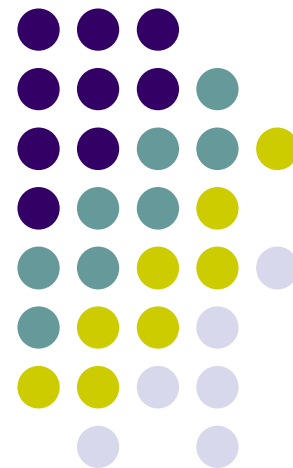


共轭梯度法

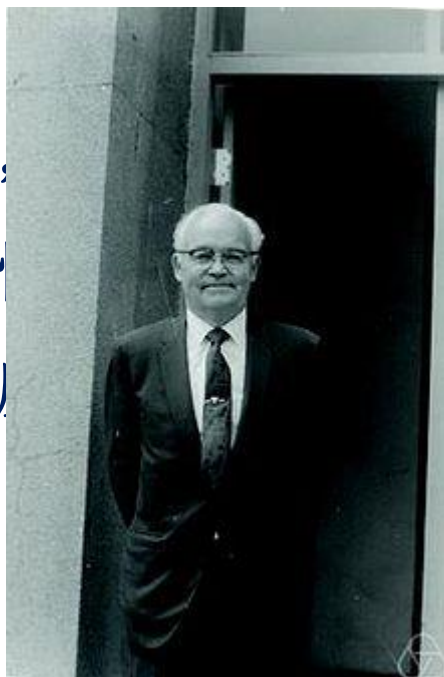




一、线性共轭方向法

共轭梯度法： Hestenes、Stiefel (1952) 在求解大规模线性方程组时创立的一种迭代算法。

后来，
非线性
共轭梯度



Hestenes

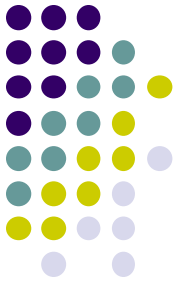
1964
创立



Stiefel



Fletcher



问题引出

线性方程组

对称正定

$$Ax = b$$

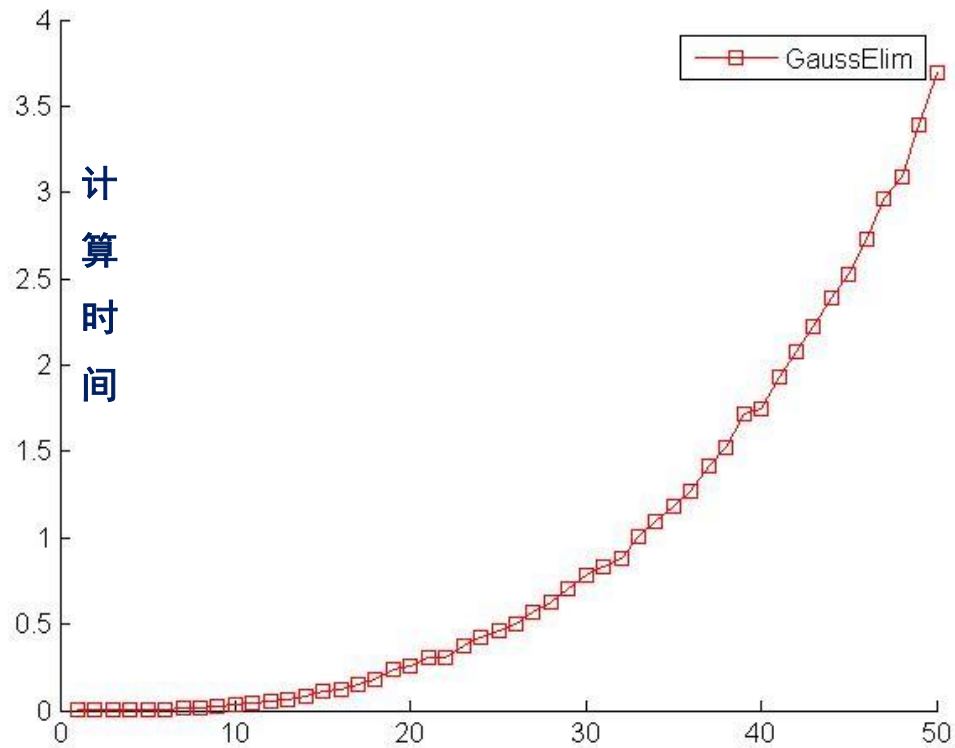
经典算法：

Gauss消元法、系数矩阵三角分解法

算法缺陷：计算时间随问题规模急速增长。



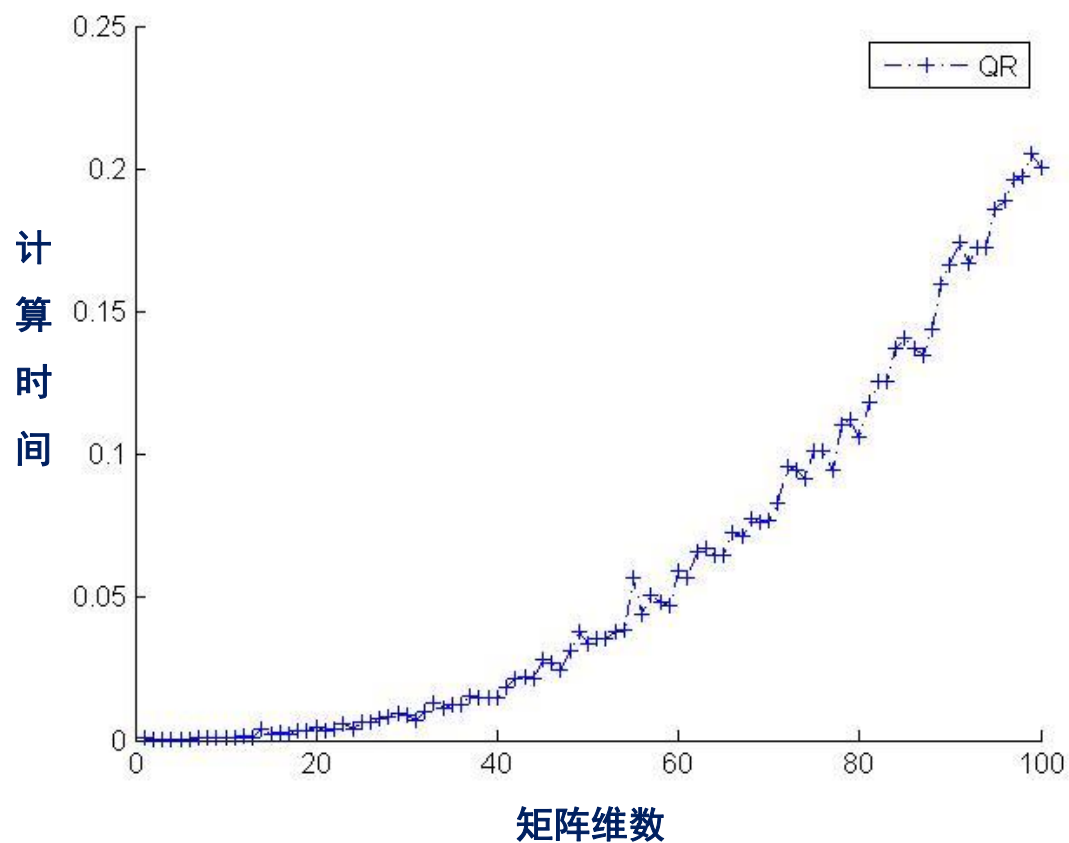
Gauss消元法



矩阵维数

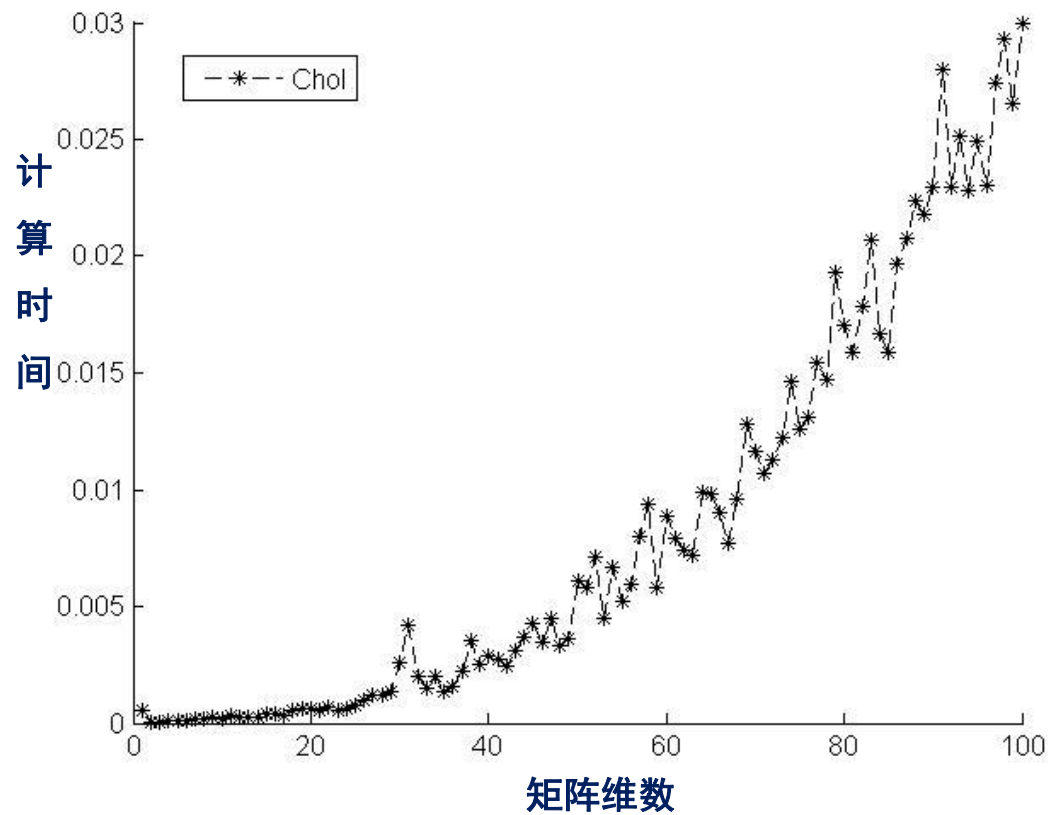


系数矩阵QR分解法





