{array}\right]^{2}=\left[\begin{array}{cc}
\frac{1}{4} & 0 \\\
0 & \frac{1}{4}
\end{array}\right]
$$

这里的特征值$\frac{1}{2}$非常小，所以10次迭代后，错误就很低了，即$\frac{1^{10}}{2}=\frac{1}{1024}$。而如果特征值是0.99或者0.999，那很显然迭代次数就要多得多，也就是说需要更多时间来做运算。

## 高斯-赛德尔方法实践

现在我们再来看下高斯-赛德尔方法，高斯-赛德尔迭代可以**节约存储**和**加速迭代**，每迭代一次只需一组存储单元，而雅可比迭代需要两组单元。

$S$取$A$的下三角部分，还是使用之前雅可比方法中的例子，我们得出方程组：

$$
\left\{\begin{array}{c}
u_{k+1}=\frac{1}{2} v_{k}+2 \\\
v_{k+1}=\frac{1}{2} u_{k+1}-1
\end{array}\right.
$$

这里有一个比较大的变化，那就是$u_{k}$消失了，通过$v_{k}$，我们可以直接得到$u_{k+1}$和$v_{k+1}$，这样有什么好处呢？两大好处是显而易见的，就是**节约存储**和**加速迭代**。

接下来，我们从$u_{0}=0$，$v_{0}=-1$来测试一下迭代。

第一次迭代后，我们得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{1} \\\
v_{1}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
\frac{3}{2} \\\
\frac{-1}{4}
\end{array}\right]
$$

第二次迭代后得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{2} \\\
v_{2}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{l}
\frac{15}{8} \\\
\frac{-1}{16}
\end{array}\right]
$$

第三次迭代后得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{3} \\\
v_{3}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{r}

\frac{63}{32} \\\
-\frac{1}{64}
\end{array}\right]
$$

经过三次迭代后发现收敛，因为第三次迭代后的结果接近真实解。

错误经过计算分别是$-1, \frac{-1}{4}, \frac{-1}{16}, \frac{-1}{64}$，和刚才使用雅可比方法得出的错误$2, \frac{1}{2}, \frac{1}{8}, \frac{1}{32}$。比较后我们可以发现，无论是迭代次数还是收敛速度方面，高斯-赛德尔方法比雅可比方法速度快、精确度也高得多。

## 逐次超松弛方法

最后，我们在高斯-赛德尔方法上做个小调整，在迭代中引入一个参数“omega”，$ω$，即超松弛因子。然后选择一个合适的$ω$，使得$S^{-1}T$的谱半径尽可能小，这个方法就叫做逐次超松弛方法（Successive over-relaxation method，简称SOR）。

SOR方法的方程是：$ωAx=ωb$，矩阵$S$有$A$的对角线，对角线下是$ωA$，等式右边$T$是$S-ωA$，于是，我们还是使用之前雅可比方法中的例子，得到SOR方程组如下。

$$\left\{\begin{array}{c}
2 u_{k+1}=(2-2 \omega) u_{k}+\omega v_{k}+4 \omega \\\
-\omega u_{k+1}+2 v_{k+1}=(2-2 \omega) v_{k}-2 \omega
\end{array}\right.$$

是不是看起来更复杂了？

没关系，其实它只是在我们眼中看起来复杂，对计算机来说是没区别的。对SOR来说，只是多了一个$ω$，而$ω$选择越好就越快。具体$ω$的选择，以及迭代的过程就不赘述了，我给你一个小提示，你可以在“$ω$大于1”和“$ω$小于1”两种情况下来多选择几个$ω$进行尝试，最后你应该会得到结论：

1. 在$ω$大于1时，$ω$越大，迭代的次数就越多，收敛速度就越慢，$ω$接近1时，迭代的次数越小，收敛速度越快。
2. 在$ω$小于1时，$ω$越小，迭代的次数就越多，收敛速度就越慢，$ω$接近1时，迭代的次数越小，收敛速度越快。

所以，SOR迭代法的关键就是$ω$的选择，它可以被看作是高斯-赛德尔法的扩充。

雅可比法、高斯-赛德尔法，以及SOR迭代法都是定常迭代法。接下来我讲一下和定常迭代法不同的另一类方法，也是实践中用的比较多的方法——**共轭梯度法**（Conjugate gradient），它属于Krylov子空间方法。简单来说，Krylov子空间方法是一种 “降维打击” 手段，是一种牺牲精度换取速度的方法。

## 共轭梯度法

要讲共轭梯度法，我们要先解释一下“共轭”，共轭就是按一定的规律相配的一对，通俗点说就是孪生。“轭”是牛拉车用的木头，那什么是共轭关系呢？同时拉一辆车的两头牛，就是共轭关系。

我们根据这个定义再来解释一下共轭方向，向量$p, q \in R$， 若满足条件$pAq=0$， 则称$p$和$q$关于$A$是共轭方向，或者$p$和$q$关于$A$共轭。有了共轭和共轭方向的概念后，再来看共轭梯度法就简单多了。共轭梯度法的出现不仅是为了解决梯度下降法的收敛速度慢，而且也避免了牛顿法需要存储和计算黑塞矩阵（Hessian Matrix）并求逆的缺点。

现在来看看共轭梯度算法，设$Ax=b$，其中$A$是一个实对称正定矩阵。

首先，我们设初始值$x_{0}$为$0$或者一个估计值，来计算$r_{0}:=b-A x_{0}$。如果$r_{0}$非常小，那$x_{0}$就是结果，如果不是就继续。

接下来设$p_{0}:=r_{0}$，$k:=0$。现在我们开始迭代循环。

a.计算$\alpha_{k}$ 。

$$\alpha_{k}:=\frac{r_{k}^{T} r_{k}}{p_{k}^{T} A p_{k}}$$

b.计算$x_{k+1}$ 。

$$x_{k+1}:=x_{k}+\alpha_{k} p_{k}$$

c.计算$r_{k+1}$。

$$r_{k+1}:=r_{k}-\alpha_{k} A p_{k}$$

d.如果$r_{k+1}$非常小，循环结束，如果不是就继续。

e.计算$β_{k}$ 。

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

f.计算$p_{k+1}$ 。

$$p_{k+1}:=r_{k+1}+\beta_{k} p_{k}$$

g.$k:=k+1$。

4. 返回结果$x_{k+1}$。

从算法中我们可以看出，共轭梯度法的优点是**存储量小**和**具有步收敛性**。如果你熟悉MATLAB，就会发现共轭梯度法的实现超级简单，只需要短短十几行代码（下方代码来自于MATLAB/GNU Octave的

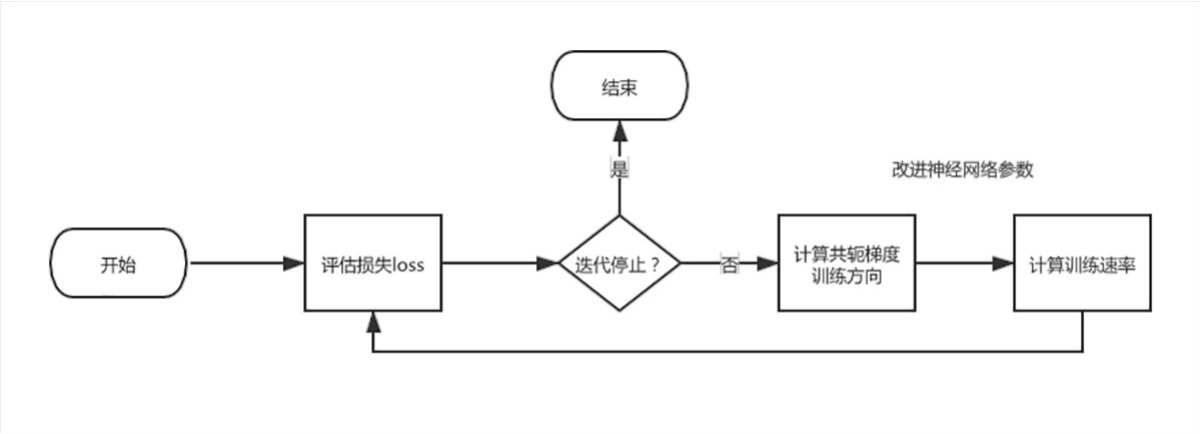
例子）。

```
function x = conjgrad(A, b, x)
    r = b - A * x;
    p = r;
    rsold = r' * r;


    for i = 1:length(b)
        Ap = A * p;
        alpha = rsold / (p' * Ap);
        x = x + alpha * p;
        r = r - alpha * Ap;
        rsnew = r' * r;
        if sqrt(rsnew) < 1e-10
              break;
        end
        p = r + (rsnew / rsold) * p;
        rsold = rsnew;
    end
end
```

## 机器学习中的共轭梯度

共轭梯度法经常被用在训练神经网络中，在实践中已经证明，它是比**梯度下降**更有效的方法，因为就像刚才讲的，它不需要计算黑塞矩阵。那我现在就来讲一讲，使用共轭梯度法的神经网络训练过程。




在整个训练过程中，**参数改进**是重点，当然这也是所有神经网络训练的重点。这个过程是通过计算共轭梯度的训练方向，然后计算训练速率来实现的。在共轭梯度训练算法中，搜索是按共轭方向进行的，也就是说，训练方向是共轭的。所以，收敛速度比梯度下降要快。

现在我们来看训练方向的计算方法。首先，我们设置训练方向向量为$d$，然后，定义一个初始参数向量$w^{0}$，以及一个初始训练方向向量$d^{0}=-g^{0}$，于是，共轭梯度法构造出的训练方向可以表示成：$d^{i+1}=g^{i+1}+d^{i} \cdot \gamma^{i}$。

其中，$g$是梯度向量，$\gamma$是共轭参数。参数通过这个表达式来更新和优化。通常训练速率$\eta$可使用单变量函数优化方法求得。

$$w^{i+1}=w^{i}+d^{i} \cdot \eta^{i}$$

## 本节小结

好了，到这里数值线性代数的迭代法这一讲就结束了，最后我再总结一下前面讲解的内容。

首先，我先解释了数值线性代数，接着再整体讲解了迭代方法。然后，举了一个线性方程组的例子，运用迭代法中的几个比较著名的实践方法：雅可比方法、高斯-赛德尔方法，以及逐次超松弛方法，来解这个线性方程组。最后，我把共轭梯度法用在了深度学习的神经网络训练中。

希望你能在了解了数值线性代数，以及迭代法后，更多地在计算机科学领域中，运用迭代法做矩阵运算。如果有兴趣，你也可以学习其它在实践中使用的迭代法。

## 线性代数练习场

练习时刻到了，这次继续使用第一篇线性方程组里的例子，你可以挑选任意一个迭代法来求解这个线性方程组。

假设，一个旅游团由孩子和大人组成，去程时他们一起坐大巴，每个孩子的票价3元，大人票价3.2元，总共花费118.4元。回程时一起做火车，每个孩子的票价3.5元，大人票价3.6元，总共花费135.2元。请问这个旅游团中有多少孩子和大人？

设小孩人数为$x_{1}$，大人人数为$x_{2}$，于是我们得到了一个方程组：

$$\left\{\begin{array}{c}
3 x_{1}+3.2 x_{2}=118.4 \\\
3.5 x_{1}+3.6 x_{2}=135.2
\end{array}\right.$$

这个方程组的解是：

$$\left\{\begin{array}{l}
x_{1}=16 \\\
x_{2}=22
\end{array}\right.$$

你可以计算一下多少次迭代后它能收敛，也就是逼近真实解？以及它的错误$e$又分别是多少？

欢迎在留言区晒出的你的运算过程和结果。如果有收获，也欢迎你把这篇文章分享给你的朋友。

你好，我是朱维刚。欢迎你继续跟我学习线性代数，今天我要讲的内容是“数值线性代数的迭代法，以及如何在实践中运用迭代法求解线性方程组”。

大密度线性方程组的计算已经成为了世界上最快计算机的测试标准。2008年，IBM为美国能源部Los Alamos国家实验室建造了“Roadrunner”计算机系统，它的运算速度达到了1.026 petaflop/s（千万亿次/秒，petaflop是衡量计算机性能的一个重要单位，1 petaflop等于每秒钟进行1千万亿次的数学运算）。按摩尔定律计算，现在世界上最快的计算机已经达到了200 petaflop，我国也早就进入了世界前列，并有望实现1 exaflop/s（百亿亿次/秒），成为世界第一。


可能你会有些疑惑，为什么我要在课程后期来讲数值线性代数呢？

那是因为数值线性代数是一门特殊的学科，是特别为计算机上进行线性代数计算服务的，可以说它是研究矩阵运算算法的学科，偏向算法实践与工程设计。有了之前基础知识的铺垫后，学习数值线性代数会更有效，而且它是可以直接运用在计算机科学中的，比如：在图像压缩中，使用奇异值分解（SVD）来节省内存；在深度学习中，使用共轭梯度来加速神经网络的收敛。

## 迭代方法说明

课程内容的前期一直都在用**直接法**来解线性方程组，比如高斯消元法。但在实践中，我们在面对复杂场景时，更多的会使用**迭代法**来求解（也就是所谓的间接法），因为很多场景会用到大型稀疏矩阵。所以，我打算在这里讲讲机器学习中的迭代法应用。这里需要注意，不是说直接法不重要，直接法解决了许多相对简单的问题，也是其他方法的基础。

现在我就来说一说什么是迭代法？

我们还是通过线性方程组$Ax=b$来看看。在这里我们分解$A$，使得$A=S-T$，代入等式后得出：$Sx=Tx+b$（等式①）。

按这样的方式持续下去，通过迭代的方式来解$Sx$。这就类似于把复杂问题层层分解和简化，最终使得这个迭代等式成立：$Sx_{k+1}=Tx_{k}+b$（等式②）。

更具体一点来说，我们其实是从$x_{0}$开始，解$Sx_{1}=Tx_{0}+b$。然后，继续解$Sx_{2}=Tx_{1}+b$。一直到$x_{k+1}$非常接近$x_{k}$时，又或者说残余值$r_{k}=b-Ax_{k}$接近$0$时，迭代停止。由于线性方程组的复杂程度不同，这个过程经历几百次的迭代都是有可能的。所以，迭代法的目标就是**比消元法更快速地逼近真实解**。

那么究竟应该如何快速地逼近真实解呢？

这里，$A=S-T$，$A$的分解成了关键，也就是说$A$的分解目标是**每步的运算速度和收敛速度都要快**。每步的运算速度取决于$S$，而收敛速度取决于“错误”(error)，$e_{k}$，这里的错误 $e_{k}$是$x-x_{k}$，也就是说$x$和$x_{k}$的差应该快速逼近0，我们把错误表示成这样：$e_{k+1}=S^{-1}Te_{k}$（等式③）。

它是等式②和①差后得出的结果，迭代的每一步里，错误都会被$S^{-1}T$乘，如果$S^{-1}T$越小，那逼近0的速度就更快。在极端分解情况下，$S=A$，$T=0$，那$Ax=b$又回来了，第一次迭代就能完成收敛，其中$S^{-1}T$等于0。

但是，这一次迭代的成本太高，我们回到了非迭代方式的原点。所以，你也知道，鱼和熊掌不能兼得，$S$的选择成为了关键。那我们要如何在每一次迭代的速度和快速收敛之间做出平衡呢？我给你$S$选择的几种常见方法：

1. 雅可比方法（Jacobi method）：$S$取$A$的对角部分。
2. 高斯-赛德尔方法（Gauss-Seidel）：$S$取$A$的下三角部分，包含对角。
3. ILU方法（Incomplete LU）：$S=L$估计乘$U$估计。

## 雅可比方法实践

总体介绍了迭代法理论之后，我们就进入迭代法运用的实践环节。

首先，我们先来试试使用雅可比方法解线性方程组，雅克比迭代法是众多迭代法中比较早且较简单的一种。所以，作为迭代法的实践开篇比较合适。让我们设一个2×2的线性方程组：

$$
Ax=b
$$

$$
\left\{\begin{array}{c}
2 u-v=4 \\\
-u+2 v=-2
\end{array}\right.
$$

我们很容易就能得出这个方程组的解如下。

$$
\left[\begin{array}{l}
u \\\
v
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{l}
2 \\\
0
\end{array}\right]
$$

现在我们就用雅可比方法来看看怎么解这个方程组：

首先，我们把线性方程组转换成矩阵形式。

$$

\left[\begin{array}{cc}
2 & -1 \\\
-1 & 2
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
4 \\\
-2
\end{array}\right]
$$

接着，把A的对角线放在等式左边，得出$S$矩阵。

$$
S=\left[\begin{array}{ll}
2 & 0 \\\
0 & 2
\end{array}\right]
$$

其余部分移到等式右边，得出$T$矩阵。

$$
T=\left[\begin{array}{ll}
0 & 1 \\\
1 & 0
\end{array}\right]
$$

于是，雅可比迭代就可以表示成下面这样的形式。

$$
\mathrm{S} x_{k+1}=T x_{k}+\mathrm{b}
$$

$$
\left\{\begin{array}{l}
2 u_{k+1}=v_{k}+4 \\\
2 v_{k+1}=u_{k}-2
\end{array}\right.
$$

现在是时候进行迭代了，我们从$u_{0}=v_{0}=0$开始。

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{0} \\\
v_{0}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{l}
0 \\\
0
\end{array}\right]
$$

第一次迭代后，我们得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{1} \\\
v_{1}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
2 \\\
-1
\end{array}\right]
$$

第二次迭代后得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{2} \\\
v_{2}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{l}
\frac{3}{2} \\\
0
\end{array}\right]
$$

第三次迭代后得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{3} \\\
v_{3}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
2 \\\
-\frac{1}{4}
\end{array}\right]
$$

第四次迭代后得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{4} \\\
v_{4}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{l}
\frac{15}{8} \\\
0
\end{array}\right]
$$

第五次迭代后，我们得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{5} \\\
v_{5}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
2 \\\

-\frac{1}{16}
\end{array}\right]
$$

经过五次迭代后发现收敛，因为它的结果接近真实解。

$$
真实解
\left[\begin{array}{l}
2 \\\
0
\end{array}\right]
$$

现在，再来看一下错误等式，$\mathrm{Se}_{k+1}=T e_{k}$，我们把$S$和$T$代入等式，得出：

$$
\left[\begin{array}{ll}
2 & 0 \\\
0 & 2
\end{array}\right] e_{k+1}=\left[\begin{array}{ll}
0 & 1 \\\
1 & 0
\end{array}\right] e_{k}
$$

计算$S$的逆矩阵和$T$相乘$S^{-1}T$得出：

$$
e_{k+1}=\left[\begin{array}{cc}
0 & \frac{1}{2} \\\
\frac{1}{2} & 0
\end{array}\right] e_{k}
$$

这里，$S$的逆矩阵和T相乘$S^{-1}T$有特征值$\frac{1}{2}$和$-\frac{1}{2}$，所以，它的谱半径是$\rho(B)=\frac{1}{2}$。这里的**谱半径**是用来控制收敛的，所以非常重要。谱半径从数学定义上是：矩阵（或者有界线性算子的谱半径）是指其特征值绝对值集合的上确界。这个概念是不是很难理解？具体谱半径的概念你可以查互联网来获取，为了方便你理解，这里我还是用数学方法来简单表达一下。

$$
B=S^{-1} T=\left[\begin{array}{ll}
0 & \frac{1}{2} \\\
\frac{1}{2} & 0
\end{array}\right]
$$

通过$S$的逆矩阵和$T$相乘$S^{-1}T$，我们得到：$|\lambda|_{\max }=\frac{1}{2}$，以及：

$$
\left[\begin{array}{cc}
0 & \frac{1}{2} \\\
\frac{1}{2} & 0
\end{array}\right]^{2}=\left[\begin{array}{cc}
\frac{1}{4} & 0 \\\
0 & \frac{1}{4}
\end{array}\right]
$$

这里的特征值$\frac{1}{2}$非常小，所以10次迭代后，错误就很低了，即$\frac{1^{10}}{2}=\frac{1}{1024}$。而如果特征值是0.99或者0.999，那很显然迭代次数就要多得多，也就是说需要更多时间来做运算。

## 高斯-赛德尔方法实践

现在我们再来看下高斯-赛德尔方法，高斯-赛德尔迭代可以**节约存储**和**加速迭代**，每迭代一次只需一组存储单元，而雅可比迭代需要两组单元。

$S$取$A$的下三角部分，还是使用之前雅可比方法中的例子，我们得出方程组：

$$
\left\{\begin{array}{c}
u_{k+1}=\frac{1}{2} v_{k}+2 \\\
v_{k+1}=\frac{1}{2} u_{k+1}-1
\end{array}\right.
$$

这里有一个比较大的变化，那就是$u_{k}$消失了，通过$v_{k}$，我们可以直接得到$u_{k+1}$和$v_{k+1}$，这样有什么好处呢？两大好处是显而易见的，就是**节约存储**和**加速迭代**。

接下来，我们从$u_{0}=0$，$v_{0}=-1$来测试一下迭代。

第一次迭代后，我们得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{1} \\\
v_{1}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
\frac{3}{2} \\\
\frac{-1}{4}
\end{array}\right]
$$

第二次迭代后得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{2} \\\
v_{2}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{l}
\frac{15}{8} \\\
\frac{-1}{16}
\end{array}\right]
$$

第三次迭代后得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{3} \\\
v_{3}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{r}

\frac{63}{32} \\\
-\frac{1}{64}
\end{array}\right]
$$

经过三次迭代后发现收敛，因为第三次迭代后的结果接近真实解。

错误经过计算分别是$-1, \frac{-1}{4}, \frac{-1}{16}, \frac{-1}{64}$，和刚才使用雅可比方法得出的错误$2, \frac{1}{2}, \frac{1}{8}, \frac{1}{32}$。比较后我们可以发现，无论是迭代次数还是收敛速度方面，高斯-赛德尔方法比雅可比方法速度快、精确度也高得多。

## 逐次超松弛方法

最后，我们在高斯-赛德尔方法上做个小调整，在迭代中引入一个参数“omega”，$ω$，即超松弛因子。然后选择一个合适的$ω$，使得$S^{-1}T$的谱半径尽可能小，这个方法就叫做逐次超松弛方法（Successive over-relaxation method，简称SOR）。

SOR方法的方程是：$ωAx=ωb$，矩阵$S$有$A$的对角线，对角线下是$ωA$，等式右边$T$是$S-ωA$，于是，我们还是使用之前雅可比方法中的例子，得到SOR方程组如下。

$$\left\{\begin{array}{c}
2 u_{k+1}=(2-2 \omega) u_{k}+\omega v_{k}+4 \omega \\\
-\omega u_{k+1}+2 v_{k+1}=(2-2 \omega) v_{k}-2 \omega
\end{array}\right.$$

是不是看起来更复杂了？

没关系，其实它只是在我们眼中看起来复杂，对计算机来说是没区别的。对SOR来说，只是多了一个$ω$，而$ω$选择越好就越快。具体$ω$的选择，以及迭代的过程就不赘述了，我给你一个小提示，你可以在“$ω$大于1”和“$ω$小于1”两种情况下来多选择几个$ω$进行尝试，最后你应该会得到结论：

1. 在$ω$大于1时，$ω$越大，迭代的次数就越多，收敛速度就越慢，$ω$接近1时，迭代的次数越小，收敛速度越快。
2. 在$ω$小于1时，$ω$越小，迭代的次数就越多，收敛速度就越慢，$ω$接近1时，迭代的次数越小，收敛速度越快。

所以，SOR迭代法的关键就是$ω$的选择，它可以被看作是高斯-赛德尔法的扩充。

雅可比法、高斯-赛德尔法，以及SOR迭代法都是定常迭代法。接下来我讲一下和定常迭代法不同的另一类方法，也是实践中用的比较多的方法——**共轭梯度法**（Conjugate gradient），它属于Krylov子空间方法。简单来说，Krylov子空间方法是一种 “降维打击” 手段，是一种牺牲精度换取速度的方法。

## 共轭梯度法

要讲共轭梯度法，我们要先解释一下“共轭”，共轭就是按一定的规律相配的一对，通俗点说就是孪生。“轭”是牛拉车用的木头，那什么是共轭关系呢？同时拉一辆车的两头牛，就是共轭关系。

我们根据这个定义再来解释一下共轭方向，向量$p, q \in R$， 若满足条件$pAq=0$， 则称$p$和$q$关于$A$是共轭方向，或者$p$和$q$关于$A$共轭。有了共轭和共轭方向的概念后，再来看共轭梯度法就简单多了。共轭梯度法的出现不仅是为了解决梯度下降法的收敛速度慢，而且也避免了牛顿法需要存储和计算黑塞矩阵（Hessian Matrix）并求逆的缺点。

现在来看看共轭梯度算法，设$Ax=b$，其中$A$是一个实对称正定矩阵。

首先，我们设初始值$x_{0}$为$0$或者一个估计值，来计算$r_{0}:=b-A x_{0}$。如果$r_{0}$非常小，那$x_{0}$就是结果，如果不是就继续。

接下来设$p_{0}:=r_{0}$，$k:=0$。现在我们开始迭代循环。

a.计算$\alpha_{k}$ 。

$$\alpha_{k}:=\frac{r_{k}^{T} r_{k}}{p_{k}^{T} A p_{k}}$$

b.计算$x_{k+1}$ 。

$$x_{k+1}:=x_{k}+\alpha_{k} p_{k}$$

c.计算$r_{k+1}$。

$$r_{k+1}:=r_{k}-\alpha_{k} A p_{k}$$

d.如果$r_{k+1}$非常小，循环结束，如果不是就继续。

e.计算$β_{k}$ 。

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

f.计算$p_{k+1}$ 。

$$p_{k+1}:=r_{k+1}+\beta_{k} p_{k}$$

g.$k:=k+1$。

4. 返回结果$x_{k+1}$。

从算法中我们可以看出，共轭梯度法的优点是**存储量小**和**具有步收敛性**。如果你熟悉MATLAB，就会发现共轭梯度法的实现超级简单，只需要短短十几行代码（下方代码来自于MATLAB/GNU Octave的

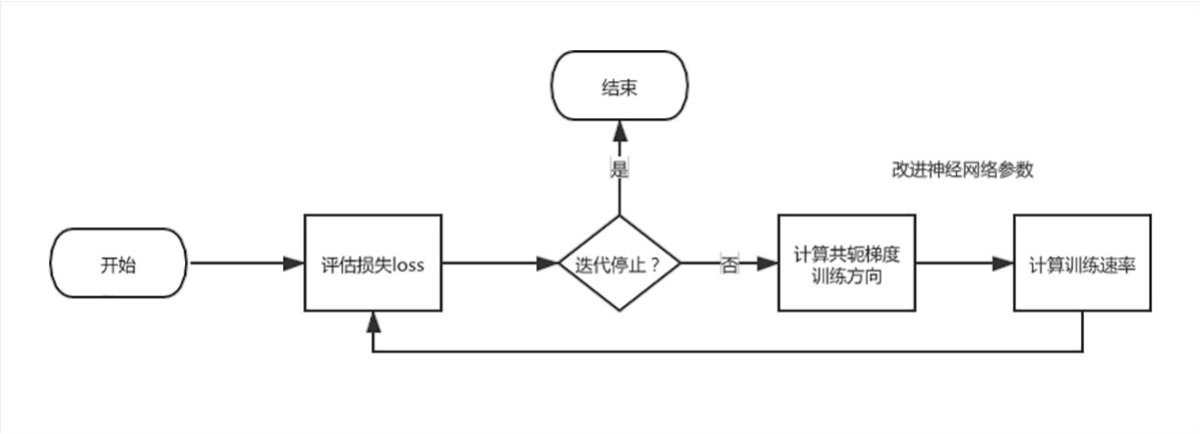
例子）。

```
function x = conjgrad(A, b, x)
    r = b - A * x;
    p = r;
    rsold = r' * r;


    for i = 1:length(b)
        Ap = A * p;
        alpha = rsold / (p' * Ap);
        x = x + alpha * p;
        r = r - alpha * Ap;
        rsnew = r' * r;
        if sqrt(rsnew) < 1e-10
              break;
        end
        p = r + (rsnew / rsold) * p;
        rsold = rsnew;
    end
end
```

## 机器学习中的共轭梯度

共轭梯度法经常被用在训练神经网络中，在实践中已经证明，它是比**梯度下降**更有效的方法，因为就像刚才讲的，它不需要计算黑塞矩阵。那我现在就来讲一讲，使用共轭梯度法的神经网络训练过程。




