Модуль 11.4. Метод сопряженных градиентов (конспект с доказательством)

Сведение решения СЛАУ к решению задачи оптимизации. Сопряженные направления и их свойства. Сведение k-мерной (многомерной) задачи оптимизации к решению k одномерных оптимизационных задач. Описание метода сопряженных градиентов. Основные свойства метода. Комментарии по применению метода

Рассмотрим систему линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) с симметричной положительно определенной матрицей

$$Ax = b \tag{11.43}$$

где $x \in R^n, b \in R^n, A\,(n \times n), A = A^T > 0$.

Через x^* обозначим точное решение СЛАУ, $x^* \in R^n$.

Введем функционал $F(x) = (Ax, x) - 2(b, x)$ и рассмотрим задачу оптимизации

$$F(x) = (Ax, x) - 2(b, x) \to \min \tag{11.44}$$

Используя свойства $F(x)$, несложно показать, что единственным решением (11.44) является тот самый $x^* \in R^n$, который является единственным решением (11.43).

В силу этого свойства методы решения задач оптимизации могут быть использованы для отыскания решения СЛАУ.

Докажем эквивалентность задач

Утверждение 1. Каждая из задач (11.43) и (11.44) имеет единственное решение и эти решения совпадают.

Доказательство

Так как $\det A \neq 0$, решение СЛАУ (11.43) существует и единственно. Обозначим его x^*. Для $\forall x, \forall h \in R^n$ верно

$$\begin{aligned} F(x+h) &= (A(x+h), x+h) - 2(b, x+h) = \\ &= (Ax, x) + (Ah, x) + (Ax, h) + (Ah, h) - 2(b, x) - 2(b, h) = \\ &= F(x) + (Ah, h) + (Ah, x) + (Ax, h) - 2(b, h) \end{aligned} \tag{1}$$

В силу коммутативности скалярного произведения и симметричности матрицы A второе и третье слагаемые равны: $(Ah, x) = (Ax, h)$. Действительно,

$$(Ah, x) = (x, Ah) = (A^T x, h) = (Ax, h). \tag{2}$$

Поэтому для $\forall x, \forall h \in R^n$

$$F(x+h) = F(x) + (Ah, h) + 2(Ax - b, h). \tag{3}$$

Рассмотрим (3) с аргументом $x = x^*$. Тогда для $\forall h \in R^n$

$$F(x^* + h) = F(x^*) + (Ah, h) + 2(Ax^* - b, h) \tag{4}$$

Так как $Ax^* = b$ и для $\forall h \neq 0$ $(Ah, h) > 0$, из (4) для $\forall h \neq 0$ получим

$$F(x^* + h) = F(x^*) + (Ah, h) > F(x^*). \qquad (5)$$

Это означает, что для $\forall x \neq x^*$ $F(x) > F(x^*)$, то есть решение задачи оптимизации (11.44) существует, единственно и совпадает с решением (11.43).

Для решения задачи оптимизации определим сопряженные направления

Определение 1. Пусть $A = A^T > 0$. Направления (векторы) $h', h'' \in R^n, h', h'' \neq 0$ называются **сопряженными** относительно A, если $(Ah', h'') = 0$.

Комментарий

В данном определении направления $h', h'' \in R^n$ «равноправны». Они оба должны быть отличны от нуля и если $(Ah', h'') = 0$, то в силу коммутативности скалярного произведения и симметричности матрицы A получим $(Ah'', h') = 0$. Действительно,

$$(Ah'', h') = (h'', A^T h') = (h'', Ah') = (Ah', h'') = 0$$

Определение 2. Пусть $A = A^T > 0$. Ненулевые направления (векторы) $h^{(0)},...h^{(k-1)} \in R^n$ называются **взаимно сопряженными** относительно A, если $(Ah^{(i)}, h^{(j)}) = 0$ для $\forall i, j = 0, k-1, i \neq j$.

Решение задач оптимизации опирается на линейную независимость сопряженных направлений

Утверждение 2. Если ненулевые направления $h^{(0)},...h^{(k-1)} \in R^n$ взаимно сопряжены относительно $A = A^T > 0$, тогда они линейно независимы. Если ненулевые направления $h^{(0)},...h^{(n-1)} \in R^n$, взятые в количестве n, взаимно сопряжены относительно $A = A^T > 0$, тогда они образуют базис в R^n.