系数矩阵Cholesky分解法





问题： 如何求解大规模对称线性方程组问题？

$$Ax = b$$

对称正定

利用系数矩阵性质

严格凸二次规划

$$\min_x \frac{1}{2} x^T A x - b^T x$$

最速下降算法

太慢！

牛顿算法

太累！

能否利用问题结构，构造新算法？

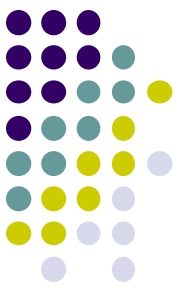
线性共轭方向法



线性共轭方向法

共轭方向： 对对称正定阵 A ，若 $d_1, d_2 \in \mathbb{R}^n$ 满足 $d_1^T A d_2 = 0$
则称 d_1, d_2 关于矩阵 A 共轭，并称其为关于 A 的共轭方向.

共轭是正交的推广.



线性共轭方向的推广

若向量组 d_1, d_2, \dots, d_n 关于对称正定阵 A 两两共轭，
即满足

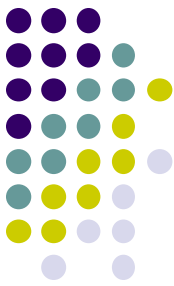
$$d_i^T A d_j = 0, \quad 1 \leq i \neq j \leq n,$$

则称该向量组关于矩阵 A 共轭。

性质 若向量组 d_1, d_2, \dots, d_n 关于矩阵 A 共轭，则它们线性无关。

证明： 利用线性无关的定义。





线性共轭方向法 $\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} - \mathbf{b}^T \mathbf{x}$

步1、初始点 \mathbf{x}_0 ，搜索方向 \mathbf{d}_0 满足 $\langle \mathbf{d}_0, \mathbf{g}_0 \rangle < 0$ ，
终止参数 $\varepsilon \geq 0$ 令 $k = 0$ 。

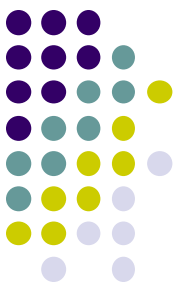
步2、若 $\|\mathbf{g}_k\| \leq \varepsilon$ ，算法终止；否则，进入下一步。

步3、计算最优步长 $\alpha_k = \arg \min_{\alpha \geq 0} \{f(\mathbf{x}_k + \alpha \mathbf{d}_k)\}$