在整个训练过程中，**参数改进**是重点，当然这也是所有神经网络训练的重点。这个过程是通过计算共轭梯度的训练方向，然后计算训练速率来实现的。在共轭梯度训练算法中，搜索是按共轭方向进行的，也就是说，训练方向是共轭的。所以，收敛速度比梯度下降要快。

现在我们来看训练方向的计算方法。首先，我们设置训练方向向量为$d$，然后，定义一个初始参数向量$w^{0}$，以及一个初始训练方向向量$d^{0}=-g^{0}$，于是，共轭梯度法构造出的训练方向可以表示成：$d^{i+1}=g^{i+1}+d^{i} \cdot \gamma^{i}$。

其中，$g$是梯度向量，$\gamma$是共轭参数。参数通过这个表达式来更新和优化。通常训练速率$\eta$可使用单变量函数优化方法求得。

$$w^{i+1}=w^{i}+d^{i} \cdot \eta^{i}$$

## 本节小结

好了，到这里数值线性代数的迭代法这一讲就结束了，最后我再总结一下前面讲解的内容。

首先，我先解释了数值线性代数，接着再整体讲解了迭代方法。然后，举了一个线性方程组的例子，运用迭代法中的几个比较著名的实践方法：雅可比方法、高斯-赛德尔方法，以及逐次超松弛方法，来解这个线性方程组。最后，我把共轭梯度法用在了深度学习的神经网络训练中。

希望你能在了解了数值线性代数，以及迭代法后，更多地在计算机科学领域中，运用迭代法做矩阵运算。如果有兴趣，你也可以学习其它在实践中使用的迭代法。

## 线性代数练习场

练习时刻到了，这次继续使用第一篇线性方程组里的例子，你可以挑选任意一个迭代法来求解这个线性方程组。

假设，一个旅游团由孩子和大人组成，去程时他们一起坐大巴，每个孩子的票价3元，大人票价3.2元，总共花费118.4元。回程时一起做火车，每个孩子的票价3.5元，大人票价3.6元，总共花费135.2元。请问这个旅游团中有多少孩子和大人？

设小孩人数为$x_{1}$，大人人数为$x_{2}$，于是我们得到了一个方程组：

$$\left\{\begin{array}{c}
3 x_{1}+3.2 x_{2}=118.4 \\\
3.5 x_{1}+3.6 x_{2}=135.2
\end{array}\right.$$

这个方程组的解是：

$$\left\{\begin{array}{l}
x_{1}=16 \\\
x_{2}=22
\end{array}\right.$$

你可以计算一下多少次迭代后它能收敛，也就是逼近真实解？以及它的错误$e$又分别是多少？

欢迎在留言区晒出的你的运算过程和结果。如果有收获，也欢迎你把这篇文章分享给你的朋友。

你好，我是朱维刚。欢迎你继续跟我学习线性代数，今天我要讲的内容是“数值线性代数的迭代法，以及如何在实践中运用迭代法求解线性方程组”。

大密度线性方程组的计算已经成为了世界上最快计算机的测试标准。2008年，IBM为美国能源部Los Alamos国家实验室建造了“Roadrunner”计算机系统，它的运算速度达到了1.026 petaflop/s（千万亿次/秒，petaflop是衡量计算机性能的一个重要单位，1 petaflop等于每秒钟进行1千万亿次的数学运算）。按摩尔定律计算，现在世界上最快的计算机已经达到了200 petaflop，我国也早就进入了世界前列，并有望实现1 exaflop/s（百亿亿次/秒），成为世界第一。


可能你会有些疑惑，为什么我要在课程后期来讲数值线性代数呢？

那是因为数值线性代数是一门特殊的学科，是特别为计算机上进行线性代数计算服务的，可以说它是研究矩阵运算算法的学科，偏向算法实践与工程设计。有了之前基础知识的铺垫后，学习数值线性代数会更有效，而且它是可以直接运用在计算机科学中的，比如：在图像压缩中，使用奇异值分解（SVD）来节省内存；在深度学习中，使用共轭梯度来加速神经网络的收敛。

## 迭代方法说明

课程内容的前期一直都在用**直接法**来解线性方程组，比如高斯消元法。但在实践中，我们在面对复杂场景时，更多的会使用**迭代法**来求解（也就是所谓的间接法），因为很多场景会用到大型稀疏矩阵。所以，我打算在这里讲讲机器学习中的迭代法应用。这里需要注意，不是说直接法不重要，直接法解决了许多相对简单的问题，也是其他方法的基础。

现在我就来说一说什么是迭代法？

我们还是通过线性方程组$Ax=b$来看看。在这里我们分解$A$，使得$A=S-T$，代入等式后得出：$Sx=Tx+b$（等式①）。

按这样的方式持续下去，通过迭代的方式来解$Sx$。这就类似于把复杂问题层层分解和简化，最终使得这个迭代等式成立：$Sx_{k+1}=Tx_{k}+b$（等式②）。

更具体一点来说，我们其实是从$x_{0}$开始，解$Sx_{1}=Tx_{0}+b$。然后，继续解$Sx_{2}=Tx_{1}+b$。一直到$x_{k+1}$非常接近$x_{k}$时，又或者说残余值$r_{k}=b-Ax_{k}$接近$0$时，迭代停止。由于线性方程组的复杂程度不同，这个过程经历几百次的迭代都是有可能的。所以，迭代法的目标就是**比消元法更快速地逼近真实解**。

那么究竟应该如何快速地逼近真实解呢？

这里，$A=S-T$，$A$的分解成了关键，也就是说$A$的分解目标是**每步的运算速度和收敛速度都要快**。每步的运算速度取决于$S$，而收敛速度取决于“错误”(error)，$e_{k}$，这里的错误 $e_{k}$是$x-x_{k}$，也就是说$x$和$x_{k}$的差应该快速逼近0，我们把错误表示成这样：$e_{k+1}=S^{-1}Te_{k}$（等式③）。

它是等式②和①差后得出的结果，迭代的每一步里，错误都会被$S^{-1}T$乘，如果$S^{-1}T$越小，那逼近0的速度就更快。在极端分解情况下，$S=A$，$T=0$，那$Ax=b$又回来了，第一次迭代就能完成收敛，其中$S^{-1}T$等于0。

但是，这一次迭代的成本太高，我们回到了非迭代方式的原点。所以，你也知道，鱼和熊掌不能兼得，$S$的选择成为了关键。那我们要如何在每一次迭代的速度和快速收敛之间做出平衡呢？我给你$S$选择的几种常见方法：

1. 雅可比方法（Jacobi method）：$S$取$A$的对角部分。
2. 高斯-赛德尔方法（Gauss-Seidel）：$S$取$A$的下三角部分，包含对角。
3. ILU方法（Incomplete LU）：$S=L$估计乘$U$估计。

## 雅可比方法实践

总体介绍了迭代法理论之后，我们就进入迭代法运用的实践环节。

首先，我们先来试试使用雅可比方法解线性方程组，雅克比迭代法是众多迭代法中比较早且较简单的一种。所以，作为迭代法的实践开篇比较合适。让我们设一个2×2的线性方程组：

$$
Ax=b
$$

$$
\left\{\begin{array}{c}
2 u-v=4 \\\
-u+2 v=-2
\end{array}\right.
$$

我们很容易就能得出这个方程组的解如下。

$$
\left[\begin{array}{l}
u \\\
v
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{l}
2 \\\
0
\end{array}\right]
$$

现在我们就用雅可比方法来看看怎么解这个方程组：

首先，我们把线性方程组转换成矩阵形式。

$$

\left[\begin{array}{cc}
2 & -1 \\\
-1 & 2
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
4 \\\
-2
\end{array}\right]
$$

接着，把A的对角线放在等式左边，得出$S$矩阵。

$$
S=\left[\begin{array}{ll}
2 & 0 \\\
0 & 2
\end{array}\right]
$$

其余部分移到等式右边，得出$T$矩阵。

$$
T=\left[\begin{array}{ll}
0 & 1 \\\
1 & 0
\end{array}\right]
$$

于是，雅可比迭代就可以表示成下面这样的形式。

$$
\mathrm{S} x_{k+1}=T x_{k}+\mathrm{b}
$$

$$
\left\{\begin{array}{l}
2 u_{k+1}=v_{k}+4 \\\
2 v_{k+1}=u_{k}-2
\end{array}\right.
$$

现在是时候进行迭代了，我们从$u_{0}=v_{0}=0$开始。

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{0} \\\
v_{0}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{l}
0 \\\
0
\end{array}\right]
$$

第一次迭代后，我们得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{1} \\\
v_{1}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
2 \\\
-1
\end{array}\right]
$$

第二次迭代后得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{2} \\\
v_{2}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{l}
\frac{3}{2} \\\
0
\end{array}\right]
$$

第三次迭代后得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{3} \\\
v_{3}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
2 \\\
-\frac{1}{4}
\end{array}\right]
$$

第四次迭代后得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{4} \\\
v_{4}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{l}
\frac{15}{8} \\\
0
\end{array}\right]
$$

第五次迭代后，我们得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{5} \\\
v_{5}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
2 \\\

-\frac{1}{16}
\end{array}\right]
$$

经过五次迭代后发现收敛，因为它的结果接近真实解。

$$
真实解
\left[\begin{array}{l}
2 \\\
0
\end{array}\right]
$$

现在，再来看一下错误等式，$\mathrm{Se}_{k+1}=T e_{k}$，我们把$S$和$T$代入等式，得出：

$$
\left[\begin{array}{ll}
2 & 0 \\\
0 & 2
\end{array}\right] e_{k+1}=\left[\begin{array}{ll}
0 & 1 \\\
1 & 0
\end{array}\right] e_{k}
$$

计算$S$的逆矩阵和$T$相乘$S^{-1}T$得出：

$$
e_{k+1}=\left[\begin{array}{cc}
0 & \frac{1}{2} \\\
\frac{1}{2} & 0
\end{array}\right] e_{k}
$$

这里，$S$的逆矩阵和T相乘$S^{-1}T$有特征值$\frac{1}{2}$和$-\frac{1}{2}$，所以，它的谱半径是$\rho(B)=\frac{1}{2}$。这里的**谱半径**是用来控制收敛的，所以非常重要。谱半径从数学定义上是：矩阵（或者有界线性算子的谱半径）是指其特征值绝对值集合的上确界。这个概念是不是很难理解？具体谱半径的概念你可以查互联网来获取，为了方便你理解，这里我还是用数学方法来简单表达一下。

$$
B=S^{-1} T=\left[\begin{array}{ll}
0 & \frac{1}{2} \\\
\frac{1}{2} & 0
\end{array}\right]
$$

通过$S$的逆矩阵和$T$相乘$S^{-1}T$，我们得到：$|\lambda|_{\max }=\frac{1}{2}$，以及：

$$
\left[\begin{array}{cc}
0 & \frac{1}{2} \\\
\frac{1}{2} & 0
\end{array}\right]^{2}=\left[\begin{array}{cc}
\frac{1}{4} & 0 \\\
0 & \frac{1}{4}
\end{array}\right]
$$

这里的特征值$\frac{1}{2}$非常小，所以10次迭代后，错误就很低了，即$\frac{1^{10}}{2}=\frac{1}{1024}$。而如果特征值是0.99或者0.999，那很显然迭代次数就要多得多，也就是说需要更多时间来做运算。

## 高斯-赛德尔方法实践

现在我们再来看下高斯-赛德尔方法，高斯-赛德尔迭代可以**节约存储**和**加速迭代**，每迭代一次只需一组存储单元，而雅可比迭代需要两组单元。

$S$取$A$的下三角部分，还是使用之前雅可比方法中的例子，我们得出方程组：

$$
\left\{\begin{array}{c}
u_{k+1}=\frac{1}{2} v_{k}+2 \\\
v_{k+1}=\frac{1}{2} u_{k+1}-1
\end{array}\right.
$$

这里有一个比较大的变化，那就是$u_{k}$消失了，通过$v_{k}$，我们可以直接得到$u_{k+1}$和$v_{k+1}$，这样有什么好处呢？两大好处是显而易见的，就是**节约存储**和**加速迭代**。

接下来，我们从$u_{0}=0$，$v_{0}=-1$来测试一下迭代。

第一次迭代后，我们得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{1} \\\
v_{1}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
\frac{3}{2} \\\
\frac{-1}{4}
\end{array}\right]
$$

第二次迭代后得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{2} \\\
v_{2}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{l}
\frac{15}{8} \\\
\frac{-1}{16}
\end{array}\right]
$$

第三次迭代后得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{3} \\\
v_{3}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{r}

\frac{63}{32} \\\
-\frac{1}{64}
\end{array}\right]
$$

经过三次迭代后发现收敛，因为第三次迭代后的结果接近真实解。

错误经过计算分别是$-1, \frac{-1}{4}, \frac{-1}{16}, \frac{-1}{64}$，和刚才使用雅可比方法得出的错误$2, \frac{1}{2}, \frac{1}{8}, \frac{1}{32}$。比较后我们可以发现，无论是迭代次数还是收敛速度方面，高斯-赛德尔方法比雅可比方法速度快、精确度也高得多。

## 逐次超松弛方法

最后，我们在高斯-赛德尔方法上做个小调整，在迭代中引入一个参数“omega”，$ω$，即超松弛因子。然后选择一个合适的$ω$，使得$S^{-1}T$的谱半径尽可能小，这个方法就叫做逐次超松弛方法（Successive over-relaxation method，简称SOR）。

SOR方法的方程是：$ωAx=ωb$，矩阵$S$有$A$的对角线，对角线下是$ωA$，等式右边$T$是$S-ωA$，于是，我们还是使用之前雅可比方法中的例子，得到SOR方程组如下。

$$\left\{\begin{array}{c}
2 u_{k+1}=(2-2 \omega) u_{k}+\omega v_{k}+4 \omega \\\
-\omega u_{k+1}+2 v_{k+1}=(2-2 \omega) v_{k}-2 \omega
\end{array}\right.$$

是不是看起来更复杂了？

没关系，其实它只是在我们眼中看起来复杂，对计算机来说是没区别的。对SOR来说，只是多了一个$ω$，而$ω$选择越好就越快。具体$ω$的选择，以及迭代的过程就不赘述了，我给你一个小提示，你可以在“$ω$大于1”和“$ω$小于1”两种情况下来多选择几个$ω$进行尝试，最后你应该会得到结论：

1. 在$ω$大于1时，$ω$越大，迭代的次数就越多，收敛速度就越慢，$ω$接近1时，迭代的次数越小，收敛速度越快。
2. 在$ω$小于1时，$ω$越小，迭代的次数就越多，收敛速度就越慢，$ω$接近1时，迭代的次数越小，收敛速度越快。

所以，SOR迭代法的关键就是$ω$的选择，它可以被看作是高斯-赛德尔法的扩充。

雅可比法、高斯-赛德尔法，以及SOR迭代法都是定常迭代法。接下来我讲一下和定常迭代法不同的另一类方法，也是实践中用的比较多的方法——**共轭梯度法**（Conjugate gradient），它属于Krylov子空间方法。简单来说，Krylov子空间方法是一种 “降维打击” 手段，是一种牺牲精度换取速度的方法。

## 共轭梯度法

要讲共轭梯度法，我们要先解释一下“共轭”，共轭就是按一定的规律相配的一对，通俗点说就是孪生。“轭”是牛拉车用的木头，那什么是共轭关系呢？同时拉一辆车的两头牛，就是共轭关系。

我们根据这个定义再来解释一下共轭方向，向量$p, q \in R$， 若满足条件$pAq=0$， 则称$p$和$q$关于$A$是共轭方向，或者$p$和$q$关于$A$共轭。有了共轭和共轭方向的概念后，再来看共轭梯度法就简单多了。共轭梯度法的出现不仅是为了解决梯度下降法的收敛速度慢，而且也避免了牛顿法需要存储和计算黑塞矩阵（Hessian Matrix）并求逆的缺点。

现在来看看共轭梯度算法，设$Ax=b$，其中$A$是一个实对称正定矩阵。

首先，我们设初始值$x_{0}$为$0$或者一个估计值，来计算$r_{0}:=b-A x_{0}$。如果$r_{0}$非常小，那$x_{0}$就是结果，如果不是就继续。

接下来设$p_{0}:=r_{0}$，$k:=0$。现在我们开始迭代循环。

a.计算$\alpha_{k}$ 。

$$\alpha_{k}:=\frac{r_{k}^{T} r_{k}}{p_{k}^{T} A p_{k}}$$

b.计算$x_{k+1}$ 。

$$x_{k+1}:=x_{k}+\alpha_{k} p_{k}$$

c.计算$r_{k+1}$。

$$r_{k+1}:=r_{k}-\alpha_{k} A p_{k}$$

d.如果$r_{k+1}$非常小，循环结束，如果不是就继续。

e.计算$β_{k}$ 。

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

f.计算$p_{k+1}$ 。

$$p_{k+1}:=r_{k+1}+\beta_{k} p_{k}$$

g.$k:=k+1$。

4. 返回结果$x_{k+1}$。

从算法中我们可以看出，共轭梯度法的优点是**存储量小**和**具有步收敛性**。如果你熟悉MATLAB，就会发现共轭梯度法的实现超级简单，只需要短短十几行代码（下方代码来自于MATLAB/GNU Octave的

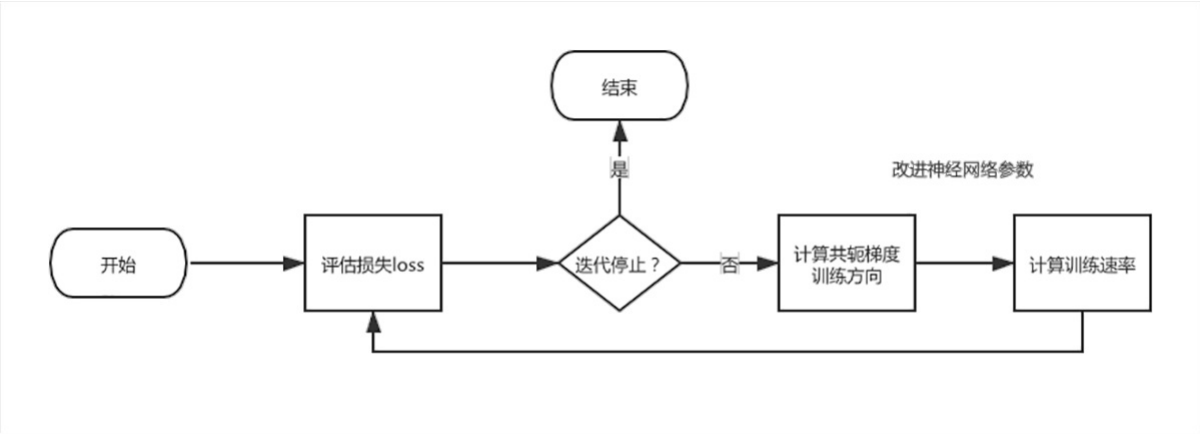
例子）。

```
function x = conjgrad(A, b, x)
    r = b - A * x;
    p = r;
    rsold = r' * r;


    for i = 1:length(b)
        Ap = A * p;
        alpha = rsold / (p' * Ap);
        x = x + alpha * p;
        r = r - alpha * Ap;
        rsnew = r' * r;
        if sqrt(rsnew) < 1e-10
              break;
        end
        p = r + (rsnew / rsold) * p;
        rsold = rsnew;
    end
end
```

## 机器学习中的共轭梯度

共轭梯度法经常被用在训练神经网络中，在实践中已经证明，它是比**梯度下降**更有效的方法，因为就像刚才讲的，它不需要计算黑塞矩阵。那我现在就来讲一讲，使用共轭梯度法的神经网络训练过程。




在整个训练过程中，**参数改进**是重点，当然这也是所有神经网络训练的重点。这个过程是通过计算共轭梯度的训练方向，然后计算训练速率来实现的。在共轭梯度训练算法中，搜索是按共轭方向进行的，也就是说，训练方向是共轭的。所以，收敛速度比梯度下降要快。

现在我们来看训练方向的计算方法。首先，我们设置训练方向向量为$d$，然后，定义一个初始参数向量$w^{0}$，以及一个初始训练方向向量$d^{0}=-g^{0}$，于是，共轭梯度法构造出的训练方向可以表示成：$d^{i+1}=g^{i+1}+d^{i} \cdot \gamma^{i}$。

其中，$g$是梯度向量，$\gamma$是共轭参数。参数通过这个表达式来更新和优化。通常训练速率$\eta$可使用单变量函数优化方法求得。

$$w^{i+1}=w^{i}+d^{i} \cdot \eta^{i}$$

## 本节小结

好了，到这里数值线性代数的迭代法这一讲就结束了，最后我再总结一下前面讲解的内容。

首先，我先解释了数值线性代数，接着再整体讲解了迭代方法。然后，举了一个线性方程组的例子，运用迭代法中的几个比较著名的实践方法：雅可比方法、高斯-赛德尔方法，以及逐次超松弛方法，来解这个线性方程组。最后，我把共轭梯度法用在了深度学习的神经网络训练中。

希望你能在了解了数值线性代数，以及迭代法后，更多地在计算机科学领域中，运用迭代法做矩阵运算。如果有兴趣，你也可以学习其它在实践中使用的迭代法。

## 线性代数练习场

练习时刻到了，这次继续使用第一篇线性方程组里的例子，你可以挑选任意一个迭代法来求解这个线性方程组。

假设，一个旅游团由孩子和大人组成，去程时他们一起坐大巴，每个孩子的票价3元，大人票价3.2元，总共花费118.4元。回程时一起做火车，每个孩子的票价3.5元，大人票价3.6元，总共花费135.2元。请问这个旅游团中有多少孩子和大人？

设小孩人数为$x_{1}$，大人人数为$x_{2}$，于是我们得到了一个方程组：

$$\left\{\begin{array}{c}
3 x_{1}+3.2 x_{2}=118.4 \\\
3.5 x_{1}+3.6 x_{2}=135.2
\end{array}\right.$$

这个方程组的解是：

$$\left\{\begin{array}{l}
x_{1}=16 \\\
x_{2}=22
\end{array}\right.$$

你可以计算一下多少次迭代后它能收敛，也就是逼近真实解？以及它的错误$e$又分别是多少？

欢迎在留言区晒出的你的运算过程和结果。如果有收获，也欢迎你把这篇文章分享给你的朋友。

你好，我是朱维刚。欢迎你继续跟我学习线性代数，今天我要讲的内容是“数值线性代数的迭代法，以及如何在实践中运用迭代法求解线性方程组”。

大密度线性方程组的计算已经成为了世界上最快计算机的测试标准。2008年，IBM为美国能源部Los Alamos国家实验室建造了“Roadrunner”计算机系统，它的运算速度达到了1.026 petaflop/s（千万亿次/秒，petaflop是衡量计算机性能的一个重要单位，1 petaflop等于每秒钟进行1千万亿次的数学运算）。按摩尔定律计算，现在世界上最快的计算机已经达到了200 petaflop，我国也早就进入了世界前列，并有望实现1 exaflop/s（百亿亿次/秒），成为世界第一。


可能你会有些疑惑，为什么我要在课程后期来讲数值线性代数呢？

那是因为数值线性代数是一门特殊的学科，是特别为计算机上进行线性代数计算服务的，可以说它是研究矩阵运算算法的学科，偏向算法实践与工程设计。有了之前基础知识的铺垫后，学习数值线性代数会更有效，而且它是可以直接运用在计算机科学中的，比如：在图像压缩中，使用奇异值分解（SVD）来节省内存；在深度学习中，使用共轭梯度来加速神经网络的收敛。

## 迭代方法说明

课程内容的前期一直都在用**直接法**来解线性方程组，比如高斯消元法。但在实践中，我们在面对复杂场景时，更多的会使用**迭代法**来求解（也就是所谓的间接法），因为很多场景会用到大型稀疏矩阵。所以，我打算在这里讲讲机器学习中的迭代法应用。这里需要注意，不是说直接法不重要，直接法解决了许多相对简单的问题，也是其他方法的基础。

现在我就来说一说什么是迭代法？

我们还是通过线性方程组$Ax=b$来看看。在这里我们分解$A$，使得$A=S-T$，代入等式后得出：$Sx=Tx+b$（等式①）。

按这样的方式持续下去，通过迭代的方式来解$Sx$。这就类似于把复杂问题层层分解和简化，最终使得这个迭代等式成立：$Sx_{k+1}=Tx_{k}+b$（等式②）。

更具体一点来说，我们其实是从$x_{0}$开始，解$Sx_{1}=Tx_{0}+b$。然后，继续解$Sx_{2}=Tx_{1}+b$。一直到$x_{k+1}$非常接近$x_{k}$时，又或者说残余值$r_{k}=b-Ax_{k}$接近$0$时，迭代停止。由于线性方程组的复杂程度不同，这个过程经历几百次的迭代都是有可能的。所以，迭代法的目标就是**比消元法更快速地逼近真实解**。

那么究竟应该如何快速地逼近真实解呢？

这里，$A=S-T$，$A$的分解成了关键，也就是说$A$的分解目标是**每步的运算速度和收敛速度都要快**。每步的运算速度取决于$S$，而收敛速度取决于“错误”(error)，$e_{k}$，这里的错误 $e_{k}$是$x-x_{k}$，也就是说$x$和$x_{k}$的差应该快速逼近0，我们把错误表示成这样：$e_{k+1}=S^{-1}Te_{k}$（等式③）。

它是等式②和①差后得出的结果，迭代的每一步里，错误都会被$S^{-1}T$乘，如果$S^{-1}T$越小，那逼近0的速度就更快。在极端分解情况下，$S=A$，$T=0$，那$Ax=b$又回来了，第一次迭代就能完成收敛，其中$S^{-1}T$等于0。

但是，这一次迭代的成本太高，我们回到了非迭代方式的原点。所以，你也知道，鱼和熊掌不能兼得，$S$的选择成为了关键。那我们要如何在每一次迭代的速度和快速收敛之间做出平衡呢？我给你$S$选择的几种常见方法：

1. 雅可比方法（Jacobi method）：$S$取$A$的对角部分。
2. 高斯-赛德尔方法（Gauss-Seidel）：$S$取$A$的下三角部分，包含对角。
3. ILU方法（Incomplete LU）：$S=L$估计乘$U$估计。

## 雅可比方法实践

总体介绍了迭代法理论之后，我们就进入迭代法运用的实践环节。

首先，我们先来试试使用雅可比方法解线性方程组，雅克比迭代法是众多迭代法中比较早且较简单的一种。所以，作为迭代法的实践开篇比较合适。让我们设一个2×2的线性方程组：

$$
Ax=b
$$

$$
\left\{\begin{array}{c}
2 u-v=4 \\\
-u+2 v=-2
\end{array}\right.
$$

我们很容易就能得出这个方程组的解如下。

$$
\left[\begin{array}{l}
u \\\
v
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{l}
2 \\\
0
\end{array}\right]
$$

现在我们就用雅可比方法来看看怎么解这个方程组：

首先，我们把线性方程组转换成矩阵形式。

$$

\left[\begin{array}{cc}
2 & -1 \\\
-1 & 2
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
4 \\\
-2
\end{array}\right]
$$

接着，把A的对角线放在等式左边，得出$S$矩阵。

$$
S=\left[\begin{array}{ll}
2 & 0 \\\
0 & 2
\end{array}\right]
$$

其余部分移到等式右边，得出$T$矩阵。

$$
T=\left[\begin{array}{ll}
0 & 1 \\\
1 & 0
\end{array}\right]
$$

于是，雅可比迭代就可以表示成下面这样的形式。

$$
\mathrm{S} x_{k+1}=T x_{k}+\mathrm{b}
$$

$$
\left\{\begin{array}{l}
2 u_{k+1}=v_{k}+4 \\\
2 v_{k+1}=u_{k}-2
\end{array}\right.
$$

现在是时候进行迭代了，我们从$u_{0}=v_{0}=0$开始。

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{0} \\\
v_{0}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{l}
0 \\\
0
\end{array}\right]
$$

第一次迭代后，我们得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{1} \\\
v_{1}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
2 \\\
-1
\end{array}\right]
$$

第二次迭代后得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{2} \\\
v_{2}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{l}
\frac{3}{2} \\\
0
\end{array}\right]
$$

第三次迭代后得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{3} \\\
v_{3}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
2 \\\
-\frac{1}{4}
\end{array}\right]
$$

