Метод сопряжённых градиентов

Метод сопряжённых градиентов можно относить как к итерационным, так и к точным методам решения систем линейных алгебраических уравнений.

Пусть задана система линейных алгебраических уравнений $Ax = f$, где A является матрицей порядка n, векторы x и f являются n-мерными векторами.

Алгоритм метода сопряжённых градиентов имеет вид:

Шаг 1.1. Задать начальный вектор $x^{(0)}$ и число $\varepsilon > 0$ (допустимый уровень абсолютных погрешностей).

Шаг 1.2. Вычислить вектор невязки начального приближения: $r^{(0)} = Ax^{(0)} - f$.

Шаг 1.3. Положить $s^{(1)} = -r^{(0)}$, $k = 1$ – номер итерации.

Шаг 2.1. Вычислить скаляр

$$\tau_k = -\frac{\left(r^{(k-1)}, s^{(k)}\right)}{\left(As^{(k)}, s^{(k)}\right)}.$$

Шаг 2.2. Вычислить вектор $x^{(k)} = x^{(k-1)} + \tau_k s^{(k)}$ (очередное приближение).

Шаг 2.3. Вычислить вектор $r^{(k)} = Ax^{(k)} - f = r^{(k-1)} + \tau_k As^{(k)}$ (невязка $(k+1)$-го приближения).

Шаг 2.4. Проверить выполнение неравенства $\left\| r^{(k)} \right\|_2 \le \varepsilon$; если оно выполняется, остановить работу алгоритма и вывести результаты.

Шаг 3.1. Вычислить скаляр

$$v_{k+1} = \frac{\left(As^{(k)}, r^{(k)}\right)}{\left(As^{(k)}, s^{(k)}\right)}.$$

Шаг 3.2. Вычислить вектор $s^{(k+1)} = -r^{(k)} + v_{k+1} s^{(k)}$.

Шаг 3.3. Положить $k = k + 1$ и вернуться к шагу 2.1.

Теорема: Метод сопряжённых градиентов позволяет найти точное решение системы $Ax = f$ с симметричной положительно определённой матрицей порядка n не более чем за n итераций.

Замечание: На практике из-за неизбежных погрешностей вычислений метод сопряжённых градиентов может не прийти к точному решению системы ровно за n итераций.

Пример: Методом сопряжённых градиентов найти точное решение системы $Ax = f$, где

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 2 \end{pmatrix}, \quad f = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ -2 \end{pmatrix}$$

За начальное приближение взять нуль-вектор.

Решение

Так матрица A симметричная положительно определённая (проверьте), то метод сопряжённых градиентов позволит найти точное решение не более чем за 3 итерации.

Приняв за начальное приближение $x^{(0)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^{\mathrm{T}}$, далее последовательно вычисляем:

$$r^{(0)} = Ax^{(0)} - f = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ -2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 \\ -2 \\ 2 \end{pmatrix}.$$

1 итерация:

$$s^{(1)} = -r^{(0)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ -2 \end{pmatrix}, \quad As^{(1)} = -Ar^{(0)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 4 \\ -5 \end{pmatrix}, \quad \tau_1 = -\frac{\left(r^{(0)}, s^{(1)}\right)}{\left(As^{(1)}, s^{(1)}\right)} = \frac{\left(r^{(0)}, r^{(0)}\right)}{\left(Ar^{(0)}, r^{(0)}\right)} = \frac{9}{18} = 0.5,$$

$$x^{(1)} = x^{(0)} + \tau_1 s^{(1)} = \begin{pmatrix} 0.5 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad r^{(1)} = r^{(0)} + \tau_1 As^{(1)} = \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ -0.5 \end{pmatrix}, \quad \left\| r^{(1)} \right\|_2 = \frac{\sqrt{5}}{2},$$

$$v_2 = \frac{\left(As^{(1)}, r^{(1)}\right)}{\left(As^{(1)}, s^{(1)}\right)} = \frac{5/2}{18} = \frac{5}{36}, \quad s^{(2)} = -r^{(1)} + v_2 s^{(1)} = \frac{1}{36}\begin{pmatrix} 41 \\ 10 \\ 8 \end{pmatrix}.$$

2 итерация:

$$As^{(2)} = \frac{1}{36}\begin{pmatrix} 90 \\ 2 \\ 47 \end{pmatrix}, \quad \tau_2 = -\frac{\left(r^{(1)}, s^{(2)}\right)}{\left(As^{(2)}, s^{(2)}\right)} = -\frac{-5/4}{227/72} = \frac{90}{227},$$

$$x^{(2)} = x^{(1)} + \tau_2 s^{(2)} = \frac{1}{227}\begin{pmatrix} 216 \\ 252 \\ -207 \end{pmatrix}, \quad r^{(2)} = r^{(1)} + \tau_2 As^{(2)} = \frac{1}{227}\begin{pmatrix} -2 \\ 5 \\ 4 \end{pmatrix}, \quad \left\| r^{(2)} \right\|_2 = \frac{3\sqrt{5}}{227},$$

$$v_3 = \frac{\left(As^{(2)}, r^{(2)}\right)}{\left(As^{(2)}, s^{(2)}\right)} = \frac{1/454}{227/72} = \frac{36}{51529}, \quad s^{(3)} = -r^{(2)} + v_3 s^{(2)} = \frac{1}{51529}\begin{pmatrix} 495 \\ -1125 \\ -900 \end{pmatrix}.$$

3 итерация:

$$As^{(3)} = \frac{1}{51529}\begin{pmatrix} 90 \\ -225 \\ -180 \end{pmatrix}, \quad \tau_3 = -\frac{\left(r^{(2)}, s^{(3)}\right)}{\left(As^{(3)}, s^{(3)}\right)} = -\frac{45/51529}{2025/11697083} = \frac{227}{45},$$

$$x^{(3)} = x^{(2)} + \tau_3 s^{(3)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad r^{(3)} = r^{(2)} + \tau_3 As^{(3)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \left\| r^{(3)} \right\|_2 = 0.$$

Ответ: $x^{(3)} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 \end{pmatrix}^{\mathrm{T}}$.

Задачи

1. Методом сопряжённых градиентов найти точное решение системы $Ax = f$, где

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}, \quad f = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}.$$

За начальное приближение взять вектор $x^{(0)} = (0 \quad 0)^{\mathrm{T}}$.

2. Методом сопряжённых градиентов найти приближённое решение системы $Ax = f$, где

$$A = \begin{pmatrix} 4 & -1 & 2 \\ -1 & 6 & -2 \\ 2 & -2 & 5 \end{pmatrix}, \quad f = \begin{pmatrix} -1 \\ 9 \\ -10 \end{pmatrix}$$

За начальное приближение взять вектор $x^{(0)} = (1 \quad 0 \quad 0)^{\mathrm{T}}$.