令 $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{d}_k$

步4、构造 \mathbf{d}_{k+1} ，使其与 $\mathbf{d}_0, \mathbf{d}_1, \dots, \mathbf{d}_k$ 关于矩阵 \mathbf{A} 共轭。

令 $k = k + 1$ 返回步2。



二次终止性

定理 对严格凸二次函数 $f(x) = \frac{1}{2}x^T A x - b^T x$, 向量组 d_0, d_1, \dots, d_{n-1} 关于 A 共轭。共轭方向法产生点列 $\{x_k\}$ 。

则对任意 $0 \leq k \leq n-1$, x_{k+1} 是目标函数在仿射集 $x_0 + \text{span}[d_0, d_1, \dots, d_k]$ 上的最小值点, 算法至多 n 步迭代后终止。

有关定义

子空间 $\text{span}[d_0, d_1, d_1, \dots, d_k] = \left\{ \sum_{i=0}^k \alpha_i d_i \mid \alpha_i \in R, i = 0, 1, \dots, k \right\}$

仿射集 将子空间平移后得到的集合

$$x_0 + \text{span}[d_0, d_1, d_1, \dots, d_k] = \left\{ x_0 + \sum_{i=0}^k \alpha_i d_i \mid \alpha_i \in R, i = 0, 1, \dots, k \right\}$$



共轭方向的构造

严格凸二次函数 $f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} - \mathbf{b}^T \mathbf{x}$,

令 $\mathbf{d}_0 = -\mathbf{g}_0$, $\mathbf{x}_1 = \mathbf{x}_0 + \alpha_0 \mathbf{d}_0$,

令 $\mathbf{d}_1 = -\mathbf{g}_1 + \beta_0 \mathbf{d}_0$,

最优步长

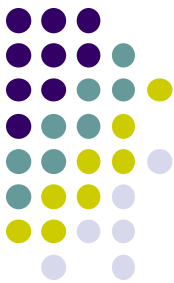
待定参数

选择参数 β_0 满足共轭条件 $\mathbf{d}_1^T \mathbf{A} \mathbf{d}_0 = 0$

解之得
$$\beta_0 = \frac{\mathbf{g}_1^T \mathbf{A} \mathbf{d}_0}{\mathbf{d}_0^T \mathbf{A} \mathbf{d}_0} = \frac{\mathbf{g}_1^T (\mathbf{g}_1 - \mathbf{g}_0)}{\mathbf{d}_0^T (\mathbf{g}_1 - \mathbf{g}_0)} = \frac{\mathbf{g}_1^T \mathbf{g}_1}{\mathbf{g}_0^T \mathbf{g}_0}.$$

由此得共轭方向 $\mathbf{d}_1 = -\mathbf{g}_1 + \beta_0 \mathbf{d}_0$,

精确线搜索 $\mathbf{x}_2 = \mathbf{x}_1 + \alpha_1 \mathbf{d}_1$



待定参数

待定参数

$$\text{令 } \mathbf{d}_2 = -\mathbf{g}_2 + \beta_0 \mathbf{d}_0 + \beta_1 \mathbf{d}_1$$

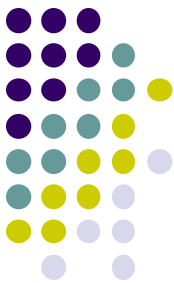
选择参数 β_0, β_1 ，使满足共轭条件

$$\begin{cases} \mathbf{d}_2^T \mathbf{A} \mathbf{d}_0 = 0 \\ \mathbf{d}_2^T \mathbf{A} \mathbf{d}_1 = 0 \end{cases} \quad \longrightarrow \quad \begin{cases} \beta_0 = \frac{\mathbf{g}_2^T \mathbf{A} \mathbf{d}_0}{\mathbf{d}_0^T \mathbf{A} \mathbf{d}_0} = 0 \\ \beta_1 = \frac{\mathbf{g}_2^T \mathbf{A} \mathbf{d}_1}{\mathbf{d}_1^T \mathbf{A} \mathbf{d}_1} = \frac{\mathbf{g}_2^T (\mathbf{g}_2 - \mathbf{g}_1)}{\mathbf{d}_1^T (\mathbf{g}_2 - \mathbf{g}_1)} = \frac{\mathbf{g}_2^T \mathbf{g}_2}{\mathbf{g}_1^T \mathbf{g}_1} \end{cases}$$