Доказательство (от противного)

Пусть ненулевые взаимно сопряженные направления $h^{(0)},...h^{(k-1)} \in R^n$ линейно зависимы.

Тогда существует такое сопряженное направление $h^{(l)} \neq 0$, которое можно представить в виде линейной комбинации остальных сопряженных направлений:

$$h^{(l)} = \sum_{i=0, i \neq l}^{k-1} \alpha_i h^{(i)}.$$

Так как $A > 0$ и $h^{(l)} \neq 0$, имеет место строгое неравенство $(Ah^{(l)}, h^{(l)}) > 0$.

В силу взаимной сопряженности направлений получим $(Ah^{(l)}, h^{(l)}) = 0$. Действительно,

$$(Ah^{(l)}, h^{(l)}) = (Ah^{(l)}, \sum_{i=0, i \neq l}^{k-1} \alpha_i h^{(i)}) = \sum_{i=0,\, i \neq l}^{k-1} \alpha_i (Ah^{(l)}, h^{(i)}) = 0.$$

Обнаружено противоречие. Значит, ненулевые взаимно сопряженные направления $h^{(0)}, \dots h^{(k-1)} \in R^n$ линейно независимы.

Если $A = A^T > 0$ и найдутся n ненулевых направлений, взаимно сопряженных относительно A, то указанные направления в силу их линейной независимости и в силу их количества образуют базис в R^n.

Решение задач оптимизации строится на базе сопряженных направлений

Теорема 10. Пусть $h^{(0)}, \dots h^{(k-1)} \in R^n$, $k \leq n$, представляют собой ненулевые взаимно сопряженные направления относительно $A = A^T > 0$ (они линейно независимы) и пусть $x^{(0)} \in R^n$.

Определим в R^n линейное многообразие $L_k(x_0, h^{(0)}, \dots. h^{(k-1)})$ размерности k, элементами которого являются суммы направления (вектора) $x^{(0)} \in R^n$ и линейной комбинации сопряженных направлений $h^{(0)}, \dots h^{(k-1)} \in R^n$, то есть

$x = x^{(0)} + \alpha_0 h^{(0)} + \dots + \alpha_{k-1} h^{(k-1)}$, где $\alpha_i \in R, i = 0, \dots k-1$,

Тогда решением *k*-мерной (многомерной) задачи оптимизации

$$F(x) = \underset{x \in L_k(x^{(0)},\, h^{(0)}, \dots\, h^{(k-1)})}{\to} \min \qquad (11.45)$$

(такую задачу называют задачей минимизации на многообразии) является направление

$x^{(k)} = x^{(0)} + \alpha_0^* h^{(0)} + \dots + \alpha_{k-1}^* h^{(k-1)}$,

$x^{(k)} \in L_k(x_0, h^{(0)}, \dots. h^{(k-1)})$,

где коэффициенты $\alpha_s^*, s = 0, \dots k-1$, есть решения k одномерных задач оптимизации

$$\alpha_s^2 (Ah^{(s)}, h^{(s)}) + 2\alpha_s (Ax^{(0)} - b, h^{(s)}) \underset{\alpha_s \in R}{\to} \min, \quad s = 0, k-1. \qquad (11.46)$$

(в каждой из задач минимизируется значение полинома степени 2 с аргументом α_s).

При этом коэффициенты $\alpha_s^*, s = 0, \dots k-1$ вычисляются как аргументы вершины параболы:

$$\alpha_s^* = -\frac{(Ax^{(0)} - b, h^{(s)})}{(Ah^{(s)}, h^{(s)})}, s = 0, \dots k-1 \qquad (11.47)$$

Доказательство

Пусть $A = A^T > 0$ и ненулевые направления $h^{(0)},...h^{(k-1)} \in R^n$ взаимно сопряжены относительно A. По условию теоремы количество взаимно сопряженных направлений равно $k \le n$ и в соответствии с утверждением 2 они линейно независимы. Пусть выбран некоторый $x^{(0)} \in R^n$.