第四次迭代后得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{4} \\\
v_{4}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{l}
\frac{15}{8} \\\
0
\end{array}\right]
$$

第五次迭代后，我们得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{5} \\\
v_{5}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
2 \\\

-\frac{1}{16}
\end{array}\right]
$$

经过五次迭代后发现收敛，因为它的结果接近真实解。

$$
真实解
\left[\begin{array}{l}
2 \\\
0
\end{array}\right]
$$

现在，再来看一下错误等式，$\mathrm{Se}_{k+1}=T e_{k}$，我们把$S$和$T$代入等式，得出：

$$
\left[\begin{array}{ll}
2 & 0 \\\
0 & 2
\end{array}\right] e_{k+1}=\left[\begin{array}{ll}
0 & 1 \\\
1 & 0
\end{array}\right] e_{k}
$$

计算$S$的逆矩阵和$T$相乘$S^{-1}T$得出：

$$
e_{k+1}=\left[\begin{array}{cc}
0 & \frac{1}{2} \\\
\frac{1}{2} & 0
\end{array}\right] e_{k}
$$

这里，$S$的逆矩阵和T相乘$S^{-1}T$有特征值$\frac{1}{2}$和$-\frac{1}{2}$，所以，它的谱半径是$\rho(B)=\frac{1}{2}$。这里的**谱半径**是用来控制收敛的，所以非常重要。谱半径从数学定义上是：矩阵（或者有界线性算子的谱半径）是指其特征值绝对值集合的上确界。这个概念是不是很难理解？具体谱半径的概念你可以查互联网来获取，为了方便你理解，这里我还是用数学方法来简单表达一下。

$$
B=S^{-1} T=\left[\begin{array}{ll}
0 & \frac{1}{2} \\\
\frac{1}{2} & 0
\end{array}\right]
$$

通过$S$的逆矩阵和$T$相乘$S^{-1}T$，我们得到：$|\lambda|_{\max }=\frac{1}{2}$，以及：

$$
\left[\begin{array}{cc}
0 & \frac{1}{2} \\\
\frac{1}{2} & 0
\end{array}\right]^{2}=\left[\begin{array}{cc}
\frac{1}{4} & 0 \\\
0 & \frac{1}{4}
\end{array}\right]
$$

这里的特征值$\frac{1}{2}$非常小，所以10次迭代后，错误就很低了，即$\frac{1^{10}}{2}=\frac{1}{1024}$。而如果特征值是0.99或者0.999，那很显然迭代次数就要多得多，也就是说需要更多时间来做运算。

## 高斯-赛德尔方法实践

现在我们再来看下高斯-赛德尔方法，高斯-赛德尔迭代可以**节约存储**和**加速迭代**，每迭代一次只需一组存储单元，而雅可比迭代需要两组单元。

$S$取$A$的下三角部分，还是使用之前雅可比方法中的例子，我们得出方程组：

$$
\left\{\begin{array}{c}
u_{k+1}=\frac{1}{2} v_{k}+2 \\\
v_{k+1}=\frac{1}{2} u_{k+1}-1
\end{array}\right.
$$

这里有一个比较大的变化，那就是$u_{k}$消失了，通过$v_{k}$，我们可以直接得到$u_{k+1}$和$v_{k+1}$，这样有什么好处呢？两大好处是显而易见的，就是**节约存储**和**加速迭代**。

接下来，我们从$u_{0}=0$，$v_{0}=-1$来测试一下迭代。

第一次迭代后，我们得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{1} \\\
v_{1}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
\frac{3}{2} \\\
\frac{-1}{4}
\end{array}\right]
$$

第二次迭代后得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{2} \\\
v_{2}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{l}
\frac{15}{8} \\\
\frac{-1}{16}
\end{array}\right]
$$

第三次迭代后得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{3} \\\
v_{3}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{r}

\frac{63}{32} \\\
-\frac{1}{64}
\end{array}\right]
$$

经过三次迭代后发现收敛，因为第三次迭代后的结果接近真实解。

错误经过计算分别是$-1, \frac{-1}{4}, \frac{-1}{16}, \frac{-1}{64}$，和刚才使用雅可比方法得出的错误$2, \frac{1}{2}, \frac{1}{8}, \frac{1}{32}$。比较后我们可以发现，无论是迭代次数还是收敛速度方面，高斯-赛德尔方法比雅可比方法速度快、精确度也高得多。

## 逐次超松弛方法

最后，我们在高斯-赛德尔方法上做个小调整，在迭代中引入一个参数“omega”，$ω$，即超松弛因子。然后选择一个合适的$ω$，使得$S^{-1}T$的谱半径尽可能小，这个方法就叫做逐次超松弛方法（Successive over-relaxation method，简称SOR）。

SOR方法的方程是：$ωAx=ωb$，矩阵$S$有$A$的对角线，对角线下是$ωA$，等式右边$T$是$S-ωA$，于是，我们还是使用之前雅可比方法中的例子，得到SOR方程组如下。

$$\left\{\begin{array}{c}
2 u_{k+1}=(2-2 \omega) u_{k}+\omega v_{k}+4 \omega \\\
-\omega u_{k+1}+2 v_{k+1}=(2-2 \omega) v_{k}-2 \omega
\end{array}\right.$$

是不是看起来更复杂了？

没关系，其实它只是在我们眼中看起来复杂，对计算机来说是没区别的。对SOR来说，只是多了一个$ω$，而$ω$选择越好就越快。具体$ω$的选择，以及迭代的过程就不赘述了，我给你一个小提示，你可以在“$ω$大于1”和“$ω$小于1”两种情况下来多选择几个$ω$进行尝试，最后你应该会得到结论：

1. 在$ω$大于1时，$ω$越大，迭代的次数就越多，收敛速度就越慢，$ω$接近1时，迭代的次数越小，收敛速度越快。
2. 在$ω$小于1时，$ω$越小，迭代的次数就越多，收敛速度就越慢，$ω$接近1时，迭代的次数越小，收敛速度越快。

所以，SOR迭代法的关键就是$ω$的选择，它可以被看作是高斯-赛德尔法的扩充。

雅可比法、高斯-赛德尔法，以及SOR迭代法都是定常迭代法。接下来我讲一下和定常迭代法不同的另一类方法，也是实践中用的比较多的方法——**共轭梯度法**（Conjugate gradient），它属于Krylov子空间方法。简单来说，Krylov子空间方法是一种 “降维打击” 手段，是一种牺牲精度换取速度的方法。

## 共轭梯度法

要讲共轭梯度法，我们要先解释一下“共轭”，共轭就是按一定的规律相配的一对，通俗点说就是孪生。“轭”是牛拉车用的木头，那什么是共轭关系呢？同时拉一辆车的两头牛，就是共轭关系。

我们根据这个定义再来解释一下共轭方向，向量$p, q \in R$， 若满足条件$pAq=0$， 则称$p$和$q$关于$A$是共轭方向，或者$p$和$q$关于$A$共轭。有了共轭和共轭方向的概念后，再来看共轭梯度法就简单多了。共轭梯度法的出现不仅是为了解决梯度下降法的收敛速度慢，而且也避免了牛顿法需要存储和计算黑塞矩阵（Hessian Matrix）并求逆的缺点。

现在来看看共轭梯度算法，设$Ax=b$，其中$A$是一个实对称正定矩阵。

首先，我们设初始值$x_{0}$为$0$或者一个估计值，来计算$r_{0}:=b-A x_{0}$。如果$r_{0}$非常小，那$x_{0}$就是结果，如果不是就继续。

接下来设$p_{0}:=r_{0}$，$k:=0$。现在我们开始迭代循环。

a.计算$\alpha_{k}$ 。

$$\alpha_{k}:=\frac{r_{k}^{T} r_{k}}{p_{k}^{T} A p_{k}}$$

b.计算$x_{k+1}$ 。

$$x_{k+1}:=x_{k}+\alpha_{k} p_{k}$$

c.计算$r_{k+1}$。

$$r_{k+1}:=r_{k}-\alpha_{k} A p_{k}$$

d.如果$r_{k+1}$非常小，循环结束，如果不是就继续。

e.计算$β_{k}$ 。

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

f.计算$p_{k+1}$ 。

$$p_{k+1}:=r_{k+1}+\beta_{k} p_{k}$$

g.$k:=k+1$。

4. 返回结果$x_{k+1}$。

从算法中我们可以看出，共轭梯度法的优点是**存储量小**和**具有步收敛性**。如果你熟悉MATLAB，就会发现共轭梯度法的实现超级简单，只需要短短十几行代码（下方代码来自于MATLAB/GNU Octave的

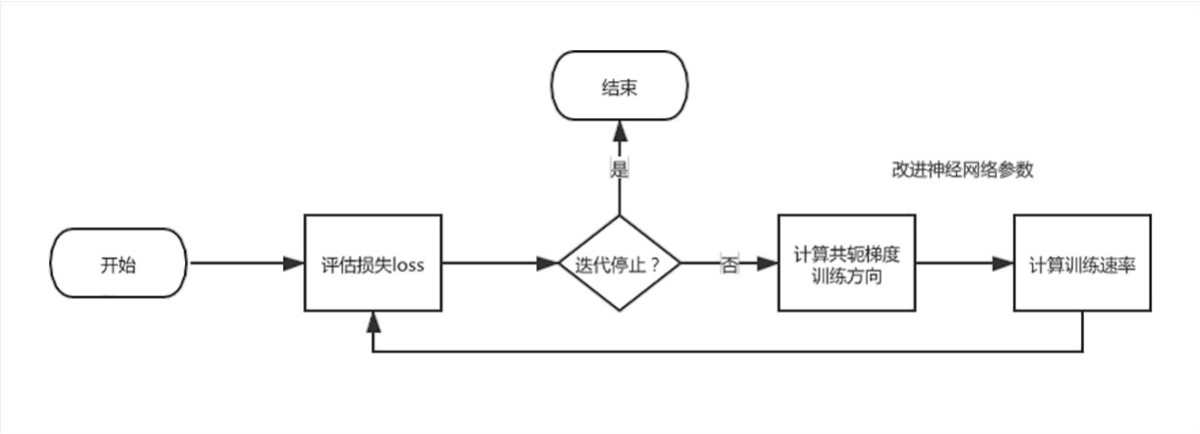
例子）。

```
function x = conjgrad(A, b, x)
    r = b - A * x;
    p = r;
    rsold = r' * r;


    for i = 1:length(b)
        Ap = A * p;
        alpha = rsold / (p' * Ap);
        x = x + alpha * p;
        r = r - alpha * Ap;
        rsnew = r' * r;
        if sqrt(rsnew) < 1e-10
              break;
        end
        p = r + (rsnew / rsold) * p;
        rsold = rsnew;
    end
end
```

## 机器学习中的共轭梯度

共轭梯度法经常被用在训练神经网络中，在实践中已经证明，它是比**梯度下降**更有效的方法，因为就像刚才讲的，它不需要计算黑塞矩阵。那我现在就来讲一讲，使用共轭梯度法的神经网络训练过程。




在整个训练过程中，**参数改进**是重点，当然这也是所有神经网络训练的重点。这个过程是通过计算共轭梯度的训练方向，然后计算训练速率来实现的。在共轭梯度训练算法中，搜索是按共轭方向进行的，也就是说，训练方向是共轭的。所以，收敛速度比梯度下降要快。

现在我们来看训练方向的计算方法。首先，我们设置训练方向向量为$d$，然后，定义一个初始参数向量$w^{0}$，以及一个初始训练方向向量$d^{0}=-g^{0}$，于是，共轭梯度法构造出的训练方向可以表示成：$d^{i+1}=g^{i+1}+d^{i} \cdot \gamma^{i}$。

其中，$g$是梯度向量，$\gamma$是共轭参数。参数通过这个表达式来更新和优化。通常训练速率$\eta$可使用单变量函数优化方法求得。

$$w^{i+1}=w^{i}+d^{i} \cdot \eta^{i}$$

## 本节小结

好了，到这里数值线性代数的迭代法这一讲就结束了，最后我再总结一下前面讲解的内容。

首先，我先解释了数值线性代数，接着再整体讲解了迭代方法。然后，举了一个线性方程组的例子，运用迭代法中的几个比较著名的实践方法：雅可比方法、高斯-赛德尔方法，以及逐次超松弛方法，来解这个线性方程组。最后，我把共轭梯度法用在了深度学习的神经网络训练中。

希望你能在了解了数值线性代数，以及迭代法后，更多地在计算机科学领域中，运用迭代法做矩阵运算。如果有兴趣，你也可以学习其它在实践中使用的迭代法。

## 线性代数练习场

练习时刻到了，这次继续使用第一篇线性方程组里的例子，你可以挑选任意一个迭代法来求解这个线性方程组。

假设，一个旅游团由孩子和大人组成，去程时他们一起坐大巴，每个孩子的票价3元，大人票价3.2元，总共花费118.4元。回程时一起做火车，每个孩子的票价3.5元，大人票价3.6元，总共花费135.2元。请问这个旅游团中有多少孩子和大人？

设小孩人数为$x_{1}$，大人人数为$x_{2}$，于是我们得到了一个方程组：

$$\left\{\begin{array}{c}
3 x_{1}+3.2 x_{2}=118.4 \\\
3.5 x_{1}+3.6 x_{2}=135.2
\end{array}\right.$$

这个方程组的解是：

$$\left\{\begin{array}{l}
x_{1}=16 \\\
x_{2}=22
\end{array}\right.$$

你可以计算一下多少次迭代后它能收敛，也就是逼近真实解？以及它的错误$e$又分别是多少？

欢迎在留言区晒出的你的运算过程和结果。如果有收获，也欢迎你把这篇文章分享给你的朋友。

你好，我是朱维刚。欢迎你继续跟我学习线性代数，今天我要讲的内容是“数值线性代数的迭代法，以及如何在实践中运用迭代法求解线性方程组”。

大密度线性方程组的计算已经成为了世界上最快计算机的测试标准。2008年，IBM为美国能源部Los Alamos国家实验室建造了“Roadrunner”计算机系统，它的运算速度达到了1.026 petaflop/s（千万亿次/秒，petaflop是衡量计算机性能的一个重要单位，1 petaflop等于每秒钟进行1千万亿次的数学运算）。按摩尔定律计算，现在世界上最快的计算机已经达到了200 petaflop，我国也早就进入了世界前列，并有望实现1 exaflop/s（百亿亿次/秒），成为世界第一。


可能你会有些疑惑，为什么我要在课程后期来讲数值线性代数呢？

那是因为数值线性代数是一门特殊的学科，是特别为计算机上进行线性代数计算服务的，可以说它是研究矩阵运算算法的学科，偏向算法实践与工程设计。有了之前基础知识的铺垫后，学习数值线性代数会更有效，而且它是可以直接运用在计算机科学中的，比如：在图像压缩中，使用奇异值分解（SVD）来节省内存；在深度学习中，使用共轭梯度来加速神经网络的收敛。

## 迭代方法说明

课程内容的前期一直都在用**直接法**来解线性方程组，比如高斯消元法。但在实践中，我们在面对复杂场景时，更多的会使用**迭代法**来求解（也就是所谓的间接法），因为很多场景会用到大型稀疏矩阵。所以，我打算在这里讲讲机器学习中的迭代法应用。这里需要注意，不是说直接法不重要，直接法解决了许多相对简单的问题，也是其他方法的基础。

现在我就来说一说什么是迭代法？

我们还是通过线性方程组$Ax=b$来看看。在这里我们分解$A$，使得$A=S-T$，代入等式后得出：$Sx=Tx+b$（等式①）。

按这样的方式持续下去，通过迭代的方式来解$Sx$。这就类似于把复杂问题层层分解和简化，最终使得这个迭代等式成立：$Sx_{k+1}=Tx_{k}+b$（等式②）。

更具体一点来说，我们其实是从$x_{0}$开始，解$Sx_{1}=Tx_{0}+b$。然后，继续解$Sx_{2}=Tx_{1}+b$。一直到$x_{k+1}$非常接近$x_{k}$时，又或者说残余值$r_{k}=b-Ax_{k}$接近$0$时，迭代停止。由于线性方程组的复杂程度不同，这个过程经历几百次的迭代都是有可能的。所以，迭代法的目标就是**比消元法更快速地逼近真实解**。

那么究竟应该如何快速地逼近真实解呢？

这里，$A=S-T$，$A$的分解成了关键，也就是说$A$的分解目标是**每步的运算速度和收敛速度都要快**。每步的运算速度取决于$S$，而收敛速度取决于“错误”(error)，$e_{k}$，这里的错误 $e_{k}$是$x-x_{k}$，也就是说$x$和$x_{k}$的差应该快速逼近0，我们把错误表示成这样：$e_{k+1}=S^{-1}Te_{k}$（等式③）。

它是等式②和①差后得出的结果，迭代的每一步里，错误都会被$S^{-1}T$乘，如果$S^{-1}T$越小，那逼近0的速度就更快。在极端分解情况下，$S=A$，$T=0$，那$Ax=b$又回来了，第一次迭代就能完成收敛，其中$S^{-1}T$等于0。

但是，这一次迭代的成本太高，我们回到了非迭代方式的原点。所以，你也知道，鱼和熊掌不能兼得，$S$的选择成为了关键。那我们要如何在每一次迭代的速度和快速收敛之间做出平衡呢？我给你$S$选择的几种常见方法：

1. 雅可比方法（Jacobi method）：$S$取$A$的对角部分。
2. 高斯-赛德尔方法（Gauss-Seidel）：$S$取$A$的下三角部分，包含对角。
3. ILU方法（Incomplete LU）：$S=L$估计乘$U$估计。

## 雅可比方法实践

总体介绍了迭代法理论之后，我们就进入迭代法运用的实践环节。

首先，我们先来试试使用雅可比方法解线性方程组，雅克比迭代法是众多迭代法中比较早且较简单的一种。所以，作为迭代法的实践开篇比较合适。让我们设一个2×2的线性方程组：

$$
Ax=b
$$

$$
\left\{\begin{array}{c}
2 u-v=4 \\\
-u+2 v=-2
\end{array}\right.
$$

我们很容易就能得出这个方程组的解如下。

$$
\left[\begin{array}{l}
u \\\
v
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{l}
2 \\\
0
\end{array}\right]
$$

现在我们就用雅可比方法来看看怎么解这个方程组：

首先，我们把线性方程组转换成矩阵形式。

$$

\left[\begin{array}{cc}
2 & -1 \\\
-1 & 2
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
4 \\\
-2
\end{array}\right]
$$

接着，把A的对角线放在等式左边，得出$S$矩阵。

$$
S=\left[\begin{array}{ll}
2 & 0 \\\
0 & 2
\end{array}\right]
$$

其余部分移到等式右边，得出$T$矩阵。

$$
T=\left[\begin{array}{ll}
0 & 1 \\\
1 & 0
\end{array}\right]
$$

于是，雅可比迭代就可以表示成下面这样的形式。

$$
\mathrm{S} x_{k+1}=T x_{k}+\mathrm{b}
$$

$$
\left\{\begin{array}{l}
2 u_{k+1}=v_{k}+4 \\\
2 v_{k+1}=u_{k}-2
\end{array}\right.
$$

现在是时候进行迭代了，我们从$u_{0}=v_{0}=0$开始。

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{0} \\\
v_{0}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{l}
0 \\\
0
\end{array}\right]
$$

第一次迭代后，我们得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{1} \\\
v_{1}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
2 \\\
-1
\end{array}\right]
$$

第二次迭代后得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{2} \\\
v_{2}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{l}
\frac{3}{2} \\\
0
\end{array}\right]
$$

第三次迭代后得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{3} \\\
v_{3}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
2 \\\
-\frac{1}{4}
\end{array}\right]
$$

第四次迭代后得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{4} \\\
v_{4}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{l}
\frac{15}{8} \\\
0
\end{array}\right]
$$

第五次迭代后，我们得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{5} \\\
v_{5}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
2 \\\

-\frac{1}{16}
\end{array}\right]
$$

经过五次迭代后发现收敛，因为它的结果接近真实解。

$$
真实解
\left[\begin{array}{l}
2 \\\
0
\end{array}\right]
$$

现在，再来看一下错误等式，$\mathrm{Se}_{k+1}=T e_{k}$，我们把$S$和$T$代入等式，得出：

$$
\left[\begin{array}{ll}
2 & 0 \\\
0 & 2
\end{array}\right] e_{k+1}=\left[\begin{array}{ll}
0 & 1 \\\
1 & 0
\end{array}\right] e_{k}
$$

计算$S$的逆矩阵和$T$相乘$S^{-1}T$得出：

$$
e_{k+1}=\left[\begin{array}{cc}
0 & \frac{1}{2} \\\
\frac{1}{2} & 0
\end{array}\right] e_{k}
$$

这里，$S$的逆矩阵和T相乘$S^{-1}T$有特征值$\frac{1}{2}$和$-\frac{1}{2}$，所以，它的谱半径是$\rho(B)=\frac{1}{2}$。这里的**谱半径**是用来控制收敛的，所以非常重要。谱半径从数学定义上是：矩阵（或者有界线性算子的谱半径）是指其特征值绝对值集合的上确界。这个概念是不是很难理解？具体谱半径的概念你可以查互联网来获取，为了方便你理解，这里我还是用数学方法来简单表达一下。

$$
B=S^{-1} T=\left[\begin{array}{ll}
0 & \frac{1}{2} \\\
\frac{1}{2} & 0
\end{array}\right]
$$

通过$S$的逆矩阵和$T$相乘$S^{-1}T$，我们得到：$|\lambda|_{\max }=\frac{1}{2}$，以及：

$$
\left[\begin{array}{cc}
0 & \frac{1}{2} \\\
\frac{1}{2} & 0
\end{array}\right]^{2}=\left[\begin{array}{cc}
\frac{1}{4} & 0 \\\
0 & \frac{1}{4}
\end{array}\right]
$$

这里的特征值$\frac{1}{2}$非常小，所以10次迭代后，错误就很低了，即$\frac{1^{10}}{2}=\frac{1}{1024}$。而如果特征值是0.99或者0.999，那很显然迭代次数就要多得多，也就是说需要更多时间来做运算。

## 高斯-赛德尔方法实践

现在我们再来看下高斯-赛德尔方法，高斯-赛德尔迭代可以**节约存储**和**加速迭代**，每迭代一次只需一组存储单元，而雅可比迭代需要两组单元。

$S$取$A$的下三角部分，还是使用之前雅可比方法中的例子，我们得出方程组：

$$
\left\{\begin{array}{c}
u_{k+1}=\frac{1}{2} v_{k}+2 \\\
v_{k+1}=\frac{1}{2} u_{k+1}-1
\end{array}\right.
$$

这里有一个比较大的变化，那就是$u_{k}$消失了，通过$v_{k}$，我们可以直接得到$u_{k+1}$和$v_{k+1}$，这样有什么好处呢？两大好处是显而易见的，就是**节约存储**和**加速迭代**。

接下来，我们从$u_{0}=0$，$v_{0}=-1$来测试一下迭代。

第一次迭代后，我们得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{1} \\\
v_{1}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
\frac{3}{2} \\\
\frac{-1}{4}
\end{array}\right]
$$

第二次迭代后得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{2} \\\
v_{2}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{l}
\frac{15}{8} \\\
\frac{-1}{16}
\end{array}\right]
$$

第三次迭代后得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{3} \\\
v_{3}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{r}

\frac{63}{32} \\\
-\frac{1}{64}
\end{array}\right]
$$

经过三次迭代后发现收敛，因为第三次迭代后的结果接近真实解。

错误经过计算分别是$-1, \frac{-1}{4}, \frac{-1}{16}, \frac{-1}{64}$，和刚才使用雅可比方法得出的错误$2, \frac{1}{2}, \frac{1}{8}, \frac{1}{32}$。比较后我们可以发现，无论是迭代次数还是收敛速度方面，高斯-赛德尔方法比雅可比方法速度快、精确度也高得多。

## 逐次超松弛方法

最后，我们在高斯-赛德尔方法上做个小调整，在迭代中引入一个参数“omega”，$ω$，即超松弛因子。然后选择一个合适的$ω$，使得$S^{-1}T$的谱半径尽可能小，这个方法就叫做逐次超松弛方法（Successive over-relaxation method，简称SOR）。

SOR方法的方程是：$ωAx=ωb$，矩阵$S$有$A$的对角线，对角线下是$ωA$，等式右边$T$是$S-ωA$，于是，我们还是使用之前雅可比方法中的例子，得到SOR方程组如下。

$$\left\{\begin{array}{c}
2 u_{k+1}=(2-2 \omega) u_{k}+\omega v_{k}+4 \omega \\\
-\omega u_{k+1}+2 v_{k+1}=(2-2 \omega) v_{k}-2 \omega
\end{array}\right.$$

是不是看起来更复杂了？

没关系，其实它只是在我们眼中看起来复杂，对计算机来说是没区别的。对SOR来说，只是多了一个$ω$，而$ω$选择越好就越快。具体$ω$的选择，以及迭代的过程就不赘述了，我给你一个小提示，你可以在“$ω$大于1”和“$ω$小于1”两种情况下来多选择几个$ω$进行尝试，最后你应该会得到结论：

1. 在$ω$大于1时，$ω$越大，迭代的次数就越多，收敛速度就越慢，$ω$接近1时，迭代的次数越小，收敛速度越快。
2. 在$ω$小于1时，$ω$越小，迭代的次数就越多，收敛速度就越慢，$ω$接近1时，迭代的次数越小，收敛速度越快。

所以，SOR迭代法的关键就是$ω$的选择，它可以被看作是高斯-赛德尔法的扩充。

雅可比法、高斯-赛德尔法，以及SOR迭代法都是定常迭代法。接下来我讲一下和定常迭代法不同的另一类方法，也是实践中用的比较多的方法——**共轭梯度法**（Conjugate gradient），它属于Krylov子空间方法。简单来说，Krylov子空间方法是一种 “降维打击” 手段，是一种牺牲精度换取速度的方法。

## 共轭梯度法

要讲共轭梯度法，我们要先解释一下“共轭”，共轭就是按一定的规律相配的一对，通俗点说就是孪生。“轭”是牛拉车用的木头，那什么是共轭关系呢？同时拉一辆车的两头牛，就是共轭关系。

我们根据这个定义再来解释一下共轭方向，向量$p, q \in R$， 若满足条件$pAq=0$， 则称$p$和$q$关于$A$是共轭方向，或者$p$和$q$关于$A$共轭。有了共轭和共轭方向的概念后，再来看共轭梯度法就简单多了。共轭梯度法的出现不仅是为了解决梯度下降法的收敛速度慢，而且也避免了牛顿法需要存储和计算黑塞矩阵（Hessian Matrix）并求逆的缺点。

现在来看看共轭梯度算法，设$Ax=b$，其中$A$是一个实对称正定矩阵。

首先，我们设初始值$x_{0}$为$0$或者一个估计值，来计算$r_{0}:=b-A x_{0}$。如果$r_{0}$非常小，那$x_{0}$就是结果，如果不是就继续。

接下来设$p_{0}:=r_{0}$，$k:=0$。现在我们开始迭代循环。

a.计算$\alpha_{k}$ 。

$$\alpha_{k}:=\frac{r_{k}^{T} r_{k}}{p_{k}^{T} A p_{k}}$$

b.计算$x_{k+1}$ 。

$$x_{k+1}:=x_{k}+\alpha_{k} p_{k}$$

c.计算$r_{k+1}$。

$$r_{k+1}:=r_{k}-\alpha_{k} A p_{k}$$

d.如果$r_{k+1}$非常小，循环结束，如果不是就继续。

e.计算$β_{k}$ 。

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

f.计算$p_{k+1}$ 。

$$p_{k+1}:=r_{k+1}+\beta_{k} p_{k}$$

g.$k:=k+1$。

4. 返回结果$x_{k+1}$。

从算法中我们可以看出，共轭梯度法的优点是**存储量小**和**具有步收敛性**。如果你熟悉MATLAB，就会发现共轭梯度法的实现超级简单，只需要短短十几行代码（下方代码来自于MATLAB/GNU Octave的