新的共轭方向 $\mathbf{d}_2 = -\mathbf{g}_2 + \beta_1 \mathbf{d}_1$

$$\beta_1 = \frac{\mathbf{g}_2^T (\mathbf{g}_2 - \mathbf{g}_1)}{\mathbf{d}_1^T (\mathbf{g}_2 - \mathbf{g}_1)} = \frac{\mathbf{g}_2^T \mathbf{g}_2}{\mathbf{g}_1^T \mathbf{g}_1}$$

精确线搜索 $\mathbf{x}_3 = \mathbf{x}_2 + \alpha_2 \mathbf{d}_2$



对第 k 次迭代, 令

$$\mathbf{d}_k = -\mathbf{g}_k + \beta_0 \mathbf{d}_0 + \beta_1 \mathbf{d}_1 + \beta_2 \mathbf{d}_2 + \cdots + \beta_{k-1} \mathbf{d}_{k-1}$$

确定参数 $\beta_0, \beta_1, \beta_2, \cdots, \beta_{k-1}$ 使满足共轭条件

$$\begin{cases} \mathbf{d}_k^T \mathbf{A} \mathbf{d}_0 = 0 \\ \mathbf{d}_k^T \mathbf{A} \mathbf{d}_1 = 0 \\ \vdots \\ \mathbf{d}_k^T \mathbf{A} \mathbf{d}_{k-1} = 0 \end{cases}$$



$$\begin{aligned} \beta_i &= 0, \quad i = 0, 1, \cdots, k-2, \\ \beta_{k-1} &= \frac{\mathbf{g}_k^T (\mathbf{g}_k - \mathbf{g}_{k-1})}{\mathbf{d}_{k-1}^T (\mathbf{g}_k - \mathbf{g}_{k-1})} = \frac{\mathbf{g}_k^T \mathbf{g}_k}{\mathbf{g}_{k-1}^T \mathbf{g}_{k-1}}. \end{aligned}$$

线性共轭梯度法



$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{d}_k,$$

$$\mathbf{d}_k = -\mathbf{g}_k + \beta_{k-1} \mathbf{d}_{k-1}$$

$$\beta_{k-1} = \frac{\mathbf{g}_k^T \mathbf{g}_k}{\mathbf{g}_{k-1}^T \mathbf{g}_{k-1}}$$



$$\mathbf{d}_k = -\mathbf{g}_k$$

$$+ \beta_{k-1} \mathbf{d}_{k-1}$$



线性共轭梯度法

初始步：取 $d_{-1} = 0$, 初始点 x_0 , 终止参数 $\varepsilon \geq 0$. 令

$$d_0 = -g_0 \quad k = 0$$

迭代步：若 $\|g_k\| \leq \varepsilon$, 算法终止; 否则, 计算

$$d_k = -g_k + \beta_{k-1} d_{k-1} \quad \text{其中,} \quad \beta_{k-1} = \frac{g_k^T g_k}{g_{k-1}^T g_{k-1}}$$

$$\text{令 } x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k, \quad k = k + 1$$