Определим в R^n линейное многообразие размерности k и обозначим его через $L_k(x_0, h^{(0)},....h^{(k-1)})$. Элементы данного многообразия имеют вид

$$x = x^{(0)} + \alpha_0 h^{(0)} + ... + \alpha_{n-1} h^{(k-1)},$$

где $\alpha_i \in R, i = 0,...k-1$ – числа, $h^{(0)},...h^{(k-1)} \in R^n$ – ненулевые линейно независимые направления, $x^{(0)} \in R^n$ – выбранный выше элемент.

Рассмотрим на линейном многообразии $L_k(x^{(0)}, h^{(0)},....h^{(k-1)})$ задачу оптимизации (11.45):

$$F(x) \underset{x \in L_k(x^{(0)},\, h^{(0)},...\, h^{(k-1)})}{\longrightarrow} \min$$

В силу формулы (3) для $\forall x \in L_k(x^{(0)}, h^{(0)},....h^{(k-1)})$ верно представление

$$F(x) = F(x^{(0)} + \sum_{s=0}^{k-1} \alpha_s h^{(s)}) =$$

$$= F(x^{(0)}) + (A\sum_{s=0}^{k-1} \alpha_s h^{(s)}, \sum_{l=0}^{k-1} \alpha_l h^{(l)}) + 2(Ax^{(0)} - b, \sum_{s=0}^{k-1} \alpha_s h^{(s)})$$

В силу взаимной сопряженности направлений

$$(A\sum_{s=0}^{k-1} \alpha_s h^{(s)}, \sum_{l=0}^{k-1} \alpha_l h^{(l)}) = \sum_{s=0}^{k-1} \alpha_s^2 (Ah^{(s)}, h^{(s)}).$$

Тогда функционал $F(x)$ принимает вид

$$F(x) = F(x^{(0)}) + \sum_{s=0}^{k-1} \alpha_s^2 (Ah^{(s)}, h^{(s)}) + 2\sum_{s=0}^{k-1} \alpha_s (Ax^{(0)} - b, h^{(s)}).$$

Слагаемые, зависящие от одного и того же коэффициента α_s и одного и того же сопряженного направления $h^{(s)} \in R^n$, можно сгруппировать:

$$F(x) = F(x^{(0)}) + \sum_{s=0}^{k-1} \{\alpha_s^2 (Ah^{(s)}, h^{(s)}) + 2\alpha_s (Ax^{(0)} - b, h^{(s)})\}.$$

Теперь каждое слагаемое, указанное в фигурных скобках, зависит только от одного коэффициента α_s и только одного направления $h^{(s)} \in R^n$.

Поэтому решение k-мерной задачи оптимизации (11.45) сводится к независимому решению k одномерных задач оптимизации вида (11.46):

$$\alpha_s^2(Ah^{(s)}, h^{(s)}) + 2\alpha_s(Ax^{(0)} - b, h^{(s)}) \underset{\alpha_s \in R}{\to} \min, \; s = \overline{0, k-1}$$

Каждая из (11.46) есть задача минимизации значения полинома степени 2 (минимизируется полином с аргументом $\alpha_s \in R$).

Так как в каждой из задач вида (11.46) $h^{(s)} \neq 0$ и $(Ah_s, h_s) > 0$, ветви параболы направлены вверх и решением задачи является вершина параболы. Ее аргумент

$$\alpha_s^* = -\frac{2(Ax^{(0)} - b, h^{(s)})}{2(Ah^{(s)}, h^{(s)})} = -\frac{(Ax^{(0)} - b, h^{(s)})}{(Ah^{(s)}, h^{(s)})},$$

Минимальное значение функционала из задачи (11.46) составит

$$\left[\alpha_s^*\right]^2(Ah^{(s)}, h^{(s)}) + 2\alpha_s^*(Ax^{(0)} - b, h^{(s)}) = -\frac{(Ax^{(0)} - b, h^{(s)})^2}{(Ah^{(s)}, h^{(s)})}.$$

Таким образом, решением задачи (11.45) является $x^{(k)} = x^{(0)} + \alpha_0^* h^{(0)} + \ldots + \alpha_{k-1}^* h^{(k-1)}$ с коэффициентами (11.47), а минимальное значение функционала из задачи (11.45) составит

$$F(x^{(k)}) = F(x^{(0)}) - \sum_{s=0}^{k-1} \frac{(Ax^{(0)} - b, h^{(s)})^2}{(Ah^{(s)}, h^{(s)})}.$$

Теорема доказана.