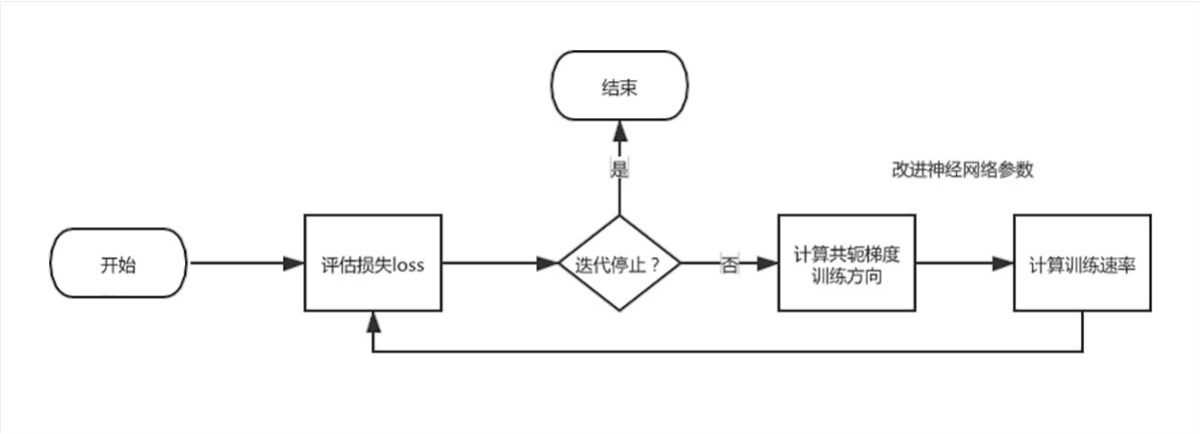
例子）。

```
function x = conjgrad(A, b, x)
    r = b - A * x;
    p = r;
    rsold = r' * r;


    for i = 1:length(b)
        Ap = A * p;
        alpha = rsold / (p' * Ap);
        x = x + alpha * p;
        r = r - alpha * Ap;
        rsnew = r' * r;
        if sqrt(rsnew) < 1e-10
              break;
        end
        p = r + (rsnew / rsold) * p;
        rsold = rsnew;
    end
end
```

## 机器学习中的共轭梯度

共轭梯度法经常被用在训练神经网络中，在实践中已经证明，它是比**梯度下降**更有效的方法，因为就像刚才讲的，它不需要计算黑塞矩阵。那我现在就来讲一讲，使用共轭梯度法的神经网络训练过程。




在整个训练过程中，**参数改进**是重点，当然这也是所有神经网络训练的重点。这个过程是通过计算共轭梯度的训练方向，然后计算训练速率来实现的。在共轭梯度训练算法中，搜索是按共轭方向进行的，也就是说，训练方向是共轭的。所以，收敛速度比梯度下降要快。

现在我们来看训练方向的计算方法。首先，我们设置训练方向向量为$d$，然后，定义一个初始参数向量$w^{0}$，以及一个初始训练方向向量$d^{0}=-g^{0}$，于是，共轭梯度法构造出的训练方向可以表示成：$d^{i+1}=g^{i+1}+d^{i} \cdot \gamma^{i}$。

其中，$g$是梯度向量，$\gamma$是共轭参数。参数通过这个表达式来更新和优化。通常训练速率$\eta$可使用单变量函数优化方法求得。

$$w^{i+1}=w^{i}+d^{i} \cdot \eta^{i}$$

## 本节小结

好了，到这里数值线性代数的迭代法这一讲就结束了，最后我再总结一下前面讲解的内容。

首先，我先解释了数值线性代数，接着再整体讲解了迭代方法。然后，举了一个线性方程组的例子，运用迭代法中的几个比较著名的实践方法：雅可比方法、高斯-赛德尔方法，以及逐次超松弛方法，来解这个线性方程组。最后，我把共轭梯度法用在了深度学习的神经网络训练中。

希望你能在了解了数值线性代数，以及迭代法后，更多地在计算机科学领域中，运用迭代法做矩阵运算。如果有兴趣，你也可以学习其它在实践中使用的迭代法。

## 线性代数练习场

练习时刻到了，这次继续使用第一篇线性方程组里的例子，你可以挑选任意一个迭代法来求解这个线性方程组。

假设，一个旅游团由孩子和大人组成，去程时他们一起坐大巴，每个孩子的票价3元，大人票价3.2元，总共花费118.4元。回程时一起做火车，每个孩子的票价3.5元，大人票价3.6元，总共花费135.2元。请问这个旅游团中有多少孩子和大人？

设小孩人数为$x_{1}$，大人人数为$x_{2}$，于是我们得到了一个方程组：

$$\left\{\begin{array}{c}
3 x_{1}+3.2 x_{2}=118.4 \\\
3.5 x_{1}+3.6 x_{2}=135.2
\end{array}\right.$$

这个方程组的解是：

$$\left\{\begin{array}{l}
x_{1}=16 \\\
x_{2}=22
\end{array}\right.$$

你可以计算一下多少次迭代后它能收敛，也就是逼近真实解？以及它的错误$e$又分别是多少？

欢迎在留言区晒出的你的运算过程和结果。如果有收获，也欢迎你把这篇文章分享给你的朋友。

你好，我是朱维刚。欢迎你继续跟我学习线性代数，今天我要讲的内容是“数值线性代数的迭代法，以及如何在实践中运用迭代法求解线性方程组”。

大密度线性方程组的计算已经成为了世界上最快计算机的测试标准。2008年，IBM为美国能源部Los Alamos国家实验室建造了“Roadrunner”计算机系统，它的运算速度达到了1.026 petaflop/s（千万亿次/秒，petaflop是衡量计算机性能的一个重要单位，1 petaflop等于每秒钟进行1千万亿次的数学运算）。按摩尔定律计算，现在世界上最快的计算机已经达到了200 petaflop，我国也早就进入了世界前列，并有望实现1 exaflop/s（百亿亿次/秒），成为世界第一。


可能你会有些疑惑，为什么我要在课程后期来讲数值线性代数呢？

那是因为数值线性代数是一门特殊的学科，是特别为计算机上进行线性代数计算服务的，可以说它是研究矩阵运算算法的学科，偏向算法实践与工程设计。有了之前基础知识的铺垫后，学习数值线性代数会更有效，而且它是可以直接运用在计算机科学中的，比如：在图像压缩中，使用奇异值分解（SVD）来节省内存；在深度学习中，使用共轭梯度来加速神经网络的收敛。

## 迭代方法说明

课程内容的前期一直都在用**直接法**来解线性方程组，比如高斯消元法。但在实践中，我们在面对复杂场景时，更多的会使用**迭代法**来求解（也就是所谓的间接法），因为很多场景会用到大型稀疏矩阵。所以，我打算在这里讲讲机器学习中的迭代法应用。这里需要注意，不是说直接法不重要，直接法解决了许多相对简单的问题，也是其他方法的基础。

现在我就来说一说什么是迭代法？

我们还是通过线性方程组$Ax=b$来看看。在这里我们分解$A$，使得$A=S-T$，代入等式后得出：$Sx=Tx+b$（等式①）。

按这样的方式持续下去，通过迭代的方式来解$Sx$。这就类似于把复杂问题层层分解和简化，最终使得这个迭代等式成立：$Sx_{k+1}=Tx_{k}+b$（等式②）。

更具体一点来说，我们其实是从$x_{0}$开始，解$Sx_{1}=Tx_{0}+b$。然后，继续解$Sx_{2}=Tx_{1}+b$。一直到$x_{k+1}$非常接近$x_{k}$时，又或者说残余值$r_{k}=b-Ax_{k}$接近$0$时，迭代停止。由于线性方程组的复杂程度不同，这个过程经历几百次的迭代都是有可能的。所以，迭代法的目标就是**比消元法更快速地逼近真实解**。

那么究竟应该如何快速地逼近真实解呢？

这里，$A=S-T$，$A$的分解成了关键，也就是说$A$的分解目标是**每步的运算速度和收敛速度都要快**。每步的运算速度取决于$S$，而收敛速度取决于“错误”(error)，$e_{k}$，这里的错误 $e_{k}$是$x-x_{k}$，也就是说$x$和$x_{k}$的差应该快速逼近0，我们把错误表示成这样：$e_{k+1}=S^{-1}Te_{k}$（等式③）。

它是等式②和①差后得出的结果，迭代的每一步里，错误都会被$S^{-1}T$乘，如果$S^{-1}T$越小，那逼近0的速度就更快。在极端分解情况下，$S=A$，$T=0$，那$Ax=b$又回来了，第一次迭代就能完成收敛，其中$S^{-1}T$等于0。

但是，这一次迭代的成本太高，我们回到了非迭代方式的原点。所以，你也知道，鱼和熊掌不能兼得，$S$的选择成为了关键。那我们要如何在每一次迭代的速度和快速收敛之间做出平衡呢？我给你$S$选择的几种常见方法：

1. 雅可比方法（Jacobi method）：$S$取$A$的对角部分。
2. 高斯-赛德尔方法（Gauss-Seidel）：$S$取$A$的下三角部分，包含对角。
3. ILU方法（Incomplete LU）：$S=L$估计乘$U$估计。

## 雅可比方法实践

总体介绍了迭代法理论之后，我们就进入迭代法运用的实践环节。

首先，我们先来试试使用雅可比方法解线性方程组，雅克比迭代法是众多迭代法中比较早且较简单的一种。所以，作为迭代法的实践开篇比较合适。让我们设一个2×2的线性方程组：

$$
Ax=b
$$

$$
\left\{\begin{array}{c}
2 u-v=4 \\\
-u+2 v=-2
\end{array}\right.
$$

我们很容易就能得出这个方程组的解如下。

$$
\left[\begin{array}{l}
u \\\
v
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{l}
2 \\\
0
\end{array}\right]
$$

现在我们就用雅可比方法来看看怎么解这个方程组：

首先，我们把线性方程组转换成矩阵形式。

$$

\left[\begin{array}{cc}
2 & -1 \\\
-1 & 2
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
4 \\\
-2
\end{array}\right]
$$

接着，把A的对角线放在等式左边，得出$S$矩阵。

$$
S=\left[\begin{array}{ll}
2 & 0 \\\
0 & 2
\end{array}\right]
$$

其余部分移到等式右边，得出$T$矩阵。

$$
T=\left[\begin{array}{ll}
0 & 1 \\\
1 & 0
\end{array}\right]
$$

于是，雅可比迭代就可以表示成下面这样的形式。

$$
\mathrm{S} x_{k+1}=T x_{k}+\mathrm{b}
$$

$$
\left\{\begin{array}{l}
2 u_{k+1}=v_{k}+4 \\\
2 v_{k+1}=u_{k}-2
\end{array}\right.
$$

现在是时候进行迭代了，我们从$u_{0}=v_{0}=0$开始。

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{0} \\\
v_{0}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{l}
0 \\\
0
\end{array}\right]
$$

第一次迭代后，我们得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{1} \\\
v_{1}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
2 \\\
-1
\end{array}\right]
$$

第二次迭代后得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{2} \\\
v_{2}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{l}
\frac{3}{2} \\\
0
\end{array}\right]
$$

第三次迭代后得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{3} \\\
v_{3}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
2 \\\
-\frac{1}{4}
\end{array}\right]
$$

第四次迭代后得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{4} \\\
v_{4}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{l}
\frac{15}{8} \\\
0
\end{array}\right]
$$

第五次迭代后，我们得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{5} \\\
v_{5}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
2 \\\

-\frac{1}{16}
\end{array}\right]
$$

经过五次迭代后发现收敛，因为它的结果接近真实解。

$$
真实解
\left[\begin{array}{l}
2 \\\
0
\end{array}\right]
$$

现在，再来看一下错误等式，$\mathrm{Se}_{k+1}=T e_{k}$，我们把$S$和$T$代入等式，得出：

$$
\left[\begin{array}{ll}
2 & 0 \\\
0 & 2
\end{array}\right] e_{k+1}=\left[\begin{array}{ll}
0 & 1 \\\
1 & 0
\end{array}\right] e_{k}
$$

计算$S$的逆矩阵和$T$相乘$S^{-1}T$得出：

$$
e_{k+1}=\left[\begin{array}{cc}
0 & \frac{1}{2} \\\
\frac{1}{2} & 0
\end{array}\right] e_{k}
$$

这里，$S$的逆矩阵和T相乘$S^{-1}T$有特征值$\frac{1}{2}$和$-\frac{1}{2}$，所以，它的谱半径是$\rho(B)=\frac{1}{2}$。这里的**谱半径**是用来控制收敛的，所以非常重要。谱半径从数学定义上是：矩阵（或者有界线性算子的谱半径）是指其特征值绝对值集合的上确界。这个概念是不是很难理解？具体谱半径的概念你可以查互联网来获取，为了方便你理解，这里我还是用数学方法来简单表达一下。

$$
B=S^{-1} T=\left[\begin{array}{ll}
0 & \frac{1}{2} \\\
\frac{1}{2} & 0
\end{array}\right]
$$

通过$S$的逆矩阵和$T$相乘$S^{-1}T$，我们得到：$|\lambda|_{\max }=\frac{1}{2}$，以及：

$$
\left[\begin{array}{cc}
0 & \frac{1}{2} \\\
\frac{1}{2} & 0
\end{array}\right]^{2}=\left[\begin{array}{cc}
\frac{1}{4} & 0 \\\
0 & \frac{1}{4}
\end{array}\right]
$$

这里的特征值$\frac{1}{2}$非常小，所以10次迭代后，错误就很低了，即$\frac{1^{10}}{2}=\frac{1}{1024}$。而如果特征值是0.99或者0.999，那很显然迭代次数就要多得多，也就是说需要更多时间来做运算。

## 高斯-赛德尔方法实践

现在我们再来看下高斯-赛德尔方法，高斯-赛德尔迭代可以**节约存储**和**加速迭代**，每迭代一次只需一组存储单元，而雅可比迭代需要两组单元。

$S$取$A$的下三角部分，还是使用之前雅可比方法中的例子，我们得出方程组：

$$
\left\{\begin{array}{c}
u_{k+1}=\frac{1}{2} v_{k}+2 \\\
v_{k+1}=\frac{1}{2} u_{k+1}-1
\end{array}\right.
$$

这里有一个比较大的变化，那就是$u_{k}$消失了，通过$v_{k}$，我们可以直接得到$u_{k+1}$和$v_{k+1}$，这样有什么好处呢？两大好处是显而易见的，就是**节约存储**和**加速迭代**。

接下来，我们从$u_{0}=0$，$v_{0}=-1$来测试一下迭代。

第一次迭代后，我们得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{1} \\\
v_{1}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
\frac{3}{2} \\\
\frac{-1}{4}
\end{array}\right]
$$

第二次迭代后得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{2} \\\
v_{2}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{l}
\frac{15}{8} \\\
\frac{-1}{16}
\end{array}\right]
$$

第三次迭代后得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{3} \\\
v_{3}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{r}

\frac{63}{32} \\\
-\frac{1}{64}
\end{array}\right]
$$

经过三次迭代后发现收敛，因为第三次迭代后的结果接近真实解。

错误经过计算分别是$-1, \frac{-1}{4}, \frac{-1}{16}, \frac{-1}{64}$，和刚才使用雅可比方法得出的错误$2, \frac{1}{2}, \frac{1}{8}, \frac{1}{32}$。比较后我们可以发现，无论是迭代次数还是收敛速度方面，高斯-赛德尔方法比雅可比方法速度快、精确度也高得多。

## 逐次超松弛方法

最后，我们在高斯-赛德尔方法上做个小调整，在迭代中引入一个参数“omega”，$ω$，即超松弛因子。然后选择一个合适的$ω$，使得$S^{-1}T$的谱半径尽可能小，这个方法就叫做逐次超松弛方法（Successive over-relaxation method，简称SOR）。

SOR方法的方程是：$ωAx=ωb$，矩阵$S$有$A$的对角线，对角线下是$ωA$，等式右边$T$是$S-ωA$，于是，我们还是使用之前雅可比方法中的例子，得到SOR方程组如下。

$$\left\{\begin{array}{c}
2 u_{k+1}=(2-2 \omega) u_{k}+\omega v_{k}+4 \omega \\\
-\omega u_{k+1}+2 v_{k+1}=(2-2 \omega) v_{k}-2 \omega
\end{array}\right.$$

是不是看起来更复杂了？

没关系，其实它只是在我们眼中看起来复杂，对计算机来说是没区别的。对SOR来说，只是多了一个$ω$，而$ω$选择越好就越快。具体$ω$的选择，以及迭代的过程就不赘述了，我给你一个小提示，你可以在“$ω$大于1”和“$ω$小于1”两种情况下来多选择几个$ω$进行尝试，最后你应该会得到结论：

1. 在$ω$大于1时，$ω$越大，迭代的次数就越多，收敛速度就越慢，$ω$接近1时，迭代的次数越小，收敛速度越快。
2. 在$ω$小于1时，$ω$越小，迭代的次数就越多，收敛速度就越慢，$ω$接近1时，迭代的次数越小，收敛速度越快。

所以，SOR迭代法的关键就是$ω$的选择，它可以被看作是高斯-赛德尔法的扩充。

雅可比法、高斯-赛德尔法，以及SOR迭代法都是定常迭代法。接下来我讲一下和定常迭代法不同的另一类方法，也是实践中用的比较多的方法——**共轭梯度法**（Conjugate gradient），它属于Krylov子空间方法。简单来说，Krylov子空间方法是一种 “降维打击” 手段，是一种牺牲精度换取速度的方法。

## 共轭梯度法

要讲共轭梯度法，我们要先解释一下“共轭”，共轭就是按一定的规律相配的一对，通俗点说就是孪生。“轭”是牛拉车用的木头，那什么是共轭关系呢？同时拉一辆车的两头牛，就是共轭关系。

我们根据这个定义再来解释一下共轭方向，向量$p, q \in R$， 若满足条件$pAq=0$， 则称$p$和$q$关于$A$是共轭方向，或者$p$和$q$关于$A$共轭。有了共轭和共轭方向的概念后，再来看共轭梯度法就简单多了。共轭梯度法的出现不仅是为了解决梯度下降法的收敛速度慢，而且也避免了牛顿法需要存储和计算黑塞矩阵（Hessian Matrix）并求逆的缺点。

现在来看看共轭梯度算法，设$Ax=b$，其中$A$是一个实对称正定矩阵。

首先，我们设初始值$x_{0}$为$0$或者一个估计值，来计算$r_{0}:=b-A x_{0}$。如果$r_{0}$非常小，那$x_{0}$就是结果，如果不是就继续。

接下来设$p_{0}:=r_{0}$，$k:=0$。现在我们开始迭代循环。

a.计算$\alpha_{k}$ 。

$$\alpha_{k}:=\frac{r_{k}^{T} r_{k}}{p_{k}^{T} A p_{k}}$$

b.计算$x_{k+1}$ 。

$$x_{k+1}:=x_{k}+\alpha_{k} p_{k}$$

c.计算$r_{k+1}$。

$$r_{k+1}:=r_{k}-\alpha_{k} A p_{k}$$

d.如果$r_{k+1}$非常小，循环结束，如果不是就继续。

e.计算$β_{k}$ 。

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

f.计算$p_{k+1}$ 。

$$p_{k+1}:=r_{k+1}+\beta_{k} p_{k}$$

g.$k:=k+1$。

4. 返回结果$x_{k+1}$。

从算法中我们可以看出，共轭梯度法的优点是**存储量小**和**具有步收敛性**。如果你熟悉MATLAB，就会发现共轭梯度法的实现超级简单，只需要短短十几行代码（下方代码来自于MATLAB/GNU Octave的

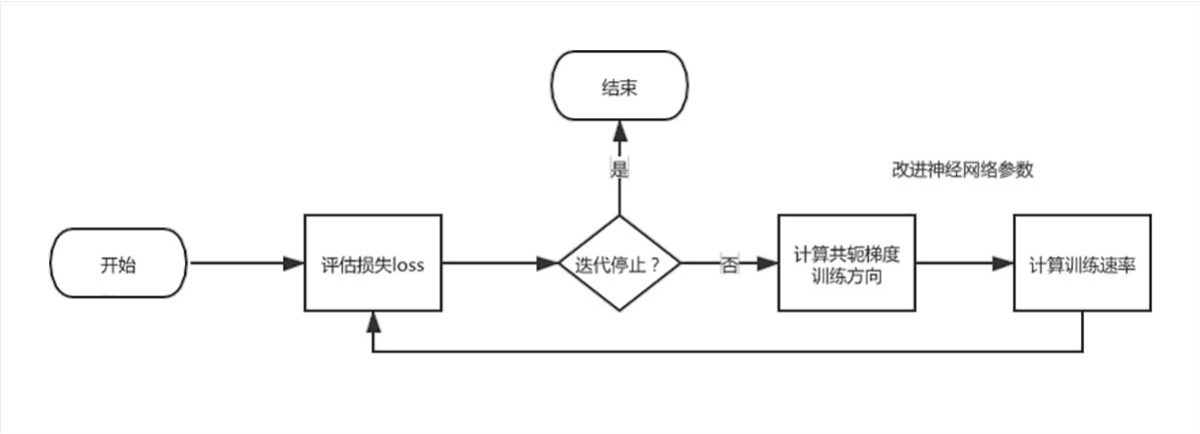
例子）。

```
function x = conjgrad(A, b, x)
    r = b - A * x;
    p = r;
    rsold = r' * r;


    for i = 1:length(b)
        Ap = A * p;
        alpha = rsold / (p' * Ap);
        x = x + alpha * p;
        r = r - alpha * Ap;
        rsnew = r' * r;
        if sqrt(rsnew) < 1e-10
              break;
        end
        p = r + (rsnew / rsold) * p;
        rsold = rsnew;
    end
end
```

## 机器学习中的共轭梯度

共轭梯度法经常被用在训练神经网络中，在实践中已经证明，它是比**梯度下降**更有效的方法，因为就像刚才讲的，它不需要计算黑塞矩阵。那我现在就来讲一讲，使用共轭梯度法的神经网络训练过程。




在整个训练过程中，**参数改进**是重点，当然这也是所有神经网络训练的重点。这个过程是通过计算共轭梯度的训练方向，然后计算训练速率来实现的。在共轭梯度训练算法中，搜索是按共轭方向进行的，也就是说，训练方向是共轭的。所以，收敛速度比梯度下降要快。

现在我们来看训练方向的计算方法。首先，我们设置训练方向向量为$d$，然后，定义一个初始参数向量$w^{0}$，以及一个初始训练方向向量$d^{0}=-g^{0}$，于是，共轭梯度法构造出的训练方向可以表示成：$d^{i+1}=g^{i+1}+d^{i} \cdot \gamma^{i}$。

其中，$g$是梯度向量，$\gamma$是共轭参数。参数通过这个表达式来更新和优化。通常训练速率$\eta$可使用单变量函数优化方法求得。

$$w^{i+1}=w^{i}+d^{i} \cdot \eta^{i}$$

## 本节小结

好了，到这里数值线性代数的迭代法这一讲就结束了，最后我再总结一下前面讲解的内容。

首先，我先解释了数值线性代数，接着再整体讲解了迭代方法。然后，举了一个线性方程组的例子，运用迭代法中的几个比较著名的实践方法：雅可比方法、高斯-赛德尔方法，以及逐次超松弛方法，来解这个线性方程组。最后，我把共轭梯度法用在了深度学习的神经网络训练中。

希望你能在了解了数值线性代数，以及迭代法后，更多地在计算机科学领域中，运用迭代法做矩阵运算。如果有兴趣，你也可以学习其它在实践中使用的迭代法。

## 线性代数练习场

练习时刻到了，这次继续使用第一篇线性方程组里的例子，你可以挑选任意一个迭代法来求解这个线性方程组。

假设，一个旅游团由孩子和大人组成，去程时他们一起坐大巴，每个孩子的票价3元，大人票价3.2元，总共花费118.4元。回程时一起做火车，每个孩子的票价3.5元，大人票价3.6元，总共花费135.2元。请问这个旅游团中有多少孩子和大人？

设小孩人数为$x_{1}$，大人人数为$x_{2}$，于是我们得到了一个方程组：

$$\left\{\begin{array}{c}
3 x_{1}+3.2 x_{2}=118.4 \\\
3.5 x_{1}+3.6 x_{2}=135.2
\end{array}\right.$$

这个方程组的解是：

$$\left\{\begin{array}{l}
x_{1}=16 \\\
x_{2}=22
\end{array}\right.$$

你可以计算一下多少次迭代后它能收敛，也就是逼近真实解？以及它的错误$e$又分别是多少？

欢迎在留言区晒出的你的运算过程和结果。如果有收获，也欢迎你把这篇文章分享给你的朋友。

你好，我是朱维刚。欢迎你继续跟我学习线性代数，今天我要讲的内容是“数值线性代数的迭代法，以及如何在实践中运用迭代法求解线性方程组”。

大密度线性方程组的计算已经成为了世界上最快计算机的测试标准。2008年，IBM为美国能源部Los Alamos国家实验室建造了“Roadrunner”计算机系统，它的运算速度达到了1.026 petaflop/s（千万亿次/秒，petaflop是衡量计算机性能的一个重要单位，1 petaflop等于每秒钟进行1千万亿次的数学运算）。按摩尔定律计算，现在世界上最快的计算机已经达到了200 petaflop，我国也早就进入了世界前列，并有望实现1 exaflop/s（百亿亿次/秒），成为世界第一。


可能你会有些疑惑，为什么我要在课程后期来讲数值线性代数呢？

那是因为数值线性代数是一门特殊的学科，是特别为计算机上进行线性代数计算服务的，可以说它是研究矩阵运算算法的学科，偏向算法实践与工程设计。有了之前基础知识的铺垫后，学习数值线性代数会更有效，而且它是可以直接运用在计算机科学中的，比如：在图像压缩中，使用奇异值分解（SVD）来节省内存；在深度学习中，使用共轭梯度来加速神经网络的收敛。

## 迭代方法说明

课程内容的前期一直都在用**直接法**来解线性方程组，比如高斯消元法。但在实践中，我们在面对复杂场景时，更多的会使用**迭代法**来求解（也就是所谓的间接法），因为很多场景会用到大型稀疏矩阵。所以，我打算在这里讲讲机器学习中的迭代法应用。这里需要注意，不是说直接法不重要，直接法解决了许多相对简单的问题，也是其他方法的基础。

现在我就来说一说什么是迭代法？

我们还是通过线性方程组$Ax=b$来看看。在这里我们分解$A$，使得$A=S-T$，代入等式后得出：$Sx=Tx+b$（等式①）。

按这样的方式持续下去，通过迭代的方式来解$Sx$。这就类似于把复杂问题层层分解和简化，最终使得这个迭代等式成立：$Sx_{k+1}=Tx_{k}+b$（等式②）。

更具体一点来说，我们其实是从$x_{0}$开始，解$Sx_{1}=Tx_{0}+b$。然后，继续解$Sx_{2}=Tx_{1}+b$。一直到$x_{k+1}$非常接近$x_{k}$时，又或者说残余值$r_{k}=b-Ax_{k}$接近$0$时，迭代停止。由于线性方程组的复杂程度不同，这个过程经历几百次的迭代都是有可能的。所以，迭代法的目标就是**比消元法更快速地逼近真实解**。

那么究竟应该如何快速地逼近真实解呢？

这里，$A=S-T$，$A$的分解成了关键，也就是说$A$的分解目标是**每步的运算速度和收敛速度都要快**。每步的运算速度取决于$S$，而收敛速度取决于“错误”(error)，$e_{k}$，这里的错误 $e_{k}$是$x-x_{k}$，也就是说$x$和$x_{k}$的差应该快速逼近0，我们把错误表示成这样：$e_{k+1}=S^{-1}Te_{k}$（等式③）。

它是等式②和①差后得出的结果，迭代的每一步里，错误都会被$S^{-1}T$乘，如果$S^{-1}T$越小，那逼近0的速度就更快。在极端分解情况下，$S=A$，$T=0$，那$Ax=b$又回来了，第一次迭代就能完成收敛，其中$S^{-1}T$等于0。

但是，这一次迭代的成本太高，我们回到了非迭代方式的原点。所以，你也知道，鱼和熊掌不能兼得，$S$的选择成为了关键。那我们要如何在每一次迭代的速度和快速收敛之间做出平衡呢？我给你$S$选择的几种常见方法：

1. 雅可比方法（Jacobi method）：$S$取$A$的对角部分。
2. 高斯-赛德尔方法（Gauss-Seidel）：$S$取$A$的下三角部分，包含对角。
3. ILU方法（Incomplete LU）：$S=L$估计乘$U$估计。