线性共轭梯度法性质

定理 对严格凸二次函数 $f(x) = \frac{1}{2}x^T A x - b^T x$

最优步长规则下的共轭梯度法经 $m \leq n$ 步迭代后终止, 且对任意的 $0 \leq k \leq m-1$, 成立

$$d_k^T A d_j = 0, \quad g_k^T g_j = g_k^T d_j = 0, \quad j \leq k-1,$$

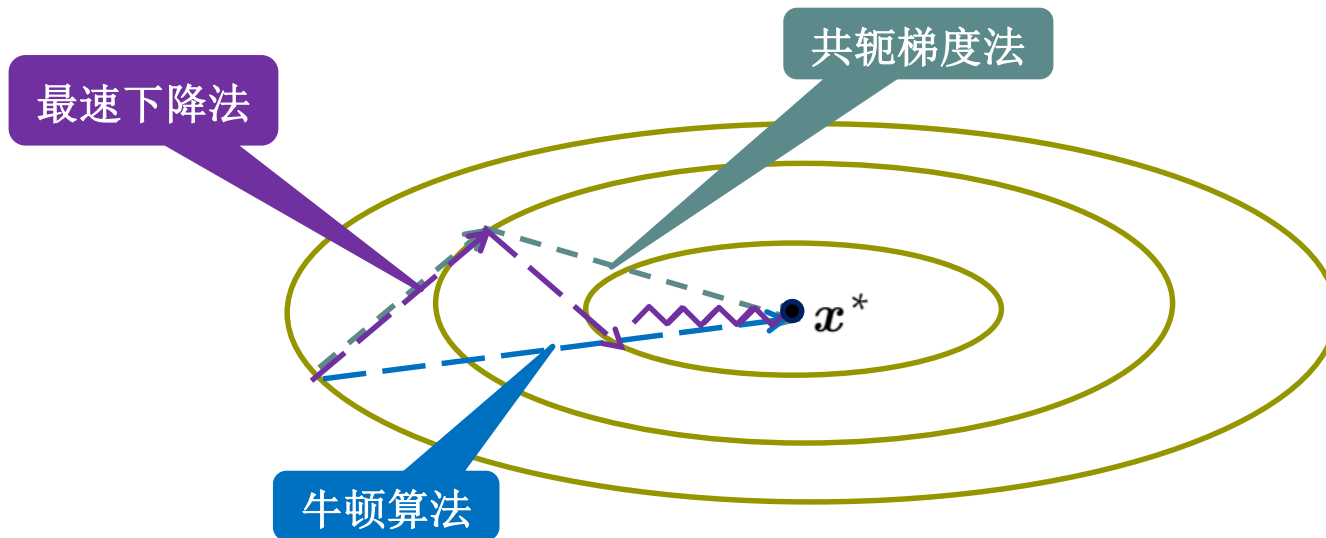
$$d_k^T g_k = -g_k^T g_k,$$

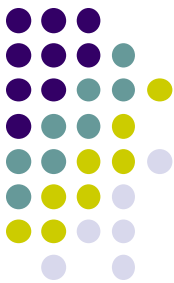
搜索方向
的下降性

搜索方向的正交性



最速下降法、牛顿法、共轭梯度法的比较





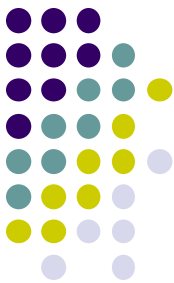
例 $\min x_1^2 + \frac{1}{2}x_2^2 + \frac{1}{2}x_3^2$

解：取初始点 $\mathbf{x}_0 = (1; 1; 1)$ 。迭代过程：

| k | \mathbf{x}_k | \mathbf{g}_k | β_{k-1} | \mathbf{d}_k | α_k |
|-----|---|---|----------------|-----------------------------|---------------|
| 0 | $(1, 1, 1)^T$ | $(2, 1, 1)^T$ | 0 | $-(2, 1, 1)^T$ | $\frac{3}{5}$ |
| 1 | $\left(-\frac{1}{5}, \frac{2}{5}, \frac{2}{5}\right)^T$ | $\left(-\frac{2}{5}, \frac{2}{5}, \frac{2}{5}\right)^T$ | $\frac{2}{25}$ | $\frac{6}{25}(1, -2, -2)^T$ | $\frac{5}{6}$ |
| 2 | $(0, 0, 0)^T$ | | | | |

观察：算法两步迭代后终止。

问题：算法的迭代步数与什么有关？



收敛速度

定理 对严格凸二次函数 $f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} - \mathbf{b}^T \mathbf{x}$
若系数矩阵 \mathbf{A} 有 r 个相异特征根, 则最优步长
规则下的共轭梯度法至多 r 步迭代后终止。

定理 对严格凸二次函数 $f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} - \mathbf{b}^T \mathbf{x}$
最优步长规则下的共轭梯度法产生的迭代点列满足

$$\|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*\|_A \leq \left(\frac{\kappa(\mathbf{A}) - 1}{\kappa(\mathbf{A}) + 1} \right)^k \|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}^*\|_A.$$

其中, \mathbf{x}^* 为目标函数的最小值点,

$$\text{矩阵 } \mathbf{A} \text{ 的条件数 } \kappa(\mathbf{A}) = \|\mathbf{A}\| \|\mathbf{A}^{-1}\| = \frac{\lambda_{\max}(\mathbf{A})}{\lambda_{\min}(\mathbf{A})}$$



线性共轭梯度法小结

对大规模线性方程组问题，线性共轭梯度法计算量和储存量小，快速收敛，计算效率高于传统的Gauss消元法和分解算法。

对于小规模线性方程组问题, Gauss消元法更简便.