Комментарий

Очевидно, что $F(x^{(k)}) \leq F(x^{(0)})$. При этом $F(x^{(k)}) = F(x^{(0)})$ в случаях:

1) $x^{(0)} \in R^n$ является решением $Ax = b$, то есть $x^{(0)} = x^*$

2) $x^{(0)} \in R^n$ не является решением $Ax = b$, но невязка $Ax^{(0)} - b$ ортогональна каждому из сопряженных направлений $h^{(0)}, \ldots h^{(k-1)} \in R^n$. Тогда ненулевая погрешность $z^{(0)} = x^{(0)} - x^*$ сопряжена с каждым из $h^{(0)}, \ldots h^{(k-1)} \in R^n$ и система взаимно сопряженных направлений может быть дополнена направлением $h^{(k)} = z^{(0)} = x^{(0)} - x^*$. Тогда значение функционала $F(x)$ может быть уменьшено на линейном многообразии более высокой размерности.

Рассмотрим следствие из теоремы: оно показывает, что с помощью сопряженных направлений решение (11.44) и (11.43) сводится к явному решению задач одномерной оптимизации

Следствие. Пусть $h^{(0)},...h^{(n-1)} \in R^n$ представляют собой ненулевые взаимно сопряженные относительно $A = A^T > 0$ направления и пусть $x^{(0)} \in R^n$. Тогда указанные выше взаимно сопряженные направления $h^{(0)},...h^{(n-1)} \in R^n$ образуют базис в R^n, линейное многообразие $L_n(x_0, h^{(0)},....h^{(n-1)})$ совпадает с пространством R^n, решением *n*-мерной (многомерной) задачи оптимизации

$$F(x) \underset{x \in R^n}{\to} \min$$

является направление

$$x^* = x^{(0)} + \alpha_0^* h^{(0)} + ... + \alpha_{k-1}^* h^{(n-1)}$$

где коэффициенты $\alpha_s^*, s = 0,...n-1$, есть решения n одномерных задач оптимизации

$$\alpha_s^2 (Ah^{(s)}, h^{(s)}) + 2\alpha_s (Ax^{(0)} - b, h^{(s)}) \underset{\alpha_s \in R}{\to} \min, \ s = 0, n-1. \qquad (11.48)$$

и вычисляются как аргументы вершины параболы:

$$\alpha_s^* = -\frac{(Ax^{(0)} - b, h^{(s)})}{(Ah^{(s)}, h^{(s)})}, s = 0,...n-1 \qquad (11.49)$$

Комментарий

Для того, чтобы решение многомерной задачи оптимизации (11.44) было сведено к явному решению нескольких одномерных оптимизационных задач, нужно знать сопряженные направления

Описание метода сопряженных градиентов

Идея пошагового построения ненулевых взаимно сопряженных направлений реализована в **методе сопряженных градиентов**. В качестве $x^{(0)} \in R^n$ выбирают элемент R^n, «удобный» как начальное приближение к решению x^*.

Первый шаг метода

Приближение $x^{(1)} \in R^n$ найдем по формуле

$$x^{(1)} = x^{(0)} + \alpha_0 h^{(0)} \qquad (11.50)$$

где направление (вектор) $h^{(0)} \in R^n$ определяется начальной невязкой:

$$h^{(0)} = -r^{(0)} = Ax^{(0)} - b. \qquad (11.51)$$

Чтобы найти α_0, решаем одномерную задачу оптимизации

$$F(x^{(0)} + \alpha_0 h^{(0)}) \underset{\alpha_0 \in R}{\to} \min \qquad (11.52)$$

(задача минимизации по аргументу α_0, где $x^{(0)}, h^{(0)} \in R^n$ известны).

Так как

$$F(x^{(0)}+\alpha_0 h^{(0)})=F(x^{(0)})+\alpha_0^2(Ah^{(0)},h^{(0)})+2\alpha_0(Ax^{(0)}-b,h^{(0)})$$

(полином второй степени относительно α_0), решением (11.52) является

$$\alpha_0=-\frac{(Ax^{(0)}-b,h^{(0)})}{(Ah^{(0)},h^{(0)})} \tag{11.53}$$

(аргумент вершины параболы).