## 雅可比方法实践

总体介绍了迭代法理论之后，我们就进入迭代法运用的实践环节。

首先，我们先来试试使用雅可比方法解线性方程组，雅克比迭代法是众多迭代法中比较早且较简单的一种。所以，作为迭代法的实践开篇比较合适。让我们设一个2×2的线性方程组：

$$
Ax=b
$$

$$
\left\{\begin{array}{c}
2 u-v=4 \\\
-u+2 v=-2
\end{array}\right.
$$

我们很容易就能得出这个方程组的解如下。

$$
\left[\begin{array}{l}
u \\\
v
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{l}
2 \\\
0
\end{array}\right]
$$

现在我们就用雅可比方法来看看怎么解这个方程组：

首先，我们把线性方程组转换成矩阵形式。

$$

\left[\begin{array}{cc}
2 & -1 \\\
-1 & 2
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
4 \\\
-2
\end{array}\right]
$$

接着，把A的对角线放在等式左边，得出$S$矩阵。

$$
S=\left[\begin{array}{ll}
2 & 0 \\\
0 & 2
\end{array}\right]
$$

其余部分移到等式右边，得出$T$矩阵。

$$
T=\left[\begin{array}{ll}
0 & 1 \\\
1 & 0
\end{array}\right]
$$

于是，雅可比迭代就可以表示成下面这样的形式。

$$
\mathrm{S} x_{k+1}=T x_{k}+\mathrm{b}
$$

$$
\left\{\begin{array}{l}
2 u_{k+1}=v_{k}+4 \\\
2 v_{k+1}=u_{k}-2
\end{array}\right.
$$

现在是时候进行迭代了，我们从$u_{0}=v_{0}=0$开始。

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{0} \\\
v_{0}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{l}
0 \\\
0
\end{array}\right]
$$

第一次迭代后，我们得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{1} \\\
v_{1}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
2 \\\
-1
\end{array}\right]
$$

第二次迭代后得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{2} \\\
v_{2}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{l}
\frac{3}{2} \\\
0
\end{array}\right]
$$

第三次迭代后得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{3} \\\
v_{3}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
2 \\\
-\frac{1}{4}
\end{array}\right]
$$

第四次迭代后得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{4} \\\
v_{4}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{l}
\frac{15}{8} \\\
0
\end{array}\right]
$$

第五次迭代后，我们得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{5} \\\
v_{5}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
2 \\\

-\frac{1}{16}
\end{array}\right]
$$

经过五次迭代后发现收敛，因为它的结果接近真实解。

$$
真实解
\left[\begin{array}{l}
2 \\\
0
\end{array}\right]
$$

现在，再来看一下错误等式，$\mathrm{Se}_{k+1}=T e_{k}$，我们把$S$和$T$代入等式，得出：

$$
\left[\begin{array}{ll}
2 & 0 \\\
0 & 2
\end{array}\right] e_{k+1}=\left[\begin{array}{ll}
0 & 1 \\\
1 & 0
\end{array}\right] e_{k}
$$

计算$S$的逆矩阵和$T$相乘$S^{-1}T$得出：

$$
e_{k+1}=\left[\begin{array}{cc}
0 & \frac{1}{2} \\\
\frac{1}{2} & 0
\end{array}\right] e_{k}
$$

这里，$S$的逆矩阵和T相乘$S^{-1}T$有特征值$\frac{1}{2}$和$-\frac{1}{2}$，所以，它的谱半径是$\rho(B)=\frac{1}{2}$。这里的**谱半径**是用来控制收敛的，所以非常重要。谱半径从数学定义上是：矩阵（或者有界线性算子的谱半径）是指其特征值绝对值集合的上确界。这个概念是不是很难理解？具体谱半径的概念你可以查互联网来获取，为了方便你理解，这里我还是用数学方法来简单表达一下。

$$
B=S^{-1} T=\left[\begin{array}{ll}
0 & \frac{1}{2} \\\
\frac{1}{2} & 0
\end{array}\right]
$$

通过$S$的逆矩阵和$T$相乘$S^{-1}T$，我们得到：$|\lambda|_{\max }=\frac{1}{2}$，以及：

$$
\left[\begin{array}{cc}
0 & \frac{1}{2} \\\
\frac{1}{2} & 0
\end{array}\right]^{2}=\left[\begin{array}{cc}
\frac{1}{4} & 0 \\\
0 & \frac{1}{4}
\end{array}\right]
$$

这里的特征值$\frac{1}{2}$非常小，所以10次迭代后，错误就很低了，即$\frac{1^{10}}{2}=\frac{1}{1024}$。而如果特征值是0.99或者0.999，那很显然迭代次数就要多得多，也就是说需要更多时间来做运算。

## 高斯-赛德尔方法实践

现在我们再来看下高斯-赛德尔方法，高斯-赛德尔迭代可以**节约存储**和**加速迭代**，每迭代一次只需一组存储单元，而雅可比迭代需要两组单元。

$S$取$A$的下三角部分，还是使用之前雅可比方法中的例子，我们得出方程组：

$$
\left\{\begin{array}{c}
u_{k+1}=\frac{1}{2} v_{k}+2 \\\
v_{k+1}=\frac{1}{2} u_{k+1}-1
\end{array}\right.
$$

这里有一个比较大的变化，那就是$u_{k}$消失了，通过$v_{k}$，我们可以直接得到$u_{k+1}$和$v_{k+1}$，这样有什么好处呢？两大好处是显而易见的，就是**节约存储**和**加速迭代**。

接下来，我们从$u_{0}=0$，$v_{0}=-1$来测试一下迭代。

第一次迭代后，我们得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{1} \\\
v_{1}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
\frac{3}{2} \\\
\frac{-1}{4}
\end{array}\right]
$$

第二次迭代后得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{2} \\\
v_{2}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{l}
\frac{15}{8} \\\
\frac{-1}{16}
\end{array}\right]
$$

第三次迭代后得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{3} \\\
v_{3}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{r}

\frac{63}{32} \\\
-\frac{1}{64}
\end{array}\right]
$$

经过三次迭代后发现收敛，因为第三次迭代后的结果接近真实解。

错误经过计算分别是$-1, \frac{-1}{4}, \frac{-1}{16}, \frac{-1}{64}$，和刚才使用雅可比方法得出的错误$2, \frac{1}{2}, \frac{1}{8}, \frac{1}{32}$。比较后我们可以发现，无论是迭代次数还是收敛速度方面，高斯-赛德尔方法比雅可比方法速度快、精确度也高得多。

## 逐次超松弛方法

最后，我们在高斯-赛德尔方法上做个小调整，在迭代中引入一个参数“omega”，$ω$，即超松弛因子。然后选择一个合适的$ω$，使得$S^{-1}T$的谱半径尽可能小，这个方法就叫做逐次超松弛方法（Successive over-relaxation method，简称SOR）。

SOR方法的方程是：$ωAx=ωb$，矩阵$S$有$A$的对角线，对角线下是$ωA$，等式右边$T$是$S-ωA$，于是，我们还是使用之前雅可比方法中的例子，得到SOR方程组如下。

$$\left\{\begin{array}{c}
2 u_{k+1}=(2-2 \omega) u_{k}+\omega v_{k}+4 \omega \\\
-\omega u_{k+1}+2 v_{k+1}=(2-2 \omega) v_{k}-2 \omega
\end{array}\right.$$

是不是看起来更复杂了？

没关系，其实它只是在我们眼中看起来复杂，对计算机来说是没区别的。对SOR来说，只是多了一个$ω$，而$ω$选择越好就越快。具体$ω$的选择，以及迭代的过程就不赘述了，我给你一个小提示，你可以在“$ω$大于1”和“$ω$小于1”两种情况下来多选择几个$ω$进行尝试，最后你应该会得到结论：

1. 在$ω$大于1时，$ω$越大，迭代的次数就越多，收敛速度就越慢，$ω$接近1时，迭代的次数越小，收敛速度越快。
2. 在$ω$小于1时，$ω$越小，迭代的次数就越多，收敛速度就越慢，$ω$接近1时，迭代的次数越小，收敛速度越快。

所以，SOR迭代法的关键就是$ω$的选择，它可以被看作是高斯-赛德尔法的扩充。

雅可比法、高斯-赛德尔法，以及SOR迭代法都是定常迭代法。接下来我讲一下和定常迭代法不同的另一类方法，也是实践中用的比较多的方法——**共轭梯度法**（Conjugate gradient），它属于Krylov子空间方法。简单来说，Krylov子空间方法是一种 “降维打击” 手段，是一种牺牲精度换取速度的方法。

## 共轭梯度法

要讲共轭梯度法，我们要先解释一下“共轭”，共轭就是按一定的规律相配的一对，通俗点说就是孪生。“轭”是牛拉车用的木头，那什么是共轭关系呢？同时拉一辆车的两头牛，就是共轭关系。

我们根据这个定义再来解释一下共轭方向，向量$p, q \in R$， 若满足条件$pAq=0$， 则称$p$和$q$关于$A$是共轭方向，或者$p$和$q$关于$A$共轭。有了共轭和共轭方向的概念后，再来看共轭梯度法就简单多了。共轭梯度法的出现不仅是为了解决梯度下降法的收敛速度慢，而且也避免了牛顿法需要存储和计算黑塞矩阵（Hessian Matrix）并求逆的缺点。

现在来看看共轭梯度算法，设$Ax=b$，其中$A$是一个实对称正定矩阵。

首先，我们设初始值$x_{0}$为$0$或者一个估计值，来计算$r_{0}:=b-A x_{0}$。如果$r_{0}$非常小，那$x_{0}$就是结果，如果不是就继续。

接下来设$p_{0}:=r_{0}$，$k:=0$。现在我们开始迭代循环。

a.计算$\alpha_{k}$ 。

$$\alpha_{k}:=\frac{r_{k}^{T} r_{k}}{p_{k}^{T} A p_{k}}$$

b.计算$x_{k+1}$ 。

$$x_{k+1}:=x_{k}+\alpha_{k} p_{k}$$

c.计算$r_{k+1}$。

$$r_{k+1}:=r_{k}-\alpha_{k} A p_{k}$$

d.如果$r_{k+1}$非常小，循环结束，如果不是就继续。

e.计算$β_{k}$ 。

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

f.计算$p_{k+1}$ 。

$$p_{k+1}:=r_{k+1}+\beta_{k} p_{k}$$

g.$k:=k+1$。

4. 返回结果$x_{k+1}$。

从算法中我们可以看出，共轭梯度法的优点是**存储量小**和**具有步收敛性**。如果你熟悉MATLAB，就会发现共轭梯度法的实现超级简单，只需要短短十几行代码（下方代码来自于MATLAB/GNU Octave的

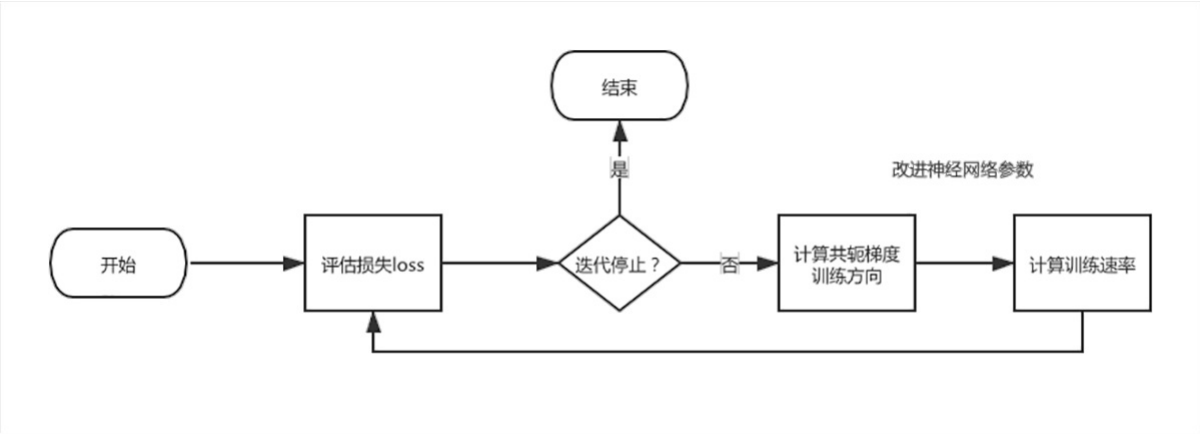
例子）。

```
function x = conjgrad(A, b, x)
    r = b - A * x;
    p = r;
    rsold = r' * r;


    for i = 1:length(b)
        Ap = A * p;
        alpha = rsold / (p' * Ap);
        x = x + alpha * p;
        r = r - alpha * Ap;
        rsnew = r' * r;
        if sqrt(rsnew) < 1e-10
              break;
        end
        p = r + (rsnew / rsold) * p;
        rsold = rsnew;
    end
end
```

## 机器学习中的共轭梯度

共轭梯度法经常被用在训练神经网络中，在实践中已经证明，它是比**梯度下降**更有效的方法，因为就像刚才讲的，它不需要计算黑塞矩阵。那我现在就来讲一讲，使用共轭梯度法的神经网络训练过程。




在整个训练过程中，**参数改进**是重点，当然这也是所有神经网络训练的重点。这个过程是通过计算共轭梯度的训练方向，然后计算训练速率来实现的。在共轭梯度训练算法中，搜索是按共轭方向进行的，也就是说，训练方向是共轭的。所以，收敛速度比梯度下降要快。

现在我们来看训练方向的计算方法。首先，我们设置训练方向向量为$d$，然后，定义一个初始参数向量$w^{0}$，以及一个初始训练方向向量$d^{0}=-g^{0}$，于是，共轭梯度法构造出的训练方向可以表示成：$d^{i+1}=g^{i+1}+d^{i} \cdot \gamma^{i}$。

其中，$g$是梯度向量，$\gamma$是共轭参数。参数通过这个表达式来更新和优化。通常训练速率$\eta$可使用单变量函数优化方法求得。

$$w^{i+1}=w^{i}+d^{i} \cdot \eta^{i}$$

## 本节小结

好了，到这里数值线性代数的迭代法这一讲就结束了，最后我再总结一下前面讲解的内容。

首先，我先解释了数值线性代数，接着再整体讲解了迭代方法。然后，举了一个线性方程组的例子，运用迭代法中的几个比较著名的实践方法：雅可比方法、高斯-赛德尔方法，以及逐次超松弛方法，来解这个线性方程组。最后，我把共轭梯度法用在了深度学习的神经网络训练中。

希望你能在了解了数值线性代数，以及迭代法后，更多地在计算机科学领域中，运用迭代法做矩阵运算。如果有兴趣，你也可以学习其它在实践中使用的迭代法。

## 线性代数练习场

练习时刻到了，这次继续使用第一篇线性方程组里的例子，你可以挑选任意一个迭代法来求解这个线性方程组。

假设，一个旅游团由孩子和大人组成，去程时他们一起坐大巴，每个孩子的票价3元，大人票价3.2元，总共花费118.4元。回程时一起做火车，每个孩子的票价3.5元，大人票价3.6元，总共花费135.2元。请问这个旅游团中有多少孩子和大人？

设小孩人数为$x_{1}$，大人人数为$x_{2}$，于是我们得到了一个方程组：

$$\left\{\begin{array}{c}
3 x_{1}+3.2 x_{2}=118.4 \\\
3.5 x_{1}+3.6 x_{2}=135.2
\end{array}\right.$$

这个方程组的解是：

$$\left\{\begin{array}{l}
x_{1}=16 \\\
x_{2}=22
\end{array}\right.$$

你可以计算一下多少次迭代后它能收敛，也就是逼近真实解？以及它的错误$e$又分别是多少？

欢迎在留言区晒出的你的运算过程和结果。如果有收获，也欢迎你把这篇文章分享给你的朋友。

你好，我是朱维刚。欢迎你继续跟我学习线性代数，今天我要讲的内容是“数值线性代数的迭代法，以及如何在实践中运用迭代法求解线性方程组”。

大密度线性方程组的计算已经成为了世界上最快计算机的测试标准。2008年，IBM为美国能源部Los Alamos国家实验室建造了“Roadrunner”计算机系统，它的运算速度达到了1.026 petaflop/s（千万亿次/秒，petaflop是衡量计算机性能的一个重要单位，1 petaflop等于每秒钟进行1千万亿次的数学运算）。按摩尔定律计算，现在世界上最快的计算机已经达到了200 petaflop，我国也早就进入了世界前列，并有望实现1 exaflop/s（百亿亿次/秒），成为世界第一。


可能你会有些疑惑，为什么我要在课程后期来讲数值线性代数呢？

那是因为数值线性代数是一门特殊的学科，是特别为计算机上进行线性代数计算服务的，可以说它是研究矩阵运算算法的学科，偏向算法实践与工程设计。有了之前基础知识的铺垫后，学习数值线性代数会更有效，而且它是可以直接运用在计算机科学中的，比如：在图像压缩中，使用奇异值分解（SVD）来节省内存；在深度学习中，使用共轭梯度来加速神经网络的收敛。

## 迭代方法说明

课程内容的前期一直都在用**直接法**来解线性方程组，比如高斯消元法。但在实践中，我们在面对复杂场景时，更多的会使用**迭代法**来求解（也就是所谓的间接法），因为很多场景会用到大型稀疏矩阵。所以，我打算在这里讲讲机器学习中的迭代法应用。这里需要注意，不是说直接法不重要，直接法解决了许多相对简单的问题，也是其他方法的基础。

现在我就来说一说什么是迭代法？

我们还是通过线性方程组$Ax=b$来看看。在这里我们分解$A$，使得$A=S-T$，代入等式后得出：$Sx=Tx+b$（等式①）。

按这样的方式持续下去，通过迭代的方式来解$Sx$。这就类似于把复杂问题层层分解和简化，最终使得这个迭代等式成立：$Sx_{k+1}=Tx_{k}+b$（等式②）。

更具体一点来说，我们其实是从$x_{0}$开始，解$Sx_{1}=Tx_{0}+b$。然后，继续解$Sx_{2}=Tx_{1}+b$。一直到$x_{k+1}$非常接近$x_{k}$时，又或者说残余值$r_{k}=b-Ax_{k}$接近$0$时，迭代停止。由于线性方程组的复杂程度不同，这个过程经历几百次的迭代都是有可能的。所以，迭代法的目标就是**比消元法更快速地逼近真实解**。

那么究竟应该如何快速地逼近真实解呢？

这里，$A=S-T$，$A$的分解成了关键，也就是说$A$的分解目标是**每步的运算速度和收敛速度都要快**。每步的运算速度取决于$S$，而收敛速度取决于“错误”(error)，$e_{k}$，这里的错误 $e_{k}$是$x-x_{k}$，也就是说$x$和$x_{k}$的差应该快速逼近0，我们把错误表示成这样：$e_{k+1}=S^{-1}Te_{k}$（等式③）。

它是等式②和①差后得出的结果，迭代的每一步里，错误都会被$S^{-1}T$乘，如果$S^{-1}T$越小，那逼近0的速度就更快。在极端分解情况下，$S=A$，$T=0$，那$Ax=b$又回来了，第一次迭代就能完成收敛，其中$S^{-1}T$等于0。

但是，这一次迭代的成本太高，我们回到了非迭代方式的原点。所以，你也知道，鱼和熊掌不能兼得，$S$的选择成为了关键。那我们要如何在每一次迭代的速度和快速收敛之间做出平衡呢？我给你$S$选择的几种常见方法：

1. 雅可比方法（Jacobi method）：$S$取$A$的对角部分。
2. 高斯-赛德尔方法（Gauss-Seidel）：$S$取$A$的下三角部分，包含对角。
3. ILU方法（Incomplete LU）：$S=L$估计乘$U$估计。

## 雅可比方法实践

总体介绍了迭代法理论之后，我们就进入迭代法运用的实践环节。

首先，我们先来试试使用雅可比方法解线性方程组，雅克比迭代法是众多迭代法中比较早且较简单的一种。所以，作为迭代法的实践开篇比较合适。让我们设一个2×2的线性方程组：

$$
Ax=b
$$

$$
\left\{\begin{array}{c}
2 u-v=4 \\\
-u+2 v=-2
\end{array}\right.
$$

我们很容易就能得出这个方程组的解如下。

$$
\left[\begin{array}{l}
u \\\
v
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{l}
2 \\\
0
\end{array}\right]
$$

现在我们就用雅可比方法来看看怎么解这个方程组：

首先，我们把线性方程组转换成矩阵形式。

$$

\left[\begin{array}{cc}
2 & -1 \\\
-1 & 2
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
4 \\\
-2
\end{array}\right]
$$

接着，把A的对角线放在等式左边，得出$S$矩阵。

$$
S=\left[\begin{array}{ll}
2 & 0 \\\
0 & 2
\end{array}\right]
$$

其余部分移到等式右边，得出$T$矩阵。

$$
T=\left[\begin{array}{ll}
0 & 1 \\\
1 & 0
\end{array}\right]
$$

于是，雅可比迭代就可以表示成下面这样的形式。

$$
\mathrm{S} x_{k+1}=T x_{k}+\mathrm{b}
$$

$$
\left\{\begin{array}{l}
2 u_{k+1}=v_{k}+4 \\\
2 v_{k+1}=u_{k}-2
\end{array}\right.
$$

现在是时候进行迭代了，我们从$u_{0}=v_{0}=0$开始。

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{0} \\\
v_{0}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{l}
0 \\\
0
\end{array}\right]
$$

第一次迭代后，我们得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{1} \\\
v_{1}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
2 \\\
-1
\end{array}\right]
$$

第二次迭代后得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{2} \\\
v_{2}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{l}
\frac{3}{2} \\\
0
\end{array}\right]
$$

第三次迭代后得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{3} \\\
v_{3}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
2 \\\
-\frac{1}{4}
\end{array}\right]
$$

第四次迭代后得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{4} \\\
v_{4}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{l}
\frac{15}{8} \\\
0
\end{array}\right]
$$

第五次迭代后，我们得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{5} \\\
v_{5}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
2 \\\

-\frac{1}{16}
\end{array}\right]
$$

经过五次迭代后发现收敛，因为它的结果接近真实解。

$$
真实解
\left[\begin{array}{l}
2 \\\
0
\end{array}\right]
$$

现在，再来看一下错误等式，$\mathrm{Se}_{k+1}=T e_{k}$，我们把$S$和$T$代入等式，得出：

$$
\left[\begin{array}{ll}
2 & 0 \\\
0 & 2
\end{array}\right] e_{k+1}=\left[\begin{array}{ll}
0 & 1 \\\
1 & 0
\end{array}\right] e_{k}
$$

计算$S$的逆矩阵和$T$相乘$S^{-1}T$得出：

$$
e_{k+1}=\left[\begin{array}{cc}
0 & \frac{1}{2} \\\
\frac{1}{2} & 0
\end{array}\right] e_{k}
$$

这里，$S$的逆矩阵和T相乘$S^{-1}T$有特征值$\frac{1}{2}$和$-\frac{1}{2}$，所以，它的谱半径是$\rho(B)=\frac{1}{2}$。这里的**谱半径**是用来控制收敛的，所以非常重要。谱半径从数学定义上是：矩阵（或者有界线性算子的谱半径）是指其特征值绝对值集合的上确界。这个概念是不是很难理解？具体谱半径的概念你可以查互联网来获取，为了方便你理解，这里我还是用数学方法来简单表达一下。

$$
B=S^{-1} T=\left[\begin{array}{ll}
0 & \frac{1}{2} \\\
\frac{1}{2} & 0
\end{array}\right]
$$

通过$S$的逆矩阵和$T$相乘$S^{-1}T$，我们得到：$|\lambda|_{\max }=\frac{1}{2}$，以及：

$$
\left[\begin{array}{cc}
0 & \frac{1}{2} \\\
\frac{1}{2} & 0
\end{array}\right]^{2}=\left[\begin{array}{cc}
\frac{1}{4} & 0 \\\
0 & \frac{1}{4}
\end{array}\right]
$$

这里的特征值$\frac{1}{2}$非常小，所以10次迭代后，错误就很低了，即$\frac{1^{10}}{2}=\frac{1}{1024}$。而如果特征值是0.99或者0.999，那很显然迭代次数就要多得多，也就是说需要更多时间来做运算。

## 高斯-赛德尔方法实践

现在我们再来看下高斯-赛德尔方法，高斯-赛德尔迭代可以**节约存储**和**加速迭代**，每迭代一次只需一组存储单元，而雅可比迭代需要两组单元。

$S$取$A$的下三角部分，还是使用之前雅可比方法中的例子，我们得出方程组：

$$
\left\{\begin{array}{c}
u_{k+1}=\frac{1}{2} v_{k}+2 \\\
v_{k+1}=\frac{1}{2} u_{k+1}-1
\end{array}\right.
$$

这里有一个比较大的变化，那就是$u_{k}$消失了，通过$v_{k}$，我们可以直接得到$u_{k+1}$和$v_{k+1}$，这样有什么好处呢？两大好处是显而易见的，就是**节约存储**和**加速迭代**。

接下来，我们从$u_{0}=0$，$v_{0}=-1$来测试一下迭代。

第一次迭代后，我们得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{1} \\\
v_{1}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
\frac{3}{2} \\\
\frac{-1}{4}
\end{array}\right]
$$

第二次迭代后得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{2} \\\
v_{2}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{l}
\frac{15}{8} \\\
\frac{-1}{16}
\end{array}\right]
$$

第三次迭代后得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{3} \\\
v_{3}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{r}

\frac{63}{32} \\\
-\frac{1}{64}
\end{array}\right]
$$

经过三次迭代后发现收敛，因为第三次迭代后的结果接近真实解。

错误经过计算分别是$-1, \frac{-1}{4}, \frac{-1}{16}, \frac{-1}{64}$，和刚才使用雅可比方法得出的错误$2, \frac{1}{2}, \frac{1}{8}, \frac{1}{32}$。比较后我们可以发现，无论是迭代次数还是收敛速度方面，高斯-赛德尔方法比雅可比方法速度快、精确度也高得多。

## 逐次超松弛方法

最后，我们在高斯-赛德尔方法上做个小调整，在迭代中引入一个参数“omega”，$ω$，即超松弛因子。然后选择一个合适的$ω$，使得$S^{-1}T$的谱半径尽可能小，这个方法就叫做逐次超松弛方法（Successive over-relaxation method，简称SOR）。

SOR方法的方程是：$ωAx=ωb$，矩阵$S$有$A$的对角线，对角线下是$ωA$，等式右边$T$是$S-ωA$，于是，我们还是使用之前雅可比方法中的例子，得到SOR方程组如下。

$$\left\{\begin{array}{c}
2 u_{k+1}=(2-2 \omega) u_{k}+\omega v_{k}+4 \omega \\\
-\omega u_{k+1}+2 v_{k+1}=(2-2 \omega) v_{k}-2 \omega
\end{array}\right.$$

是不是看起来更复杂了？

没关系，其实它只是在我们眼中看起来复杂，对计算机来说是没区别的。对SOR来说，只是多了一个$ω$，而$ω$选择越好就越快。具体$ω$的选择，以及迭代的过程就不赘述了，我给你一个小提示，你可以在“$ω$大于1”和“$ω$小于1”两种情况下来多选择几个$ω$进行尝试，最后你应该会得到结论：

1. 在$ω$大于1时，$ω$越大，迭代的次数就越多，收敛速度就越慢，$ω$接近1时，迭代的次数越小，收敛速度越快。
2. 在$ω$小于1时，$ω$越小，迭代的次数就越多，收敛速度就越慢，$ω$接近1时，迭代的次数越小，收敛速度越快。

所以，SOR迭代法的关键就是$ω$的选择，它可以被看作是高斯-赛德尔法的扩充。

雅可比法、高斯-赛德尔法，以及SOR迭代法都是定常迭代法。接下来我讲一下和定常迭代法不同的另一类方法，也是实践中用的比较多的方法——**共轭梯度法**（Conjugate gradient），它属于Krylov子空间方法。简单来说，Krylov子空间方法是一种 “降维打击” 手段，是一种牺牲精度换取速度的方法。

## 共轭梯度法

要讲共轭梯度法，我们要先解释一下“共轭”，共轭就是按一定的规律相配的一对，通俗点说就是孪生。“轭”是牛拉车用的木头，那什么是共轭关系呢？同时拉一辆车的两头牛，就是共轭关系。