三、非线性共轭梯度法

严格凸二次函数 $f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} - \mathbf{b}^T \mathbf{x},$

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{d}_k, \quad \mathbf{d}_k = -\mathbf{g}_k + \beta_{k-1} \mathbf{d}_{k-1}.$$

$$\beta_{k-1} = \frac{\mathbf{g}_k^T (\mathbf{g}_k - \mathbf{g}_{k-1})}{\mathbf{d}_{k-1}^T (\mathbf{g}_k - \mathbf{g}_{k-1})} \quad \text{或} \quad \beta_{k-1} = \frac{\mathbf{g}_k^T \mathbf{g}_k}{\mathbf{g}_{k-1}^T \mathbf{g}_{k-1}}$$

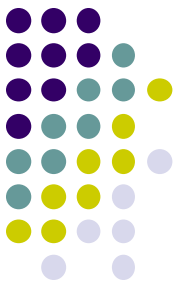
$$\begin{aligned} \mathbf{d}_k^T \mathbf{A} \mathbf{d}_j &= 0, \quad \mathbf{g}_k^T \mathbf{g}_j = \mathbf{g}_k^T \mathbf{d}_j = 0, \quad j \leq k-1, \\ \mathbf{d}_k^T \mathbf{g}_k &= -\mathbf{g}_k^T \mathbf{g}_k, \end{aligned}$$

线性共轭梯度法的性质

将上述方法推广到非线性优化，便得非线性共轭梯度法。

$$\frac{\mathbf{g}_k^T (\mathbf{g}_k - \mathbf{g}_{k-1})}{\mathbf{d}_{k-1}^T (\mathbf{g}_k - \mathbf{g}_{k-1})} \quad ? \quad \frac{\mathbf{g}_k^T \mathbf{g}_k}{\mathbf{g}_{k-1}^T \mathbf{g}_{k-1}} \quad \text{NO!}$$

不同的 β_{k-1} 取值得到不同的非线性共轭梯度法。



非线性共轭梯度法

搜索方向: $\mathbf{d}_k = -\mathbf{g}_k + \beta_{k-1} \mathbf{d}_{k-1}$

$$\beta_{k-1} = \frac{\mathbf{g}_k^T (\mathbf{g}_k - \mathbf{g}_{k-1})}{\mathbf{d}_{k-1}^T (\mathbf{g}_k - \mathbf{g}_{k-1})}$$

$$\beta_{k-1} = \frac{\mathbf{g}_k^T \mathbf{g}_k}{\mathbf{g}_{k-1}^T \mathbf{g}_{k-1}}$$

$$\beta_{k-1} = \frac{\mathbf{g}_k^T (\mathbf{g}_k - \mathbf{g}_{k-1})}{\mathbf{g}_{k-1}^T \mathbf{g}_{k-1}}$$

$$\beta_{k-1} = -\frac{\mathbf{g}_k^T \mathbf{g}_k}{\mathbf{d}_{k-1}^T \mathbf{g}_{k-1}}$$

$$\beta_{k-1} = \frac{\mathbf{g}_k^T \mathbf{g}_k}{\mathbf{d}_{k-1}^T (\mathbf{g}_k - \mathbf{g}_{k-1})}$$

Crowder-Wolfe公式

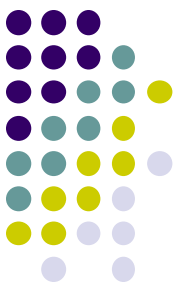
Fletcher-Reeves 公式

Polak-Ribiere公式

Dixon公式

Dai-Yuan公式

步长: 精确步长松弛为非精确步长(如Wolfe步长)



数值效果与收敛速度

1. FR方法和PR方法是最常见的共轭梯度法。从数值效果上，PR方法优于FR方法，但其理论性质不及FR方法。
2. 线性共轭梯度法具有二次终止性。非线性共轭梯度法无此性质。
3. 非线性共轭梯度法线性收敛(Crowder & Wolfe, 1972).
有例为证(Powell, 1976)