Второй шаг метода

Приближение $x^{(2)}\in R^n$ найдем по формуле

$$x^{(2)}=x^{(1)}+\alpha_1 h^{(1)} \tag{11.54}$$

где направление (вектор) $h^{(1)}\in R^n$ определяется невязкой предыдущего шага

$$r^{(1)}=Ax^{(1)}-b$$

и предыдущим направлением $h^{(0)}$:

$$h^{(1)}=-r^{(1)}+\beta_1 h^{(0)} \tag{11.55}$$

Нужно, чтобы $h^{(1)},h^{(0)}$ были сопряженными относительно $A=A^T>0$:

$$(Ah^{(0)},h^{(1)})=0.$$

Получим условие

$$(Ah^{(0)},h^{(1)})=(Ah^{(0)},h^{(0)})\beta_1-(Ah^{(0)},r^{(1)})=0,$$

откуда следует

$$\beta_1=\frac{(Ah^{(0)},r^{(1)})}{(Ah^{(0)},h^{(0)})} \tag{11.56}$$

Чтобы найти α_1, решаем одномерную задачу оптимизации

$$F(x^{(1)}+\alpha_1 h^{(1)})\underset{\alpha_1\in R}{\to}\min \tag{11.57}$$

(задача минимизации по аргументу α_1, где $x^{(1)},h^{(1)}\in R^n$ известны). Так как

$$F(x^{(1)}+\alpha_1 h^{(1)})=F(x^{(1)})+\alpha_1^2(Ah^{(1)},h^{(1)})+2\alpha_1(Ax^{(1)}-b,h^{(1)})$$

(полином второй степени относительно α_1), решением (11.57) является

$$\alpha_1=-\frac{(Ax^{(1)}-b,h^{(1)})}{(Ah^{(1)},h^{(1)})} \tag{11.58}$$

(аргумент вершины параболы).

Третий шаг и далее

Шаг $s+1$, где $s \geq 2$ (т.е. третий шаг и далее) аналогичен шагу 2. Приближение $x^{(s+1)} \in R^n$ находим в виде

$$x^{(s+1)} = x^{(s)} + \alpha_s h^{(s)} \qquad (11.59)$$

где направление (вектор) $h^{(s)} \in R^n$ определяется невязкой предыдущего шага

$$r^{(s)} = Ax^{(s)} - b$$

и предыдущим направлением $h^{(s-1)}$:

$$h^{(s)} = -r^{(s)} + \beta_s h^{(s-1)} \qquad (11.60)$$

Нужно, чтобы $h^{(s)}, h^{(s-1)}$ были сопряженными относительно $A = A^T > 0$:

$$(Ah^{(s-1)}, h^{(s)}) = 0.$$

Получим условие

$$(Ah^{(s-1)}, h^{(s)}) = (Ah^{(s-1)}, h^{(s-1)})\beta_s - (Ah^{(s-1)}, r^{(s)}) = 0$$

откуда следует

$$\beta_s = \frac{(Ah^{(s-1)}, r^{(s)})}{(Ah^{(s-1)}, h^{(s-1)})} \qquad (11.61)$$

Чтобы найти α_s, решаем одномерную задачу оптимизации

$$F(x^{(s)} + \alpha_s h^{(s)}) \underset{\alpha_s \in R}{\rightarrow} \min \qquad (11.62)$$

(задача минимизации по аргументу α_s, где $x^{(s)}, h^{(s)} \in R^n$ известны).

Так как

$$F(x^{(s)} + \alpha_s h^{(s)}) = F(x^{(s)}) + \alpha_s^2 (Ah^{(s)}, h^{(s)}) + 2\alpha_s (Ax^{(s)} - b, h^{(s)})$$

(полином второй степени относительно α_s), решением (11.62) является

$$\alpha_s = -\frac{(Ax^{(s)} - b, h^{(s)})}{(Ah^{(s)}, h^{(s)})} \qquad (11.63)$$

(аргумент вершины параболы).