我们根据这个定义再来解释一下共轭方向，向量$p, q \in R$， 若满足条件$pAq=0$， 则称$p$和$q$关于$A$是共轭方向，或者$p$和$q$关于$A$共轭。有了共轭和共轭方向的概念后，再来看共轭梯度法就简单多了。共轭梯度法的出现不仅是为了解决梯度下降法的收敛速度慢，而且也避免了牛顿法需要存储和计算黑塞矩阵（Hessian Matrix）并求逆的缺点。

现在来看看共轭梯度算法，设$Ax=b$，其中$A$是一个实对称正定矩阵。

首先，我们设初始值$x_{0}$为$0$或者一个估计值，来计算$r_{0}:=b-A x_{0}$。如果$r_{0}$非常小，那$x_{0}$就是结果，如果不是就继续。

接下来设$p_{0}:=r_{0}$，$k:=0$。现在我们开始迭代循环。

a.计算$\alpha_{k}$ 。

$$\alpha_{k}:=\frac{r_{k}^{T} r_{k}}{p_{k}^{T} A p_{k}}$$

b.计算$x_{k+1}$ 。

$$x_{k+1}:=x_{k}+\alpha_{k} p_{k}$$

c.计算$r_{k+1}$。

$$r_{k+1}:=r_{k}-\alpha_{k} A p_{k}$$

d.如果$r_{k+1}$非常小，循环结束，如果不是就继续。

e.计算$β_{k}$ 。

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

f.计算$p_{k+1}$ 。

$$p_{k+1}:=r_{k+1}+\beta_{k} p_{k}$$

g.$k:=k+1$。

4. 返回结果$x_{k+1}$。

从算法中我们可以看出，共轭梯度法的优点是**存储量小**和**具有步收敛性**。如果你熟悉MATLAB，就会发现共轭梯度法的实现超级简单，只需要短短十几行代码（下方代码来自于MATLAB/GNU Octave的

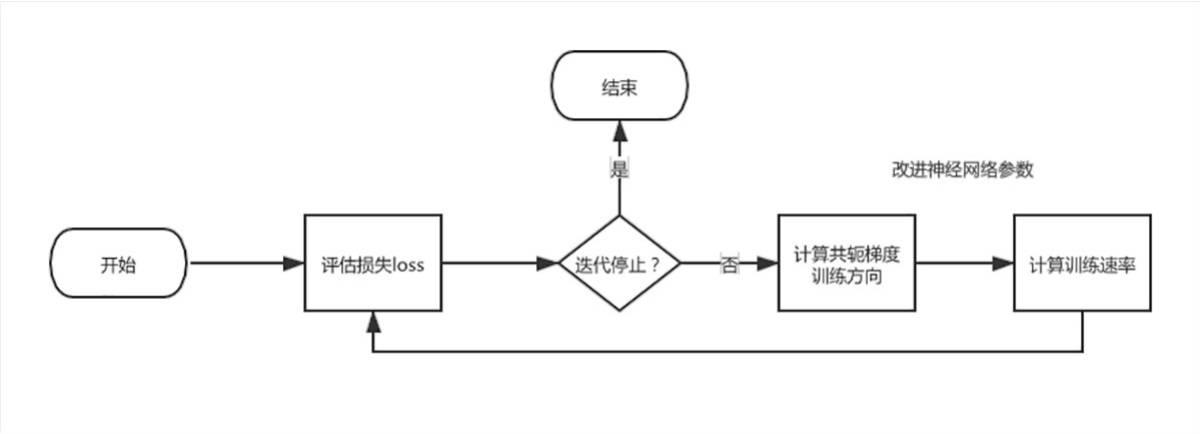
例子）。

```
function x = conjgrad(A, b, x)
    r = b - A * x;
    p = r;
    rsold = r' * r;


    for i = 1:length(b)
        Ap = A * p;
        alpha = rsold / (p' * Ap);
        x = x + alpha * p;
        r = r - alpha * Ap;
        rsnew = r' * r;
        if sqrt(rsnew) < 1e-10
              break;
        end
        p = r + (rsnew / rsold) * p;
        rsold = rsnew;
    end
end
```

## 机器学习中的共轭梯度

共轭梯度法经常被用在训练神经网络中，在实践中已经证明，它是比**梯度下降**更有效的方法，因为就像刚才讲的，它不需要计算黑塞矩阵。那我现在就来讲一讲，使用共轭梯度法的神经网络训练过程。




在整个训练过程中，**参数改进**是重点，当然这也是所有神经网络训练的重点。这个过程是通过计算共轭梯度的训练方向，然后计算训练速率来实现的。在共轭梯度训练算法中，搜索是按共轭方向进行的，也就是说，训练方向是共轭的。所以，收敛速度比梯度下降要快。

现在我们来看训练方向的计算方法。首先，我们设置训练方向向量为$d$，然后，定义一个初始参数向量$w^{0}$，以及一个初始训练方向向量$d^{0}=-g^{0}$，于是，共轭梯度法构造出的训练方向可以表示成：$d^{i+1}=g^{i+1}+d^{i} \cdot \gamma^{i}$。

其中，$g$是梯度向量，$\gamma$是共轭参数。参数通过这个表达式来更新和优化。通常训练速率$\eta$可使用单变量函数优化方法求得。

$$w^{i+1}=w^{i}+d^{i} \cdot \eta^{i}$$

## 本节小结

好了，到这里数值线性代数的迭代法这一讲就结束了，最后我再总结一下前面讲解的内容。

首先，我先解释了数值线性代数，接着再整体讲解了迭代方法。然后，举了一个线性方程组的例子，运用迭代法中的几个比较著名的实践方法：雅可比方法、高斯-赛德尔方法，以及逐次超松弛方法，来解这个线性方程组。最后，我把共轭梯度法用在了深度学习的神经网络训练中。

希望你能在了解了数值线性代数，以及迭代法后，更多地在计算机科学领域中，运用迭代法做矩阵运算。如果有兴趣，你也可以学习其它在实践中使用的迭代法。

## 线性代数练习场

练习时刻到了，这次继续使用第一篇线性方程组里的例子，你可以挑选任意一个迭代法来求解这个线性方程组。

假设，一个旅游团由孩子和大人组成，去程时他们一起坐大巴，每个孩子的票价3元，大人票价3.2元，总共花费118.4元。回程时一起做火车，每个孩子的票价3.5元，大人票价3.6元，总共花费135.2元。请问这个旅游团中有多少孩子和大人？

设小孩人数为$x_{1}$，大人人数为$x_{2}$，于是我们得到了一个方程组：

$$\left\{\begin{array}{c}
3 x_{1}+3.2 x_{2}=118.4 \\\
3.5 x_{1}+3.6 x_{2}=135.2
\end{array}\right.$$

这个方程组的解是：

$$\left\{\begin{array}{l}
x_{1}=16 \\\
x_{2}=22
\end{array}\right.$$

你可以计算一下多少次迭代后它能收敛，也就是逼近真实解？以及它的错误$e$又分别是多少？

欢迎在留言区晒出的你的运算过程和结果。如果有收获，也欢迎你把这篇文章分享给你的朋友。

你好，我是朱维刚。欢迎你继续跟我学习线性代数，今天我要讲的内容是“数值线性代数的迭代法，以及如何在实践中运用迭代法求解线性方程组”。

大密度线性方程组的计算已经成为了世界上最快计算机的测试标准。2008年，IBM为美国能源部Los Alamos国家实验室建造了“Roadrunner”计算机系统，它的运算速度达到了1.026 petaflop/s（千万亿次/秒，petaflop是衡量计算机性能的一个重要单位，1 petaflop等于每秒钟进行1千万亿次的数学运算）。按摩尔定律计算，现在世界上最快的计算机已经达到了200 petaflop，我国也早就进入了世界前列，并有望实现1 exaflop/s（百亿亿次/秒），成为世界第一。


可能你会有些疑惑，为什么我要在课程后期来讲数值线性代数呢？

那是因为数值线性代数是一门特殊的学科，是特别为计算机上进行线性代数计算服务的，可以说它是研究矩阵运算算法的学科，偏向算法实践与工程设计。有了之前基础知识的铺垫后，学习数值线性代数会更有效，而且它是可以直接运用在计算机科学中的，比如：在图像压缩中，使用奇异值分解（SVD）来节省内存；在深度学习中，使用共轭梯度来加速神经网络的收敛。

## 迭代方法说明

课程内容的前期一直都在用**直接法**来解线性方程组，比如高斯消元法。但在实践中，我们在面对复杂场景时，更多的会使用**迭代法**来求解（也就是所谓的间接法），因为很多场景会用到大型稀疏矩阵。所以，我打算在这里讲讲机器学习中的迭代法应用。这里需要注意，不是说直接法不重要，直接法解决了许多相对简单的问题，也是其他方法的基础。

现在我就来说一说什么是迭代法？

我们还是通过线性方程组$Ax=b$来看看。在这里我们分解$A$，使得$A=S-T$，代入等式后得出：$Sx=Tx+b$（等式①）。

按这样的方式持续下去，通过迭代的方式来解$Sx$。这就类似于把复杂问题层层分解和简化，最终使得这个迭代等式成立：$Sx_{k+1}=Tx_{k}+b$（等式②）。

更具体一点来说，我们其实是从$x_{0}$开始，解$Sx_{1}=Tx_{0}+b$。然后，继续解$Sx_{2}=Tx_{1}+b$。一直到$x_{k+1}$非常接近$x_{k}$时，又或者说残余值$r_{k}=b-Ax_{k}$接近$0$时，迭代停止。由于线性方程组的复杂程度不同，这个过程经历几百次的迭代都是有可能的。所以，迭代法的目标就是**比消元法更快速地逼近真实解**。

那么究竟应该如何快速地逼近真实解呢？

这里，$A=S-T$，$A$的分解成了关键，也就是说$A$的分解目标是**每步的运算速度和收敛速度都要快**。每步的运算速度取决于$S$，而收敛速度取决于“错误”(error)，$e_{k}$，这里的错误 $e_{k}$是$x-x_{k}$，也就是说$x$和$x_{k}$的差应该快速逼近0，我们把错误表示成这样：$e_{k+1}=S^{-1}Te_{k}$（等式③）。

它是等式②和①差后得出的结果，迭代的每一步里，错误都会被$S^{-1}T$乘，如果$S^{-1}T$越小，那逼近0的速度就更快。在极端分解情况下，$S=A$，$T=0$，那$Ax=b$又回来了，第一次迭代就能完成收敛，其中$S^{-1}T$等于0。

但是，这一次迭代的成本太高，我们回到了非迭代方式的原点。所以，你也知道，鱼和熊掌不能兼得，$S$的选择成为了关键。那我们要如何在每一次迭代的速度和快速收敛之间做出平衡呢？我给你$S$选择的几种常见方法：

1. 雅可比方法（Jacobi method）：$S$取$A$的对角部分。
2. 高斯-赛德尔方法（Gauss-Seidel）：$S$取$A$的下三角部分，包含对角。
3. ILU方法（Incomplete LU）：$S=L$估计乘$U$估计。

## 雅可比方法实践

总体介绍了迭代法理论之后，我们就进入迭代法运用的实践环节。

首先，我们先来试试使用雅可比方法解线性方程组，雅克比迭代法是众多迭代法中比较早且较简单的一种。所以，作为迭代法的实践开篇比较合适。让我们设一个2×2的线性方程组：

$$
Ax=b
$$

$$
\left\{\begin{array}{c}
2 u-v=4 \\\
-u+2 v=-2
\end{array}\right.
$$

我们很容易就能得出这个方程组的解如下。

$$
\left[\begin{array}{l}
u \\\
v
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{l}
2 \\\
0
\end{array}\right]
$$

现在我们就用雅可比方法来看看怎么解这个方程组：

首先，我们把线性方程组转换成矩阵形式。

$$

\left[\begin{array}{cc}
2 & -1 \\\
-1 & 2
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
4 \\\
-2
\end{array}\right]
$$

接着，把A的对角线放在等式左边，得出$S$矩阵。

$$
S=\left[\begin{array}{ll}
2 & 0 \\\
0 & 2
\end{array}\right]
$$

其余部分移到等式右边，得出$T$矩阵。

$$
T=\left[\begin{array}{ll}
0 & 1 \\\
1 & 0
\end{array}\right]
$$

于是，雅可比迭代就可以表示成下面这样的形式。

$$
\mathrm{S} x_{k+1}=T x_{k}+\mathrm{b}
$$

$$
\left\{\begin{array}{l}
2 u_{k+1}=v_{k}+4 \\\
2 v_{k+1}=u_{k}-2
\end{array}\right.
$$

现在是时候进行迭代了，我们从$u_{0}=v_{0}=0$开始。

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{0} \\\
v_{0}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{l}
0 \\\
0
\end{array}\right]
$$

第一次迭代后，我们得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{1} \\\
v_{1}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
2 \\\
-1
\end{array}\right]
$$

第二次迭代后得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{2} \\\
v_{2}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{l}
\frac{3}{2} \\\
0
\end{array}\right]
$$

第三次迭代后得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{3} \\\
v_{3}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
2 \\\
-\frac{1}{4}
\end{array}\right]
$$

第四次迭代后得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{4} \\\
v_{4}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{l}
\frac{15}{8} \\\
0
\end{array}\right]
$$

第五次迭代后，我们得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{5} \\\
v_{5}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
2 \\\

-\frac{1}{16}
\end{array}\right]
$$

经过五次迭代后发现收敛，因为它的结果接近真实解。

$$
真实解
\left[\begin{array}{l}
2 \\\
0
\end{array}\right]
$$

现在，再来看一下错误等式，$\mathrm{Se}_{k+1}=T e_{k}$，我们把$S$和$T$代入等式，得出：

$$
\left[\begin{array}{ll}
2 & 0 \\\
0 & 2
\end{array}\right] e_{k+1}=\left[\begin{array}{ll}
0 & 1 \\\
1 & 0
\end{array}\right] e_{k}
$$

计算$S$的逆矩阵和$T$相乘$S^{-1}T$得出：

$$
e_{k+1}=\left[\begin{array}{cc}
0 & \frac{1}{2} \\\
\frac{1}{2} & 0
\end{array}\right] e_{k}
$$

这里，$S$的逆矩阵和T相乘$S^{-1}T$有特征值$\frac{1}{2}$和$-\frac{1}{2}$，所以，它的谱半径是$\rho(B)=\frac{1}{2}$。这里的**谱半径**是用来控制收敛的，所以非常重要。谱半径从数学定义上是：矩阵（或者有界线性算子的谱半径）是指其特征值绝对值集合的上确界。这个概念是不是很难理解？具体谱半径的概念你可以查互联网来获取，为了方便你理解，这里我还是用数学方法来简单表达一下。

$$
B=S^{-1} T=\left[\begin{array}{ll}
0 & \frac{1}{2} \\\
\frac{1}{2} & 0
\end{array}\right]
$$

通过$S$的逆矩阵和$T$相乘$S^{-1}T$，我们得到：$|\lambda|_{\max }=\frac{1}{2}$，以及：

$$
\left[\begin{array}{cc}
0 & \frac{1}{2} \\\
\frac{1}{2} & 0
\end{array}\right]^{2}=\left[\begin{array}{cc}
\frac{1}{4} & 0 \\\
0 & \frac{1}{4}
\end{array}\right]
$$

这里的特征值$\frac{1}{2}$非常小，所以10次迭代后，错误就很低了，即$\frac{1^{10}}{2}=\frac{1}{1024}$。而如果特征值是0.99或者0.999，那很显然迭代次数就要多得多，也就是说需要更多时间来做运算。

## 高斯-赛德尔方法实践

现在我们再来看下高斯-赛德尔方法，高斯-赛德尔迭代可以**节约存储**和**加速迭代**，每迭代一次只需一组存储单元，而雅可比迭代需要两组单元。

$S$取$A$的下三角部分，还是使用之前雅可比方法中的例子，我们得出方程组：

$$
\left\{\begin{array}{c}
u_{k+1}=\frac{1}{2} v_{k}+2 \\\
v_{k+1}=\frac{1}{2} u_{k+1}-1
\end{array}\right.
$$

这里有一个比较大的变化，那就是$u_{k}$消失了，通过$v_{k}$，我们可以直接得到$u_{k+1}$和$v_{k+1}$，这样有什么好处呢？两大好处是显而易见的，就是**节约存储**和**加速迭代**。

接下来，我们从$u_{0}=0$，$v_{0}=-1$来测试一下迭代。

第一次迭代后，我们得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{1} \\\
v_{1}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
\frac{3}{2} \\\
\frac{-1}{4}
\end{array}\right]
$$

第二次迭代后得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{2} \\\
v_{2}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{l}
\frac{15}{8} \\\
\frac{-1}{16}
\end{array}\right]
$$

第三次迭代后得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{3} \\\
v_{3}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{r}

\frac{63}{32} \\\
-\frac{1}{64}
\end{array}\right]
$$

经过三次迭代后发现收敛，因为第三次迭代后的结果接近真实解。

错误经过计算分别是$-1, \frac{-1}{4}, \frac{-1}{16}, \frac{-1}{64}$，和刚才使用雅可比方法得出的错误$2, \frac{1}{2}, \frac{1}{8}, \frac{1}{32}$。比较后我们可以发现，无论是迭代次数还是收敛速度方面，高斯-赛德尔方法比雅可比方法速度快、精确度也高得多。

## 逐次超松弛方法

最后，我们在高斯-赛德尔方法上做个小调整，在迭代中引入一个参数“omega”，$ω$，即超松弛因子。然后选择一个合适的$ω$，使得$S^{-1}T$的谱半径尽可能小，这个方法就叫做逐次超松弛方法（Successive over-relaxation method，简称SOR）。

SOR方法的方程是：$ωAx=ωb$，矩阵$S$有$A$的对角线，对角线下是$ωA$，等式右边$T$是$S-ωA$，于是，我们还是使用之前雅可比方法中的例子，得到SOR方程组如下。

$$\left\{\begin{array}{c}
2 u_{k+1}=(2-2 \omega) u_{k}+\omega v_{k}+4 \omega \\\
-\omega u_{k+1}+2 v_{k+1}=(2-2 \omega) v_{k}-2 \omega
\end{array}\right.$$

是不是看起来更复杂了？

没关系，其实它只是在我们眼中看起来复杂，对计算机来说是没区别的。对SOR来说，只是多了一个$ω$，而$ω$选择越好就越快。具体$ω$的选择，以及迭代的过程就不赘述了，我给你一个小提示，你可以在“$ω$大于1”和“$ω$小于1”两种情况下来多选择几个$ω$进行尝试，最后你应该会得到结论：

1. 在$ω$大于1时，$ω$越大，迭代的次数就越多，收敛速度就越慢，$ω$接近1时，迭代的次数越小，收敛速度越快。
2. 在$ω$小于1时，$ω$越小，迭代的次数就越多，收敛速度就越慢，$ω$接近1时，迭代的次数越小，收敛速度越快。

所以，SOR迭代法的关键就是$ω$的选择，它可以被看作是高斯-赛德尔法的扩充。

雅可比法、高斯-赛德尔法，以及SOR迭代法都是定常迭代法。接下来我讲一下和定常迭代法不同的另一类方法，也是实践中用的比较多的方法——**共轭梯度法**（Conjugate gradient），它属于Krylov子空间方法。简单来说，Krylov子空间方法是一种 “降维打击” 手段，是一种牺牲精度换取速度的方法。

## 共轭梯度法

要讲共轭梯度法，我们要先解释一下“共轭”，共轭就是按一定的规律相配的一对，通俗点说就是孪生。“轭”是牛拉车用的木头，那什么是共轭关系呢？同时拉一辆车的两头牛，就是共轭关系。

我们根据这个定义再来解释一下共轭方向，向量$p, q \in R$， 若满足条件$pAq=0$， 则称$p$和$q$关于$A$是共轭方向，或者$p$和$q$关于$A$共轭。有了共轭和共轭方向的概念后，再来看共轭梯度法就简单多了。共轭梯度法的出现不仅是为了解决梯度下降法的收敛速度慢，而且也避免了牛顿法需要存储和计算黑塞矩阵（Hessian Matrix）并求逆的缺点。

现在来看看共轭梯度算法，设$Ax=b$，其中$A$是一个实对称正定矩阵。

首先，我们设初始值$x_{0}$为$0$或者一个估计值，来计算$r_{0}:=b-A x_{0}$。如果$r_{0}$非常小，那$x_{0}$就是结果，如果不是就继续。

接下来设$p_{0}:=r_{0}$，$k:=0$。现在我们开始迭代循环。

a.计算$\alpha_{k}$ 。

$$\alpha_{k}:=\frac{r_{k}^{T} r_{k}}{p_{k}^{T} A p_{k}}$$

b.计算$x_{k+1}$ 。

$$x_{k+1}:=x_{k}+\alpha_{k} p_{k}$$

c.计算$r_{k+1}$。

$$r_{k+1}:=r_{k}-\alpha_{k} A p_{k}$$

d.如果$r_{k+1}$非常小，循环结束，如果不是就继续。

e.计算$β_{k}$ 。

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

f.计算$p_{k+1}$ 。

$$p_{k+1}:=r_{k+1}+\beta_{k} p_{k}$$

g.$k:=k+1$。

4. 返回结果$x_{k+1}$。

从算法中我们可以看出，共轭梯度法的优点是**存储量小**和**具有步收敛性**。如果你熟悉MATLAB，就会发现共轭梯度法的实现超级简单，只需要短短十几行代码（下方代码来自于MATLAB/GNU Octave的

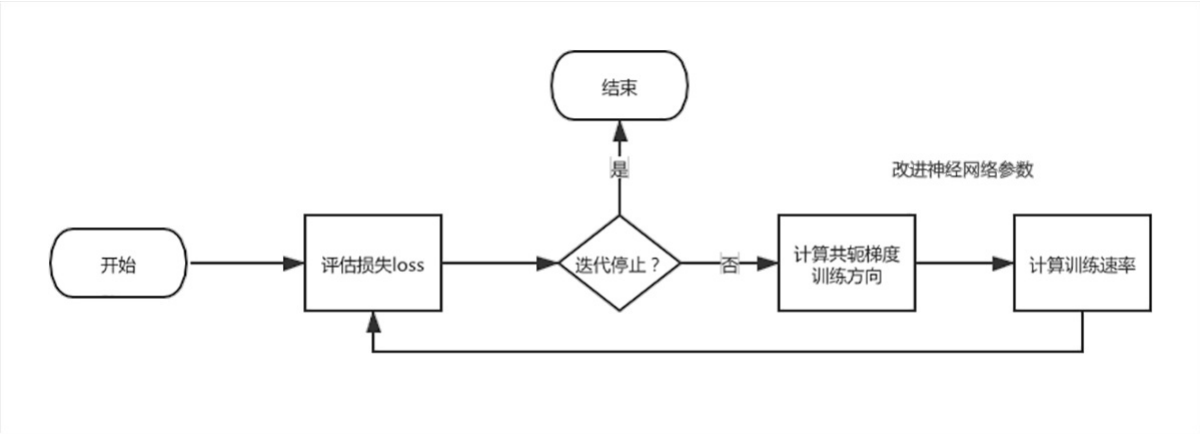
例子）。

```
function x = conjgrad(A, b, x)
    r = b - A * x;
    p = r;
    rsold = r' * r;


    for i = 1:length(b)
        Ap = A * p;
        alpha = rsold / (p' * Ap);
        x = x + alpha * p;
        r = r - alpha * Ap;
        rsnew = r' * r;
        if sqrt(rsnew) < 1e-10
              break;
        end
        p = r + (rsnew / rsold) * p;
        rsold = rsnew;
    end
end
```

## 机器学习中的共轭梯度

共轭梯度法经常被用在训练神经网络中，在实践中已经证明，它是比**梯度下降**更有效的方法，因为就像刚才讲的，它不需要计算黑塞矩阵。那我现在就来讲一讲，使用共轭梯度法的神经网络训练过程。




在整个训练过程中，**参数改进**是重点，当然这也是所有神经网络训练的重点。这个过程是通过计算共轭梯度的训练方向，然后计算训练速率来实现的。在共轭梯度训练算法中，搜索是按共轭方向进行的，也就是说，训练方向是共轭的。所以，收敛速度比梯度下降要快。

现在我们来看训练方向的计算方法。首先，我们设置训练方向向量为$d$，然后，定义一个初始参数向量$w^{0}$，以及一个初始训练方向向量$d^{0}=-g^{0}$，于是，共轭梯度法构造出的训练方向可以表示成：$d^{i+1}=g^{i+1}+d^{i} \cdot \gamma^{i}$。

其中，$g$是梯度向量，$\gamma$是共轭参数。参数通过这个表达式来更新和优化。通常训练速率$\eta$可使用单变量函数优化方法求得。

$$w^{i+1}=w^{i}+d^{i} \cdot \eta^{i}$$

## 本节小结

好了，到这里数值线性代数的迭代法这一讲就结束了，最后我再总结一下前面讲解的内容。

首先，我先解释了数值线性代数，接着再整体讲解了迭代方法。然后，举了一个线性方程组的例子，运用迭代法中的几个比较著名的实践方法：雅可比方法、高斯-赛德尔方法，以及逐次超松弛方法，来解这个线性方程组。最后，我把共轭梯度法用在了深度学习的神经网络训练中。

希望你能在了解了数值线性代数，以及迭代法后，更多地在计算机科学领域中，运用迭代法做矩阵运算。如果有兴趣，你也可以学习其它在实践中使用的迭代法。

## 线性代数练习场

练习时刻到了，这次继续使用第一篇线性方程组里的例子，你可以挑选任意一个迭代法来求解这个线性方程组。

假设，一个旅游团由孩子和大人组成，去程时他们一起坐大巴，每个孩子的票价3元，大人票价3.2元，总共花费118.4元。回程时一起做火车，每个孩子的票价3.5元，大人票价3.6元，总共花费135.2元。请问这个旅游团中有多少孩子和大人？

设小孩人数为$x_{1}$，大人人数为$x_{2}$，于是我们得到了一个方程组：

$$\left\{\begin{array}{c}
3 x_{1}+3.2 x_{2}=118.4 \\\
3.5 x_{1}+3.6 x_{2}=135.2
\end{array}\right.$$

这个方程组的解是：

$$\left\{\begin{array}{l}
x_{1}=16 \\\
x_{2}=22
\end{array}\right.$$

你可以计算一下多少次迭代后它能收敛，也就是逼近真实解？以及它的错误$e$又分别是多少？

欢迎在留言区晒出的你的运算过程和结果。如果有收获，也欢迎你把这篇文章分享给你的朋友。

你好，我是朱维刚。欢迎你继续跟我学习线性代数，今天我要讲的内容是“数值线性代数的迭代法，以及如何在实践中运用迭代法求解线性方程组”。

大密度线性方程组的计算已经成为了世界上最快计算机的测试标准。2008年，IBM为美国能源部Los Alamos国家实验室建造了“Roadrunner”计算机系统，它的运算速度达到了1.026 petaflop/s（千万亿次/秒，petaflop是衡量计算机性能的一个重要单位，1 petaflop等于每秒钟进行1千万亿次的数学运算）。按摩尔定律计算，现在世界上最快的计算机已经达到了200 petaflop，我国也早就进入了世界前列，并有望实现1 exaflop/s（百亿亿次/秒），成为世界第一。


可能你会有些疑惑，为什么我要在课程后期来讲数值线性代数呢？

那是因为数值线性代数是一门特殊的学科，是特别为计算机上进行线性代数计算服务的，可以说它是研究矩阵运算算法的学科，偏向算法实践与工程设计。有了之前基础知识的铺垫后，学习数值线性代数会更有效，而且它是可以直接运用在计算机科学中的，比如：在图像压缩中，使用奇异值分解（SVD）来节省内存；在深度学习中，使用共轭梯度来加速神经网络的收敛。

## 迭代方法说明

课程内容的前期一直都在用**直接法**来解线性方程组，比如高斯消元法。但在实践中，我们在面对复杂场景时，更多的会使用**迭代法**来求解（也就是所谓的间接法），因为很多场景会用到大型稀疏矩阵。所以，我打算在这里讲讲机器学习中的迭代法应用。这里需要注意，不是说直接法不重要，直接法解决了许多相对简单的问题，也是其他方法的基础。

现在我就来说一说什么是迭代法？

我们还是通过线性方程组$Ax=b$来看看。在这里我们分解$A$，使得$A=S-T$，代入等式后得出：$Sx=Tx+b$（等式①）。

按这样的方式持续下去，通过迭代的方式来解$Sx$。这就类似于把复杂问题层层分解和简化，最终使得这个迭代等式成立：$Sx_{k+1}=Tx_{k}+b$（等式②）。