线性收敛的例子

$$f(\mathbf{x}) = \begin{cases} \frac{1}{2} \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x}, & \text{若 } \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} \leq 4, \\ \frac{1}{2} \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} + (\mathbf{b}^T \mathbf{x})(\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} - 4)^2, & \text{其他.} \end{cases}$$

$$\mathbf{b} = \left(\frac{\sqrt{6}}{12}; \frac{4}{9} \sqrt{\frac{6}{5}}; \frac{-41\sqrt{5}}{90} \right), \quad \mathbf{A} = \text{diag}\left(\frac{1}{10}, 1, 1\right).$$

全局最优解: $\mathbf{x}^* = \mathbf{0}$ 。以 $\mathbf{x}_0 = \left(\frac{5\sqrt{6}}{2}; 0; \frac{\sqrt{5}}{2}\right)$ 为初始点, 应用最优步长规则下的PR方法,

则第一次迭代后产生的所有迭代点和搜索过程都在椭球

$$\{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3 \mid \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} \leq 4\} \text{ 内, 且满足 } \|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*\| = \sqrt{\frac{105}{6}} \left(\frac{3}{5}\right)^{k-2}.$$

迭代点列线性收敛到最优值点!

虽然如此, 无锯齿现象!



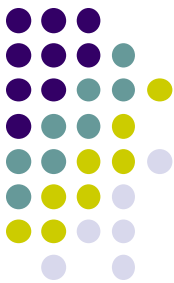
原因分析： 当迭代点进入 $\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} \leq 4$ 区域后, 尽管目标函数是凸二次函数, 但由于初始搜索方向不是负梯度方向, 后续产生的搜索方向关于系数矩阵不共轭, 算法不有限步终止.

改进举措： 迭代若干次后, 调用一次负梯度方向 (重新开始共轭梯度法).

线性共轭梯度法 n 步终止。由此得共轭梯度法的 n 步重新开始策略。

Cohen (1972) 证明了该共轭梯度法 n 步2阶收敛

$$\|\mathbf{x}_{k+n} - \mathbf{x}^*\| = O(\|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*\|^2).$$



四、共轭梯度法收敛性

搜索方向的下降性： 强Wolfe步长规则下的FR方法产生的迭代点列满足 $\mathbf{g}_k^T \mathbf{d}_k < 0$.

Wolfe步长 $f(\mathbf{x}_k + \alpha \mathbf{d}_k) \leq f(\mathbf{x}_k) + \sigma_1 \alpha \mathbf{g}_k^T \mathbf{d}_k,$
 $\nabla f(\mathbf{x}_k + \alpha \mathbf{d}_k)^T \mathbf{d}_k \geq \sigma_2 \mathbf{g}_k^T \mathbf{d}_k.$

$$0 < \sigma_1 < \sigma_2 < 1$$

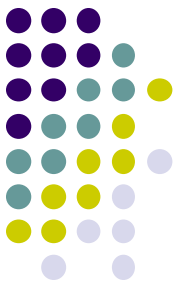
定理(FR方法) 设目标函数连续可微, 梯度在有界水平集上Lipschitz连续. 则强Wolfe步长规则下的FR共轭梯度法弱收敛, 即满足 $\liminf_{k \rightarrow \infty} \|\mathbf{g}_k\| = 0$.



● 一般情况下，PR方法没有全局收敛性！

Powell (1984) 给出反例：即使目标函数二次连续可微，水平集有界，并采用最优步长，PR方法也会产生一个包含稳定点的聚点。

● 对一致凸函数，最优步长规则下，PR方法全局收敛。



定理 (PR方法) 设目标函数二阶连续可微, 水平集有界. 又设存在常数 $\mu > 0$, 使对任意的 $x \in \mathcal{L}(x_0)$, 均有

$$\mathbf{y}^T \mathbf{G}(x) \mathbf{y} \geq \mu \|\mathbf{y}\|^2, \quad \forall \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n.$$

则最优步长规则下的PR方法全局收敛.



最速下降算法、牛顿法、共轭梯度法比较

| | 初始点选取 | 计算量与存储 | 收敛速率 | 二次终止性 |
|-------|-------|--------|-------------|-------|
| 最速下降法 | 任意 | 小 | 线性 有锯齿现象 | × |