Результат работы метода

На шаге $s+1$ будет построен $x^{(s+1)} \in R^n$, его связь с начальным приближением $x^{(0)} \in R^n$ описывается формулой

$$x^{(s+1)} = x^{(s)} + \alpha_s h^{(s)} = x^{(s-1)} + \alpha_{s-1} h^{(s-1)} + \alpha_s h^{(s)} = .. \\ = x^{(0)} + \alpha_0 h^{(0)} + \ldots + \alpha_s h^{(s)} \qquad (11.64)$$

Здесь сопряженные направления $h^{(i)}, i = 0,\ldots s$ вычислены по формулам (11.51), (11.55) и (11.60), коэффициенты $\alpha_i, i = 0,\ldots s$ вычислены по формулам (11.53), (11.58) и (11.63), коэффициенты $\beta_i, i = 1,\ldots s$, необходимые для расчета сопряженных направлений – по формулам (11.56) и (11.61).

Основные свойства метода

Свойство 1. Если на шаге $s+1$ получено $r^{(s+1)} = 0$, то $x^{(s+1)}$ – точное решение СЛАУ (11.43) и задачи оптимизации (11.44).

Свойство 2. Если в процессе работы метода получены невязки $r^{(0)},\ldots\ r^{(s+1)} \neq 0$ (то есть за $s+1$ шагов точное решение задач (11.43) и (11.44) еще не найдено), тогда:

– невязки $r^{(0)},\ldots\ r^{(s+1)} \in R^n$ взаимно ортогональны;

– векторы $h^{(0)},\ldots h^{(s)} \in R^n$ взаимно сопряжены;

– значение коэффициента α_s, заданного формулой (11.53), (11.58) или (11.63), совпадает со значением, заданным формулой (11.49), то есть.

$$\alpha_s = -\frac{(Ax^{(s)} - b, h^{(s)})}{(Ah^{(s)}, h^{(s)})} = -\frac{(Ax^{(0)} - b, h^{(s)})}{(Ah^{(s)}, h^{(s)})};$$

– приближение $x^{(s+1)} \in R^n$ обеспечивает минимальное значение функционала $F(x) = (Ax, x) - 2(b, x)$ на многообразии $L_{s+1}(x_0, h^{(0)},\ldots.h^{(s)})$.

Свойство 3. Не позднее чем на шаге n метод сопряженных градиентов строит точное решение СЛАУ (11.43) и задачи оптимизации (11.44).

Комментарии к параграфу 11.4

1) Метод сопряженных градиентов может использоваться как прямой метод или как итерационный.

Если на шаге n или ранее получено точное решение задач (11.43) и (11.44) – значит, метод использован как прямой.

Если каждое $x^{(s)}$ рассматривается как приближенное решение задач (11.43) и (11.44) – метод используется как итерационный.

2) Приближение $x^{(s+1)}$ лучше, чем предыдущее приближение $x^{(s)}$, так как обеспечивает минимальное значение функционала $F(x)$ на многообразии $L_{s+1}(x_0, h^{(0)},\ldots.h^{(s)})$ размерности $s+1$, включающем предыдущее многообразие $L_s(x_0, h^{(0)},\ldots.h^{(s-1)})$ размерности s, и соответственно значение функционала $F(x)$ с каждым шагом убывает (не возрастает).

3) В силу накопления вычислительной погрешности взаимно сопряженные направления строятся приближенно и при большом числе шагов s векторы

$$h^{(0)},...h^{(s)} \in R^n$$

теряют свойство взаимной сопряженности.

Если есть проблемы отыскания $x^{(s+1)}$, текущее приближение $x^{(s)}$ можно принять за начальное приближение и запустить метод заново (то есть заново строить взаимно сопряженные направления).

4) В качестве численного решения СЛАУ (11.43) и задачи оптимизации (11.44) может быть выбрано такое приближение $x^{(s)}$, для которого:

– выполнен критерий отыскания точного решения: $r^{(s)} = 0$, то есть $x^{(s)} = x^*$,

– либо выполнен критерий остановки по точности: $\| x^{(s)} - x^{(s-1)} \| \le \varepsilon$;

– либо выполнен критерий остановки по числу шагов: $s + 1 > N_{max}$;

– решение СЛАУ найдено с достаточно малой невязкой: $\| r^{(s)} \| \le \varepsilon^*$ и др.

5) погрешность решения СЛАУ на шаге s можно оценить по текущей невязке, используя норму обратной матрицы или ее оценку:

$\| z^{(s)} \| \le \| A^{-1} \| \cdot \| r^{(s)} \|$ (нормы матрицы и вектора должны быть согласованы):

6) оценки погрешности метода на шаге s по *начальной невязке* см. в литературе.