更具体一点来说，我们其实是从$x_{0}$开始，解$Sx_{1}=Tx_{0}+b$。然后，继续解$Sx_{2}=Tx_{1}+b$。一直到$x_{k+1}$非常接近$x_{k}$时，又或者说残余值$r_{k}=b-Ax_{k}$接近$0$时，迭代停止。由于线性方程组的复杂程度不同，这个过程经历几百次的迭代都是有可能的。所以，迭代法的目标就是**比消元法更快速地逼近真实解**。

那么究竟应该如何快速地逼近真实解呢？

这里，$A=S-T$，$A$的分解成了关键，也就是说$A$的分解目标是**每步的运算速度和收敛速度都要快**。每步的运算速度取决于$S$，而收敛速度取决于“错误”(error)，$e_{k}$，这里的错误 $e_{k}$是$x-x_{k}$，也就是说$x$和$x_{k}$的差应该快速逼近0，我们把错误表示成这样：$e_{k+1}=S^{-1}Te_{k}$（等式③）。

它是等式②和①差后得出的结果，迭代的每一步里，错误都会被$S^{-1}T$乘，如果$S^{-1}T$越小，那逼近0的速度就更快。在极端分解情况下，$S=A$，$T=0$，那$Ax=b$又回来了，第一次迭代就能完成收敛，其中$S^{-1}T$等于0。

但是，这一次迭代的成本太高，我们回到了非迭代方式的原点。所以，你也知道，鱼和熊掌不能兼得，$S$的选择成为了关键。那我们要如何在每一次迭代的速度和快速收敛之间做出平衡呢？我给你$S$选择的几种常见方法：

1. 雅可比方法（Jacobi method）：$S$取$A$的对角部分。
2. 高斯-赛德尔方法（Gauss-Seidel）：$S$取$A$的下三角部分，包含对角。
3. ILU方法（Incomplete LU）：$S=L$估计乘$U$估计。

## 雅可比方法实践

总体介绍了迭代法理论之后，我们就进入迭代法运用的实践环节。

首先，我们先来试试使用雅可比方法解线性方程组，雅克比迭代法是众多迭代法中比较早且较简单的一种。所以，作为迭代法的实践开篇比较合适。让我们设一个2×2的线性方程组：

$$
Ax=b
$$

$$
\left\{\begin{array}{c}
2 u-v=4 \\\
-u+2 v=-2
\end{array}\right.
$$

我们很容易就能得出这个方程组的解如下。

$$
\left[\begin{array}{l}
u \\\
v
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{l}
2 \\\
0
\end{array}\right]
$$

现在我们就用雅可比方法来看看怎么解这个方程组：

首先，我们把线性方程组转换成矩阵形式。

$$

\left[\begin{array}{cc}
2 & -1 \\\
-1 & 2
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
4 \\\
-2
\end{array}\right]
$$

接着，把A的对角线放在等式左边，得出$S$矩阵。

$$
S=\left[\begin{array}{ll}
2 & 0 \\\
0 & 2
\end{array}\right]
$$

其余部分移到等式右边，得出$T$矩阵。

$$
T=\left[\begin{array}{ll}
0 & 1 \\\
1 & 0
\end{array}\right]
$$

于是，雅可比迭代就可以表示成下面这样的形式。

$$
\mathrm{S} x_{k+1}=T x_{k}+\mathrm{b}
$$

$$
\left\{\begin{array}{l}
2 u_{k+1}=v_{k}+4 \\\
2 v_{k+1}=u_{k}-2
\end{array}\right.
$$

现在是时候进行迭代了，我们从$u_{0}=v_{0}=0$开始。

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{0} \\\
v_{0}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{l}
0 \\\
0
\end{array}\right]
$$

第一次迭代后，我们得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{1} \\\
v_{1}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
2 \\\
-1
\end{array}\right]
$$

第二次迭代后得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{2} \\\
v_{2}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{l}
\frac{3}{2} \\\
0
\end{array}\right]
$$

第三次迭代后得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{3} \\\
v_{3}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
2 \\\
-\frac{1}{4}
\end{array}\right]
$$

第四次迭代后得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{4} \\\
v_{4}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{l}
\frac{15}{8} \\\
0
\end{array}\right]
$$

第五次迭代后，我们得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{5} \\\
v_{5}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
2 \\\

-\frac{1}{16}
\end{array}\right]
$$

经过五次迭代后发现收敛，因为它的结果接近真实解。

$$
真实解
\left[\begin{array}{l}
2 \\\
0
\end{array}\right]
$$

现在，再来看一下错误等式，$\mathrm{Se}_{k+1}=T e_{k}$，我们把$S$和$T$代入等式，得出：

$$
\left[\begin{array}{ll}
2 & 0 \\\
0 & 2
\end{array}\right] e_{k+1}=\left[\begin{array}{ll}
0 & 1 \\\
1 & 0
\end{array}\right] e_{k}
$$

计算$S$的逆矩阵和$T$相乘$S^{-1}T$得出：

$$
e_{k+1}=\left[\begin{array}{cc}
0 & \frac{1}{2} \\\
\frac{1}{2} & 0
\end{array}\right] e_{k}
$$

这里，$S$的逆矩阵和T相乘$S^{-1}T$有特征值$\frac{1}{2}$和$-\frac{1}{2}$，所以，它的谱半径是$\rho(B)=\frac{1}{2}$。这里的**谱半径**是用来控制收敛的，所以非常重要。谱半径从数学定义上是：矩阵（或者有界线性算子的谱半径）是指其特征值绝对值集合的上确界。这个概念是不是很难理解？具体谱半径的概念你可以查互联网来获取，为了方便你理解，这里我还是用数学方法来简单表达一下。

$$
B=S^{-1} T=\left[\begin{array}{ll}
0 & \frac{1}{2} \\\
\frac{1}{2} & 0
\end{array}\right]
$$

通过$S$的逆矩阵和$T$相乘$S^{-1}T$，我们得到：$|\lambda|_{\max }=\frac{1}{2}$，以及：

$$
\left[\begin{array}{cc}
0 & \frac{1}{2} \\\
\frac{1}{2} & 0
\end{array}\right]^{2}=\left[\begin{array}{cc}
\frac{1}{4} & 0 \\\
0 & \frac{1}{4}
\end{array}\right]
$$

这里的特征值$\frac{1}{2}$非常小，所以10次迭代后，错误就很低了，即$\frac{1^{10}}{2}=\frac{1}{1024}$。而如果特征值是0.99或者0.999，那很显然迭代次数就要多得多，也就是说需要更多时间来做运算。

## 高斯-赛德尔方法实践

现在我们再来看下高斯-赛德尔方法，高斯-赛德尔迭代可以**节约存储**和**加速迭代**，每迭代一次只需一组存储单元，而雅可比迭代需要两组单元。

$S$取$A$的下三角部分，还是使用之前雅可比方法中的例子，我们得出方程组：

$$
\left\{\begin{array}{c}
u_{k+1}=\frac{1}{2} v_{k}+2 \\\
v_{k+1}=\frac{1}{2} u_{k+1}-1
\end{array}\right.
$$

这里有一个比较大的变化，那就是$u_{k}$消失了，通过$v_{k}$，我们可以直接得到$u_{k+1}$和$v_{k+1}$，这样有什么好处呢？两大好处是显而易见的，就是**节约存储**和**加速迭代**。

接下来，我们从$u_{0}=0$，$v_{0}=-1$来测试一下迭代。

第一次迭代后，我们得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{1} \\\
v_{1}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
\frac{3}{2} \\\
\frac{-1}{4}
\end{array}\right]
$$

第二次迭代后得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{2} \\\
v_{2}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{l}
\frac{15}{8} \\\
\frac{-1}{16}
\end{array}\right]
$$

第三次迭代后得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{3} \\\
v_{3}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{r}

\frac{63}{32} \\\
-\frac{1}{64}
\end{array}\right]
$$

经过三次迭代后发现收敛，因为第三次迭代后的结果接近真实解。

错误经过计算分别是$-1, \frac{-1}{4}, \frac{-1}{16}, \frac{-1}{64}$，和刚才使用雅可比方法得出的错误$2, \frac{1}{2}, \frac{1}{8}, \frac{1}{32}$。比较后我们可以发现，无论是迭代次数还是收敛速度方面，高斯-赛德尔方法比雅可比方法速度快、精确度也高得多。

## 逐次超松弛方法

最后，我们在高斯-赛德尔方法上做个小调整，在迭代中引入一个参数“omega”，$ω$，即超松弛因子。然后选择一个合适的$ω$，使得$S^{-1}T$的谱半径尽可能小，这个方法就叫做逐次超松弛方法（Successive over-relaxation method，简称SOR）。

SOR方法的方程是：$ωAx=ωb$，矩阵$S$有$A$的对角线，对角线下是$ωA$，等式右边$T$是$S-ωA$，于是，我们还是使用之前雅可比方法中的例子，得到SOR方程组如下。

$$\left\{\begin{array}{c}
2 u_{k+1}=(2-2 \omega) u_{k}+\omega v_{k}+4 \omega \\\
-\omega u_{k+1}+2 v_{k+1}=(2-2 \omega) v_{k}-2 \omega
\end{array}\right.$$

是不是看起来更复杂了？

没关系，其实它只是在我们眼中看起来复杂，对计算机来说是没区别的。对SOR来说，只是多了一个$ω$，而$ω$选择越好就越快。具体$ω$的选择，以及迭代的过程就不赘述了，我给你一个小提示，你可以在“$ω$大于1”和“$ω$小于1”两种情况下来多选择几个$ω$进行尝试，最后你应该会得到结论：

1. 在$ω$大于1时，$ω$越大，迭代的次数就越多，收敛速度就越慢，$ω$接近1时，迭代的次数越小，收敛速度越快。
2. 在$ω$小于1时，$ω$越小，迭代的次数就越多，收敛速度就越慢，$ω$接近1时，迭代的次数越小，收敛速度越快。

所以，SOR迭代法的关键就是$ω$的选择，它可以被看作是高斯-赛德尔法的扩充。

雅可比法、高斯-赛德尔法，以及SOR迭代法都是定常迭代法。接下来我讲一下和定常迭代法不同的另一类方法，也是实践中用的比较多的方法——**共轭梯度法**（Conjugate gradient），它属于Krylov子空间方法。简单来说，Krylov子空间方法是一种 “降维打击” 手段，是一种牺牲精度换取速度的方法。

## 共轭梯度法

要讲共轭梯度法，我们要先解释一下“共轭”，共轭就是按一定的规律相配的一对，通俗点说就是孪生。“轭”是牛拉车用的木头，那什么是共轭关系呢？同时拉一辆车的两头牛，就是共轭关系。

我们根据这个定义再来解释一下共轭方向，向量$p, q \in R$， 若满足条件$pAq=0$， 则称$p$和$q$关于$A$是共轭方向，或者$p$和$q$关于$A$共轭。有了共轭和共轭方向的概念后，再来看共轭梯度法就简单多了。共轭梯度法的出现不仅是为了解决梯度下降法的收敛速度慢，而且也避免了牛顿法需要存储和计算黑塞矩阵（Hessian Matrix）并求逆的缺点。

现在来看看共轭梯度算法，设$Ax=b$，其中$A$是一个实对称正定矩阵。

首先，我们设初始值$x_{0}$为$0$或者一个估计值，来计算$r_{0}:=b-A x_{0}$。如果$r_{0}$非常小，那$x_{0}$就是结果，如果不是就继续。

接下来设$p_{0}:=r_{0}$，$k:=0$。现在我们开始迭代循环。

a.计算$\alpha_{k}$ 。

$$\alpha_{k}:=\frac{r_{k}^{T} r_{k}}{p_{k}^{T} A p_{k}}$$

b.计算$x_{k+1}$ 。

$$x_{k+1}:=x_{k}+\alpha_{k} p_{k}$$

c.计算$r_{k+1}$。

$$r_{k+1}:=r_{k}-\alpha_{k} A p_{k}$$

d.如果$r_{k+1}$非常小，循环结束，如果不是就继续。

e.计算$β_{k}$ 。

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

f.计算$p_{k+1}$ 。

$$p_{k+1}:=r_{k+1}+\beta_{k} p_{k}$$

g.$k:=k+1$。

4. 返回结果$x_{k+1}$。

从算法中我们可以看出，共轭梯度法的优点是**存储量小**和**具有步收敛性**。如果你熟悉MATLAB，就会发现共轭梯度法的实现超级简单，只需要短短十几行代码（下方代码来自于MATLAB/GNU Octave的

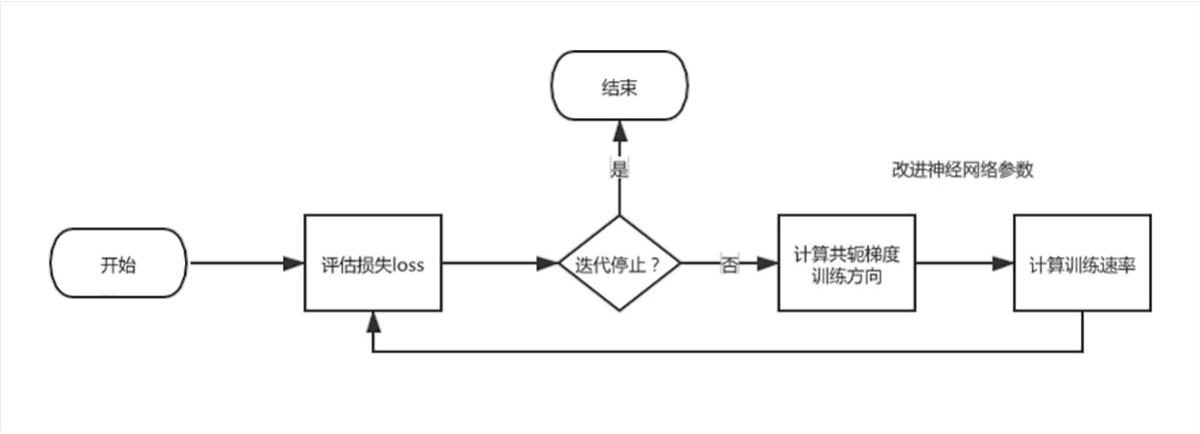
例子）。

```
function x = conjgrad(A, b, x)
    r = b - A * x;
    p = r;
    rsold = r' * r;


    for i = 1:length(b)
        Ap = A * p;
        alpha = rsold / (p' * Ap);
        x = x + alpha * p;
        r = r - alpha * Ap;
        rsnew = r' * r;
        if sqrt(rsnew) < 1e-10
              break;
        end
        p = r + (rsnew / rsold) * p;
        rsold = rsnew;
    end
end
```

## 机器学习中的共轭梯度

共轭梯度法经常被用在训练神经网络中，在实践中已经证明，它是比**梯度下降**更有效的方法，因为就像刚才讲的，它不需要计算黑塞矩阵。那我现在就来讲一讲，使用共轭梯度法的神经网络训练过程。




在整个训练过程中，**参数改进**是重点，当然这也是所有神经网络训练的重点。这个过程是通过计算共轭梯度的训练方向，然后计算训练速率来实现的。在共轭梯度训练算法中，搜索是按共轭方向进行的，也就是说，训练方向是共轭的。所以，收敛速度比梯度下降要快。

现在我们来看训练方向的计算方法。首先，我们设置训练方向向量为$d$，然后，定义一个初始参数向量$w^{0}$，以及一个初始训练方向向量$d^{0}=-g^{0}$，于是，共轭梯度法构造出的训练方向可以表示成：$d^{i+1}=g^{i+1}+d^{i} \cdot \gamma^{i}$。

其中，$g$是梯度向量，$\gamma$是共轭参数。参数通过这个表达式来更新和优化。通常训练速率$\eta$可使用单变量函数优化方法求得。

$$w^{i+1}=w^{i}+d^{i} \cdot \eta^{i}$$

## 本节小结

好了，到这里数值线性代数的迭代法这一讲就结束了，最后我再总结一下前面讲解的内容。

首先，我先解释了数值线性代数，接着再整体讲解了迭代方法。然后，举了一个线性方程组的例子，运用迭代法中的几个比较著名的实践方法：雅可比方法、高斯-赛德尔方法，以及逐次超松弛方法，来解这个线性方程组。最后，我把共轭梯度法用在了深度学习的神经网络训练中。

希望你能在了解了数值线性代数，以及迭代法后，更多地在计算机科学领域中，运用迭代法做矩阵运算。如果有兴趣，你也可以学习其它在实践中使用的迭代法。

## 线性代数练习场

练习时刻到了，这次继续使用第一篇线性方程组里的例子，你可以挑选任意一个迭代法来求解这个线性方程组。

假设，一个旅游团由孩子和大人组成，去程时他们一起坐大巴，每个孩子的票价3元，大人票价3.2元，总共花费118.4元。回程时一起做火车，每个孩子的票价3.5元，大人票价3.6元，总共花费135.2元。请问这个旅游团中有多少孩子和大人？

设小孩人数为$x_{1}$，大人人数为$x_{2}$，于是我们得到了一个方程组：

$$\left\{\begin{array}{c}
3 x_{1}+3.2 x_{2}=118.4 \\\
3.5 x_{1}+3.6 x_{2}=135.2
\end{array}\right.$$

这个方程组的解是：

$$\left\{\begin{array}{l}
x_{1}=16 \\\
x_{2}=22
\end{array}\right.$$

你可以计算一下多少次迭代后它能收敛，也就是逼近真实解？以及它的错误$e$又分别是多少？

欢迎在留言区晒出的你的运算过程和结果。如果有收获，也欢迎你把这篇文章分享给你的朋友。

你好，我是朱维刚。欢迎你继续跟我学习线性代数，今天我要讲的内容是“数值线性代数的迭代法，以及如何在实践中运用迭代法求解线性方程组”。

大密度线性方程组的计算已经成为了世界上最快计算机的测试标准。2008年，IBM为美国能源部Los Alamos国家实验室建造了“Roadrunner”计算机系统，它的运算速度达到了1.026 petaflop/s（千万亿次/秒，petaflop是衡量计算机性能的一个重要单位，1 petaflop等于每秒钟进行1千万亿次的数学运算）。按摩尔定律计算，现在世界上最快的计算机已经达到了200 petaflop，我国也早就进入了世界前列，并有望实现1 exaflop/s（百亿亿次/秒），成为世界第一。


可能你会有些疑惑，为什么我要在课程后期来讲数值线性代数呢？

那是因为数值线性代数是一门特殊的学科，是特别为计算机上进行线性代数计算服务的，可以说它是研究矩阵运算算法的学科，偏向算法实践与工程设计。有了之前基础知识的铺垫后，学习数值线性代数会更有效，而且它是可以直接运用在计算机科学中的，比如：在图像压缩中，使用奇异值分解（SVD）来节省内存；在深度学习中，使用共轭梯度来加速神经网络的收敛。

## 迭代方法说明

课程内容的前期一直都在用**直接法**来解线性方程组，比如高斯消元法。但在实践中，我们在面对复杂场景时，更多的会使用**迭代法**来求解（也就是所谓的间接法），因为很多场景会用到大型稀疏矩阵。所以，我打算在这里讲讲机器学习中的迭代法应用。这里需要注意，不是说直接法不重要，直接法解决了许多相对简单的问题，也是其他方法的基础。

现在我就来说一说什么是迭代法？

我们还是通过线性方程组$Ax=b$来看看。在这里我们分解$A$，使得$A=S-T$，代入等式后得出：$Sx=Tx+b$（等式①）。

按这样的方式持续下去，通过迭代的方式来解$Sx$。这就类似于把复杂问题层层分解和简化，最终使得这个迭代等式成立：$Sx_{k+1}=Tx_{k}+b$（等式②）。

更具体一点来说，我们其实是从$x_{0}$开始，解$Sx_{1}=Tx_{0}+b$。然后，继续解$Sx_{2}=Tx_{1}+b$。一直到$x_{k+1}$非常接近$x_{k}$时，又或者说残余值$r_{k}=b-Ax_{k}$接近$0$时，迭代停止。由于线性方程组的复杂程度不同，这个过程经历几百次的迭代都是有可能的。所以，迭代法的目标就是**比消元法更快速地逼近真实解**。

那么究竟应该如何快速地逼近真实解呢？

这里，$A=S-T$，$A$的分解成了关键，也就是说$A$的分解目标是**每步的运算速度和收敛速度都要快**。每步的运算速度取决于$S$，而收敛速度取决于“错误”(error)，$e_{k}$，这里的错误 $e_{k}$是$x-x_{k}$，也就是说$x$和$x_{k}$的差应该快速逼近0，我们把错误表示成这样：$e_{k+1}=S^{-1}Te_{k}$（等式③）。

它是等式②和①差后得出的结果，迭代的每一步里，错误都会被$S^{-1}T$乘，如果$S^{-1}T$越小，那逼近0的速度就更快。在极端分解情况下，$S=A$，$T=0$，那$Ax=b$又回来了，第一次迭代就能完成收敛，其中$S^{-1}T$等于0。

但是，这一次迭代的成本太高，我们回到了非迭代方式的原点。所以，你也知道，鱼和熊掌不能兼得，$S$的选择成为了关键。那我们要如何在每一次迭代的速度和快速收敛之间做出平衡呢？我给你$S$选择的几种常见方法：

1. 雅可比方法（Jacobi method）：$S$取$A$的对角部分。
2. 高斯-赛德尔方法（Gauss-Seidel）：$S$取$A$的下三角部分，包含对角。
3. ILU方法（Incomplete LU）：$S=L$估计乘$U$估计。

## 雅可比方法实践

总体介绍了迭代法理论之后，我们就进入迭代法运用的实践环节。

首先，我们先来试试使用雅可比方法解线性方程组，雅克比迭代法是众多迭代法中比较早且较简单的一种。所以，作为迭代法的实践开篇比较合适。让我们设一个2×2的线性方程组：

$$
Ax=b
$$

$$
\left\{\begin{array}{c}
2 u-v=4 \\\
-u+2 v=-2
\end{array}\right.
$$

我们很容易就能得出这个方程组的解如下。

$$
\left[\begin{array}{l}
u \\\
v
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{l}
2 \\\
0
\end{array}\right]
$$

现在我们就用雅可比方法来看看怎么解这个方程组：

首先，我们把线性方程组转换成矩阵形式。

$$

\left[\begin{array}{cc}
2 & -1 \\\
-1 & 2
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
4 \\\
-2
\end{array}\right]
$$

接着，把A的对角线放在等式左边，得出$S$矩阵。

$$
S=\left[\begin{array}{ll}
2 & 0 \\\
0 & 2
\end{array}\right]
$$

其余部分移到等式右边，得出$T$矩阵。

$$
T=\left[\begin{array}{ll}
0 & 1 \\\
1 & 0
\end{array}\right]
$$

于是，雅可比迭代就可以表示成下面这样的形式。

$$
\mathrm{S} x_{k+1}=T x_{k}+\mathrm{b}
$$

$$
\left\{\begin{array}{l}
2 u_{k+1}=v_{k}+4 \\\
2 v_{k+1}=u_{k}-2
\end{array}\right.
$$

现在是时候进行迭代了，我们从$u_{0}=v_{0}=0$开始。

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{0} \\\
v_{0}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{l}
0 \\\
0
\end{array}\right]
$$

第一次迭代后，我们得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{1} \\\
v_{1}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
2 \\\
-1
\end{array}\right]
$$

第二次迭代后得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{2} \\\
v_{2}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{l}
\frac{3}{2} \\\
0
\end{array}\right]
$$

第三次迭代后得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{3} \\\
v_{3}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
2 \\\
-\frac{1}{4}
\end{array}\right]
$$

第四次迭代后得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{4} \\\
v_{4}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{l}
\frac{15}{8} \\\
0
\end{array}\right]
$$

第五次迭代后，我们得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{5} \\\
v_{5}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
2 \\\

-\frac{1}{16}
\end{array}\right]
$$

经过五次迭代后发现收敛，因为它的结果接近真实解。

$$
真实解
\left[\begin{array}{l}
2 \\\
0
\end{array}\right]
$$

现在，再来看一下错误等式，$\mathrm{Se}_{k+1}=T e_{k}$，我们把$S$和$T$代入等式，得出：

$$
\left[\begin{array}{ll}
2 & 0 \\\
0 & 2
\end{array}\right] e_{k+1}=\left[\begin{array}{ll}
0 & 1 \\\
1 & 0
\end{array}\right] e_{k}
$$

计算$S$的逆矩阵和$T$相乘$S^{-1}T$得出：

$$
e_{k+1}=\left[\begin{array}{cc}
0 & \frac{1}{2} \\\
\frac{1}{2} & 0
\end{array}\right] e_{k}
$$

这里，$S$的逆矩阵和T相乘$S^{-1}T$有特征值$\frac{1}{2}$和$-\frac{1}{2}$，所以，它的谱半径是$\rho(B)=\frac{1}{2}$。这里的**谱半径**是用来控制收敛的，所以非常重要。谱半径从数学定义上是：矩阵（或者有界线性算子的谱半径）是指其特征值绝对值集合的上确界。这个概念是不是很难理解？具体谱半径的概念你可以查互联网来获取，为了方便你理解，这里我还是用数学方法来简单表达一下。

$$
B=S^{-1} T=\left[\begin{array}{ll}
0 & \frac{1}{2} \\\
\frac{1}{2} & 0
\end{array}\right]
$$

通过$S$的逆矩阵和$T$相乘$S^{-1}T$，我们得到：$|\lambda|_{\max }=\frac{1}{2}$，以及：

$$
\left[\begin{array}{cc}
0 & \frac{1}{2} \\\
\frac{1}{2} & 0
\end{array}\right]^{2}=\left[\begin{array}{cc}
\frac{1}{4} & 0 \\\
0 & \frac{1}{4}
\end{array}\right]
$$

这里的特征值$\frac{1}{2}$非常小，所以10次迭代后，错误就很低了，即$\frac{1^{10}}{2}=\frac{1}{1024}$。而如果特征值是0.99或者0.999，那很显然迭代次数就要多得多，也就是说需要更多时间来做运算。

## 高斯-赛德尔方法实践

现在我们再来看下高斯-赛德尔方法，高斯-赛德尔迭代可以**节约存储**和**加速迭代**，每迭代一次只需一组存储单元，而雅可比迭代需要两组单元。

$S$取$A$的下三角部分，还是使用之前雅可比方法中的例子，我们得出方程组：

$$
\left\{\begin{array}{c}
u_{k+1}=\frac{1}{2} v_{k}+2 \\\
v_{k+1}=\frac{1}{2} u_{k+1}-1
\end{array}\right.
$$

这里有一个比较大的变化，那就是$u_{k}$消失了，通过$v_{k}$，我们可以直接得到$u_{k+1}$和$v_{k+1}$，这样有什么好处呢？两大好处是显而易见的，就是**节约存储**和**加速迭代**。

接下来，我们从$u_{0}=0$，$v_{0}=-1$来测试一下迭代。

第一次迭代后，我们得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{1} \\\
v_{1}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
\frac{3}{2} \\\
\frac{-1}{4}
\end{array}\right]
$$

第二次迭代后得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{2} \\\
v_{2}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{l}
\frac{15}{8} \\\
\frac{-1}{16}
\end{array}\right]
$$

第三次迭代后得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{3} \\\
v_{3}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{r}

\frac{63}{32} \\\
-\frac{1}{64}
\end{array}\right]
$$

经过三次迭代后发现收敛，因为第三次迭代后的结果接近真实解。

错误经过计算分别是$-1, \frac{-1}{4}, \frac{-1}{16}, \frac{-1}{64}$，和刚才使用雅可比方法得出的错误$2, \frac{1}{2}, \frac{1}{8}, \frac{1}{32}$。比较后我们可以发现，无论是迭代次数还是收敛速度方面，高斯-赛德尔方法比雅可比方法速度快、精确度也高得多。

## 逐次超松弛方法

最后，我们在高斯-赛德尔方法上做个小调整，在迭代中引入一个参数“omega”，$ω$，即超松弛因子。然后选择一个合适的$ω$，使得$S^{-1}T$的谱半径尽可能小，这个方法就叫做逐次超松弛方法（Successive over-relaxation method，简称SOR）。

SOR方法的方程是：$ωAx=ωb$，矩阵$S$有$A$的对角线，对角线下是$ωA$，等式右边$T$是$S-ωA$，于是，我们还是使用之前雅可比方法中的例子，得到SOR方程组如下。

$$\left\{\begin{array}{c}
2 u_{k+1}=(2-2 \omega) u_{k}+\omega v_{k}+4 \omega \\\
-\omega u_{k+1}+2 v_{k+1}=(2-2 \omega) v_{k}-2 \omega
\end{array}\right.$$

是不是看起来更复杂了？

没关系，其实它只是在我们眼中看起来复杂，对计算机来说是没区别的。对SOR来说，只是多了一个$ω$，而$ω$选择越好就越快。具体$ω$的选择，以及迭代的过程就不赘述了，我给你一个小提示，你可以在“$ω$大于1”和“$ω$小于1”两种情况下来多选择几个$ω$进行尝试，最后你应该会得到结论：

1. 在$ω$大于1时，$ω$越大，迭代的次数就越多，收敛速度就越慢，$ω$接近1时，迭代的次数越小，收敛速度越快。
2. 在$ω$小于1时，$ω$越小，迭代的次数就越多，收敛速度就越慢，$ω$接近1时，迭代的次数越小，收敛速度越快。

所以，SOR迭代法的关键就是$ω$的选择，它可以被看作是高斯-赛德尔法的扩充。

雅可比法、高斯-赛德尔法，以及SOR迭代法都是定常迭代法。接下来我讲一下和定常迭代法不同的另一类方法，也是实践中用的比较多的方法——**共轭梯度法**（Conjugate gradient），它属于Krylov子空间方法。简单来说，Krylov子空间方法是一种 “降维打击” 手段，是一种牺牲精度换取速度的方法。

## 共轭梯度法

要讲共轭梯度法，我们要先解释一下“共轭”，共轭就是按一定的规律相配的一对，通俗点说就是孪生。“轭”是牛拉车用的木头，那什么是共轭关系呢？同时拉一辆车的两头牛，就是共轭关系。

我们根据这个定义再来解释一下共轭方向，向量$p, q \in R$， 若满足条件$pAq=0$， 则称$p$和$q$关于$A$是共轭方向，或者$p$和$q$关于$A$共轭。有了共轭和共轭方向的概念后，再来看共轭梯度法就简单多了。共轭梯度法的出现不仅是为了解决梯度下降法的收敛速度慢，而且也避免了牛顿法需要存储和计算黑塞矩阵（Hessian Matrix）并求逆的缺点。

现在来看看共轭梯度算法，设$Ax=b$，其中$A$是一个实对称正定矩阵。

首先，我们设初始值$x_{0}$为$0$或者一个估计值，来计算$r_{0}:=b-A x_{0}$。如果$r_{0}$非常小，那$x_{0}$就是结果，如果不是就继续。

接下来设$p_{0}:=r_{0}$，$k:=0$。现在我们开始迭代循环。

a.计算$\alpha_{k}$ 。

$$\alpha_{k}:=\frac{r_{k}^{T} r_{k}}{p_{k}^{T} A p_{k}}$$

b.计算$x_{k+1}$ 。

$$x_{k+1}:=x_{k}+\alpha_{k} p_{k}$$

c.计算$r_{k+1}$。

$$r_{k+1}:=r_{k}-\alpha_{k} A p_{k}$$

d.如果$r_{k+1}$非常小，循环结束，如果不是就继续。

e.计算$β_{k}$ 。

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

f.计算$p_{k+1}$ 。

$$p_{k+1}:=r_{k+1}+\beta_{k} p_{k}$$

g.$k:=k+1$。

4. 返回结果$x_{k+1}$。

从算法中我们可以看出，共轭梯度法的优点是**存储量小**和**具有步收敛性**。如果你熟悉MATLAB，就会发现共轭梯度法的实现超级简单，只需要短短十几行代码（下方代码来自于MATLAB/GNU Octave的

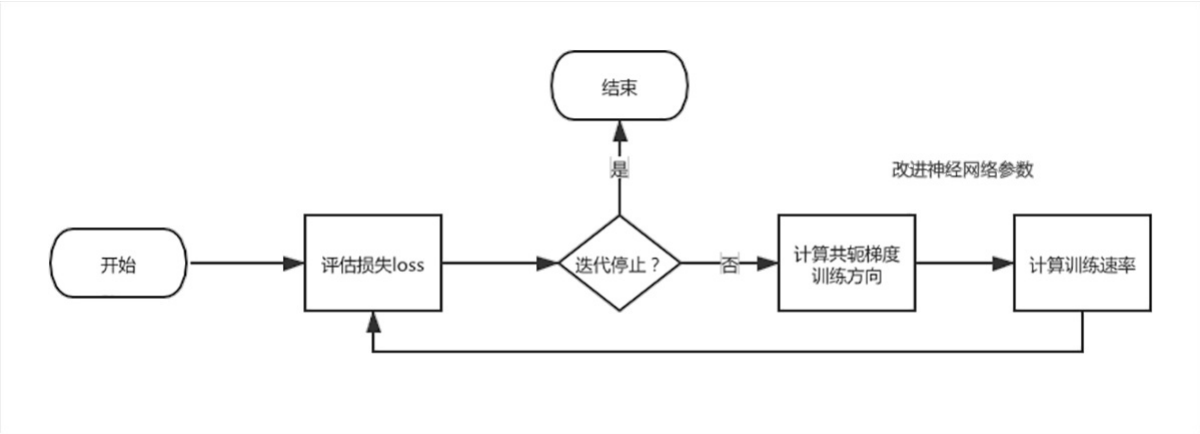
例子）。

```
function x = conjgrad(A, b, x)
    r = b - A * x;
    p = r;
    rsold = r' * r;


    for i = 1:length(b)
        Ap = A * p;
        alpha = rsold / (p' * Ap);
        x = x + alpha * p;
        r = r - alpha * Ap;
        rsnew = r' * r;
        if sqrt(rsnew) < 1e-10
              break;
        end
        p = r + (rsnew / rsold) * p;
        rsold = rsnew;
    end
end
```

## 机器学习中的共轭梯度

共轭梯度法经常被用在训练神经网络中，在实践中已经证明，它是比**梯度下降**更有效的方法，因为就像刚才讲的，它不需要计算黑塞矩阵。那我现在就来讲一讲，使用共轭梯度法的神经网络训练过程。




在整个训练过程中，**参数改进**是重点，当然这也是所有神经网络训练的重点。这个过程是通过计算共轭梯度的训练方向，然后计算训练速率来实现的。在共轭梯度训练算法中，搜索是按共轭方向进行的，也就是说，训练方向是共轭的。所以，收敛速度比梯度下降要快。

现在我们来看训练方向的计算方法。首先，我们设置训练方向向量为$d$，然后，定义一个初始参数向量$w^{0}$，以及一个初始训练方向向量$d^{0}=-g^{0}$，于是，共轭梯度法构造出的训练方向可以表示成：$d^{i+1}=g^{i+1}+d^{i} \cdot \gamma^{i}$。

其中，$g$是梯度向量，$\gamma$是共轭参数。参数通过这个表达式来更新和优化。通常训练速率$\eta$可使用单变量函数优化方法求得。

$$w^{i+1}=w^{i}+d^{i} \cdot \eta^{i}$$

## 本节小结

好了，到这里数值线性代数的迭代法这一讲就结束了，最后我再总结一下前面讲解的内容。

首先，我先解释了数值线性代数，接着再整体讲解了迭代方法。然后，举了一个线性方程组的例子，运用迭代法中的几个比较著名的实践方法：雅可比方法、高斯-赛德尔方法，以及逐次超松弛方法，来解这个线性方程组。最后，我把共轭梯度法用在了深度学习的神经网络训练中。

希望你能在了解了数值线性代数，以及迭代法后，更多地在计算机科学领域中，运用迭代法做矩阵运算。如果有兴趣，你也可以学习其它在实践中使用的迭代法。

## 线性代数练习场

练习时刻到了，这次继续使用第一篇线性方程组里的例子，你可以挑选任意一个迭代法来求解这个线性方程组。

假设，一个旅游团由孩子和大人组成，去程时他们一起坐大巴，每个孩子的票价3元，大人票价3.2元，总共花费118.4元。回程时一起做火车，每个孩子的票价3.5元，大人票价3.6元，总共花费135.2元。请问这个旅游团中有多少孩子和大人？

设小孩人数为$x_{1}$，大人人数为$x_{2}$，于是我们得到了一个方程组：

$$\left\{\begin{array}{c}
3 x_{1}+3.2 x_{2}=118.4 \\\
3.5 x_{1}+3.6 x_{2}=135.2
\end{array}\right.$$

这个方程组的解是：

$$\left\{\begin{array}{l}
x_{1}=16 \\\
x_{2}=22
\end{array}\right.$$

你可以计算一下多少次迭代后它能收敛，也就是逼近真实解？以及它的错误$e$又分别是多少？

欢迎在留言区晒出的你的运算过程和结果。如果有收获，也欢迎你把这篇文章分享给你的朋友。

你好，我是朱维刚。欢迎你继续跟我学习线性代数，今天我要讲的内容是“数值线性代数的迭代法，以及如何在实践中运用迭代法求解线性方程组”。

大密度线性方程组的计算已经成为了世界上最快计算机的测试标准。2008年，IBM为美国能源部Los Alamos国家实验室建造了“Roadrunner”计算机系统，它的运算速度达到了1.026 petaflop/s（千万亿次/秒，petaflop是衡量计算机性能的一个重要单位，1 petaflop等于每秒钟进行1千万亿次的数学运算）。按摩尔定律计算，现在世界上最快的计算机已经达到了200 petaflop，我国也早就进入了世界前列，并有望实现1 exaflop/s（百亿亿次/秒），成为世界第一。


可能你会有些疑惑，为什么我要在课程后期来讲数值线性代数呢？

那是因为数值线性代数是一门特殊的学科，是特别为计算机上进行线性代数计算服务的，可以说它是研究矩阵运算算法的学科，偏向算法实践与工程设计。有了之前基础知识的铺垫后，学习数值线性代数会更有效，而且它是可以直接运用在计算机科学中的，比如：在图像压缩中，使用奇异值分解（SVD）来节省内存；在深度学习中，使用共轭梯度来加速神经网络的收敛。

## 迭代方法说明

课程内容的前期一直都在用**直接法**来解线性方程组，比如高斯消元法。但在实践中，我们在面对复杂场景时，更多的会使用**迭代法**来求解（也就是所谓的间接法），因为很多场景会用到大型稀疏矩阵。所以，我打算在这里讲讲机器学习中的迭代法应用。这里需要注意，不是说直接法不重要，直接法解决了许多相对简单的问题，也是其他方法的基础。

现在我就来说一说什么是迭代法？

我们还是通过线性方程组$Ax=b$来看看。在这里我们分解$A$，使得$A=S-T$，代入等式后得出：$Sx=Tx+b$（等式①）。

按这样的方式持续下去，通过迭代的方式来解$Sx$。这就类似于把复杂问题层层分解和简化，最终使得这个迭代等式成立：$Sx_{k+1}=Tx_{k}+b$（等式②）。

更具体一点来说，我们其实是从$x_{0}$开始，解$Sx_{1}=Tx_{0}+b$。然后，继续解$Sx_{2}=Tx_{1}+b$。一直到$x_{k+1}$非常接近$x_{k}$时，又或者说残余值$r_{k}=b-Ax_{k}$接近$0$时，迭代停止。由于线性方程组的复杂程度不同，这个过程经历几百次的迭代都是有可能的。所以，迭代法的目标就是**比消元法更快速地逼近真实解**。

那么究竟应该如何快速地逼近真实解呢？

这里，$A=S-T$，$A$的分解成了关键，也就是说$A$的分解目标是**每步的运算速度和收敛速度都要快**。每步的运算速度取决于$S$，而收敛速度取决于“错误”(error)，$e_{k}$，这里的错误 $e_{k}$是$x-x_{k}$，也就是说$x$和$x_{k}$的差应该快速逼近0，我们把错误表示成这样：$e_{k+1}=S^{-1}Te_{k}$（等式③）。

它是等式②和①差后得出的结果，迭代的每一步里，错误都会被$S^{-1}T$乘，如果$S^{-1}T$越小，那逼近0的速度就更快。在极端分解情况下，$S=A$，$T=0$，那$Ax=b$又回来了，第一次迭代就能完成收敛，其中$S^{-1}T$等于0。

但是，这一次迭代的成本太高，我们回到了非迭代方式的原点。所以，你也知道，鱼和熊掌不能兼得，$S$的选择成为了关键。那我们要如何在每一次迭代的速度和快速收敛之间做出平衡呢？我给你$S$选择的几种常见方法：

1. 雅可比方法（Jacobi method）：$S$取$A$的对角部分。
2. 高斯-赛德尔方法（Gauss-Seidel）：$S$取$A$的下三角部分，包含对角。
3. ILU方法（Incomplete LU）：$S=L$估计乘$U$估计。

## 雅可比方法实践

总体介绍了迭代法理论之后，我们就进入迭代法运用的实践环节。

首先，我们先来试试使用雅可比方法解线性方程组，雅克比迭代法是众多迭代法中比较早且较简单的一种。所以，作为迭代法的实践开篇比较合适。让我们设一个2×2的线性方程组：

$$
Ax=b
$$

$$
\left\{\begin{array}{c}
2 u-v=4 \\\
-u+2 v=-2
\end{array}\right.
$$

我们很容易就能得出这个方程组的解如下。

$$
\left[\begin{array}{l}
u \\\
v
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{l}
2 \\\
0
\end{array}\right]
$$

现在我们就用雅可比方法来看看怎么解这个方程组：

首先，我们把线性方程组转换成矩阵形式。

$$

\left[\begin{array}{cc}
2 & -1 \\\
-1 & 2
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
4 \\\
-2
\end{array}\right]
$$

接着，把A的对角线放在等式左边，得出$S$矩阵。

$$
S=\left[\begin{array}{ll}
2 & 0 \\\
0 & 2
\end{array}\right]
$$

其余部分移到等式右边，得出$T$矩阵。

$$
T=\left[\begin{array}{ll}
0 & 1 \\\
1 & 0
\end{array}\right]
$$

于是，雅可比迭代就可以表示成下面这样的形式。

$$
\mathrm{S} x_{k+1}=T x_{k}+\mathrm{b}
$$

$$
\left\{\begin{array}{l}
2 u_{k+1}=v_{k}+4 \\\
2 v_{k+1}=u_{k}-2
\end{array}\right.
$$

现在是时候进行迭代了，我们从$u_{0}=v_{0}=0$开始。

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{0} \\\
v_{0}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{l}
0 \\\
0
\end{array}\right]
$$

第一次迭代后，我们得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{1} \\\
v_{1}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
2 \\\
-1
\end{array}\right]
$$

第二次迭代后得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{2} \\\
v_{2}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{l}
\frac{3}{2} \\\
0
\end{array}\right]
$$

第三次迭代后得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{3} \\\
v_{3}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
2 \\\
-\frac{1}{4}
\end{array}\right]
$$

第四次迭代后得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{4} \\\
v_{4}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{l}
\frac{15}{8} \\\
0
\end{array}\right]
$$

第五次迭代后，我们得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{5} \\\
v_{5}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
2 \\\

-\frac{1}{16}
\end{array}\right]
$$

经过五次迭代后发现收敛，因为它的结果接近真实解。

$$
真实解
\left[\begin{array}{l}
2 \\\
0
\end{array}\right]
$$

现在，再来看一下错误等式，$\mathrm{Se}_{k+1}=T e_{k}$，我们把$S$和$T$代入等式，得出：

$$
\left[\begin{array}{ll}
2 & 0 \\\
0 & 2
\end{array}\right] e_{k+1}=\left[\begin{array}{ll}
0 & 1 \\\
1 & 0
\end{array}\right] e_{k}
$$

计算$S$的逆矩阵和$T$相乘$S^{-1}T$得出：

$$
e_{k+1}=\left[\begin{array}{cc}
0 & \frac{1}{2} \\\
\frac{1}{2} & 0
\end{array}\right] e_{k}
$$

这里，$S$的逆矩阵和T相乘$S^{-1}T$有特征值$\frac{1}{2}$和$-\frac{1}{2}$，所以，它的谱半径是$\rho(B)=\frac{1}{2}$。这里的**谱半径**是用来控制收敛的，所以非常重要。谱半径从数学定义上是：矩阵（或者有界线性算子的谱半径）是指其特征值绝对值集合的上确界。这个概念是不是很难理解？具体谱半径的概念你可以查互联网来获取，为了方便你理解，这里我还是用数学方法来简单表达一下。

$$
B=S^{-1} T=\left[\begin{array}{ll}
0 & \frac{1}{2} \\\
\frac{1}{2} & 0
\end{array}\right]
$$

通过$S$的逆矩阵和$T$相乘$S^{-1}T$，我们得到：$|\lambda|_{\max }=\frac{1}{2}$，以及：

$$
\left[\begin{array}{cc}
0 & \frac{1}{2} \\\
\frac{1}{2} & 0
\end{array}\right]^{2}=\left[\begin{array}{cc}
\frac{1}{4} & 0 \\\
0 & \frac{1}{4}
\end{array}\right]
$$

这里的特征值$\frac{1}{2}$非常小，所以10次迭代后，错误就很低了，即$\frac{1^{10}}{2}=\frac{1}{1024}$。而如果特征值是0.99或者0.999，那很显然迭代次数就要多得多，也就是说需要更多时间来做运算。

## 高斯-赛德尔方法实践

现在我们再来看下高斯-赛德尔方法，高斯-赛德尔迭代可以**节约存储**和**加速迭代**，每迭代一次只需一组存储单元，而雅可比迭代需要两组单元。

$S$取$A$的下三角部分，还是使用之前雅可比方法中的例子，我们得出方程组：

$$
\left\{\begin{array}{c}
u_{k+1}=\frac{1}{2} v_{k}+2 \\\
v_{k+1}=\frac{1}{2} u_{k+1}-1
\end{array}\right.
$$

这里有一个比较大的变化，那就是$u_{k}$消失了，通过$v_{k}$，我们可以直接得到$u_{k+1}$和$v_{k+1}$，这样有什么好处呢？两大好处是显而易见的，就是**节约存储**和**加速迭代**。

接下来，我们从$u_{0}=0$，$v_{0}=-1$来测试一下迭代。

第一次迭代后，我们得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{1} \\\
v_{1}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
\frac{3}{2} \\\
\frac{-1}{4}
\end{array}\right]
$$

第二次迭代后得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{2} \\\
v_{2}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{l}
\frac{15}{8} \\\
\frac{-1}{16}
\end{array}\right]
$$

第三次迭代后得到：

$$
\left[\begin{array}{l}
u_{3} \\\
v_{3}
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{r}

\frac{63}{32} \\\
-\frac{1}{64}
\end{array}\right]
$$

经过三次迭代后发现收敛，因为第三次迭代后的结果接近真实解。

错误经过计算分别是$-1, \frac{-1}{4}, \frac{-1}{16}, \frac{-1}{64}$，和刚才使用雅可比方法得出的错误$2, \frac{1}{2}, \frac{1}{8}, \frac{1}{32}$。比较后我们可以发现，无论是迭代次数还是收敛速度方面，高斯-赛德尔方法比雅可比方法速度快、精确度也高得多。

## 逐次超松弛方法

最后，我们在高斯-赛德尔方法上做个小调整，在迭代中引入一个参数“omega”，$ω$，即超松弛因子。然后选择一个合适的$ω$，使得$S^{-1}T$的谱半径尽可能小，这个方法就叫做逐次超松弛方法（Successive over-relaxation method，简称SOR）。

SOR方法的方程是：$ωAx=ωb$，矩阵$S$有$A$的对角线，对角线下是$ωA$，等式右边$T$是$S-ωA$，于是，我们还是使用之前雅可比方法中的例子，得到SOR方程组如下。

$$\left\{\begin{array}{c}
2 u_{k+1}=(2-2 \omega) u_{k}+\omega v_{k}+4 \omega \\\
-\omega u_{k+1}+2 v_{k+1}=(2-2 \omega) v_{k}-2 \omega
\end{array}\right.$$

是不是看起来更复杂了？

没关系，其实它只是在我们眼中看起来复杂，对计算机来说是没区别的。对SOR来说，只是多了一个$ω$，而$ω$选择越好就越快。具体$ω$的选择，以及迭代的过程就不赘述了，我给你一个小提示，你可以在“$ω$大于1”和“$ω$小于1”两种情况下来多选择几个$ω$进行尝试，最后你应该会得到结论：

1. 在$ω$大于1时，$ω$越大，迭代的次数就越多，收敛速度就越慢，$ω$接近1时，迭代的次数越小，收敛速度越快。
2. 在$ω$小于1时，$ω$越小，迭代的次数就越多，收敛速度就越慢，$ω$接近1时，迭代的次数越小，收敛速度越快。

所以，SOR迭代法的关键就是$ω$的选择，它可以被看作是高斯-赛德尔法的扩充。

雅可比法、高斯-赛德尔法，以及SOR迭代法都是定常迭代法。接下来我讲一下和定常迭代法不同的另一类方法，也是实践中用的比较多的方法——**共轭梯度法**（Conjugate gradient），它属于Krylov子空间方法。简单来说，Krylov子空间方法是一种 “降维打击” 手段，是一种牺牲精度换取速度的方法。

## 共轭梯度法

要讲共轭梯度法，我们要先解释一下“共轭”，共轭就是按一定的规律相配的一对，通俗点说就是孪生。“轭”是牛拉车用的木头，那什么是共轭关系呢？同时拉一辆车的两头牛，就是共轭关系。

我们根据这个定义再来解释一下共轭方向，向量$p, q \in R$， 若满足条件$pAq=0$， 则称$p$和$q$关于$A$是共轭方向，或者$p$和$q$关于$A$共轭。有了共轭和共轭方向的概念后，再来看共轭梯度法就简单多了。共轭梯度法的出现不仅是为了解决梯度下降法的收敛速度慢，而且也避免了牛顿法需要存储和计算黑塞矩阵（Hessian Matrix）并求逆的缺点。

现在来看看共轭梯度算法，设$Ax=b$，其中$A$是一个实对称正定矩阵。

首先，我们设初始值$x_{0}$为$0$或者一个估计值，来计算$r_{0}:=b-A x_{0}$。如果$r_{0}$非常小，那$x_{0}$就是结果，如果不是就继续。

接下来设$p_{0}:=r_{0}$，$k:=0$。现在我们开始迭代循环。

a.计算$\alpha_{k}$ 。

$$\alpha_{k}:=\frac{r_{k}^{T} r_{k}}{p_{k}^{T} A p_{k}}$$

b.计算$x_{k+1}$ 。

$$x_{k+1}:=x_{k}+\alpha_{k} p_{k}$$

c.计算$r_{k+1}$。

$$r_{k+1}:=r_{k}-\alpha_{k} A p_{k}$$

d.如果$r_{k+1}$非常小，循环结束，如果不是就继续。

e.计算$β_{k}$ 。

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

f.计算$p_{k+1}$ 。

$$p_{k+1}:=r_{k+1}+\beta_{k} p_{k}$$

g.$k:=k+1$。

4. 返回结果$x_{k+1}$。

从算法中我们可以看出，共轭梯度法的优点是**存储量小**和**具有步收敛性**。如果你熟悉MATLAB，就会发现共轭梯度法的实现超级简单，只需要短短十几行代码（下方代码来自于MATLAB/GNU Octave的

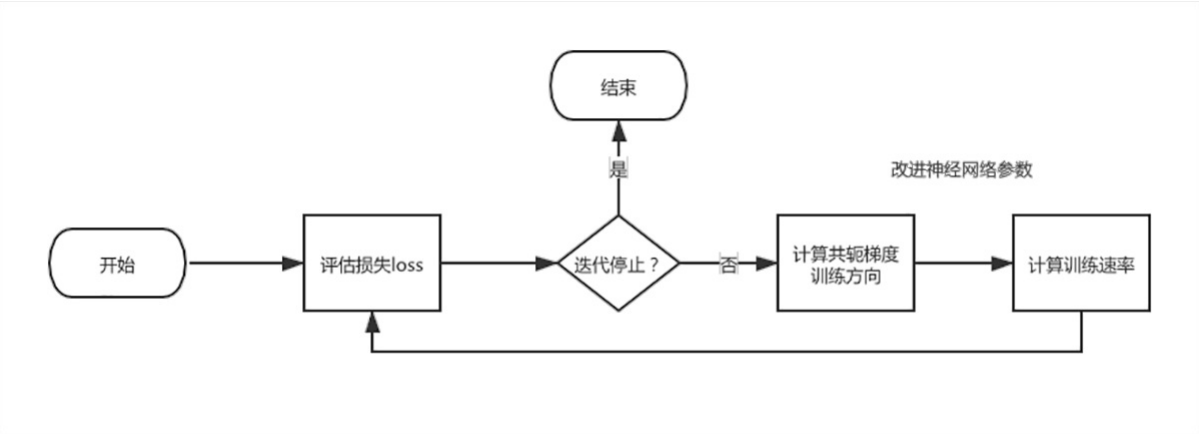
例子）。

```
function x = conjgrad(A, b, x)
    r = b - A * x;
    p = r;
    rsold = r' * r;


    for i = 1:length(b)
        Ap = A * p;
        alpha = rsold / (p' * Ap);
        x = x + alpha * p;
        r = r - alpha * Ap;
        rsnew = r' * r;
        if sqrt(rsnew) < 1e-10
              break;
        end
        p = r + (rsnew / rsold) * p;
        rsold = rsnew;
    end
end
```

## 机器学习中的共轭梯度

共轭梯度法经常被用在训练神经网络中，在实践中已经证明，它是比**梯度下降**更有效的方法，因为就像刚才讲的，它不需要计算黑塞矩阵。那我现在就来讲一讲，使用共轭梯度法的神经网络训练过程。




在整个训练过程中，**参数改进**是重点，当然这也是所有神经网络训练的重点。这个过程是通过计算共轭梯度的训练方向，然后计算训练速率来实现的。在共轭梯度训练算法中，搜索是按共轭方向进行的，也就是说，训练方向是共轭的。所以，收敛速度比梯度下降要快。

现在我们来看训练方向的计算方法。首先，我们设置训练方向向量为$d$，然后，定义一个初始参数向量$w^{0}$，以及一个初始训练方向向量$d^{0}=-g^{0}$，于是，共轭梯度法构造出的训练方向可以表示成：$d^{i+1}=g^{i+1}+d^{i} \cdot \gamma^{i}$。

其中，$g$是梯度向量，$\gamma$是共轭参数。参数通过这个表达式来更新和优化。通常训练速率$\eta$可使用单变量函数优化方法求得。

$$w^{i+1}=w^{i}+d^{i} \cdot \eta^{i}$$

## 本节小结

好了，到这里数值线性代数的迭代法这一讲就结束了，最后我再总结一下前面讲解的内容。

首先，我先解释了数值线性代数，接着再整体讲解了迭代方法。然后，举了一个线性方程组的例子，运用迭代法中的几个比较著名的实践方法：雅可比方法、高斯-赛德尔方法，以及逐次超松弛方法，来解这个线性方程组。最后，我把共轭梯度法用在了深度学习的神经网络训练中。

希望你能在了解了数值线性代数，以及迭代法后，更多地在计算机科学领域中，运用迭代法做矩阵运算。如果有兴趣，你也可以学习其它在实践中使用的迭代法。

## 线性代数练习场

练习时刻到了，这次继续使用第一篇线性方程组里的例子，你可以挑选任意一个迭代法来求解这个线性方程组。

假设，一个旅游团由孩子和大人组成，去程时他们一起坐大巴，每个孩子的票价3元，大人票价3.2元，总共花费118.4元。回程时一起做火车，每个孩子的票价3.5元，大人票价3.6元，总共花费135.2元。请问这个旅游团中有多少孩子和大人？

设小孩人数为$x_{1}$，大人人数为$x_{2}$，于是我们得到了一个方程组：

$$\left\{\begin{array}{c}
3 x_{1}+3.2 x_{2}=118.4 \\\\
3.5 x_{1}+3.6 x_{2}=135.2
\end{array}\right.$$

这个方程组的解是：

$$\left\{\begin{array}{l}
x_{1}=16 \\\\
x_{2}=22
\end{array}\right.$$

你可以计算一下多少次迭代后它能收敛，也就是逼近真实解？以及它的错误$e$又分别是多少？

欢迎在留言区晒出的你的运算过程和结果。如果有收获，也欢迎你把这篇文章分享给你的朋友。