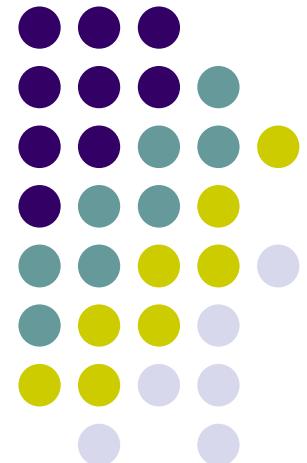


# 共轭梯度法

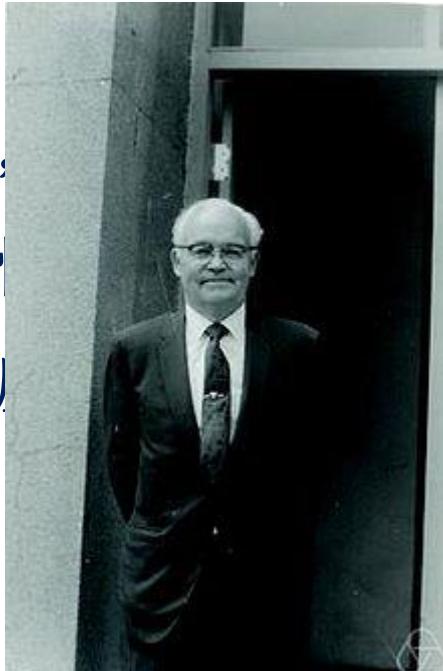




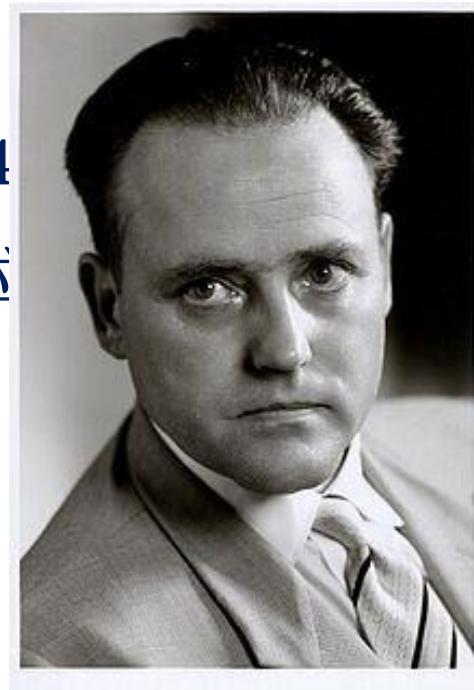
# 一、线性共轭方向法

**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



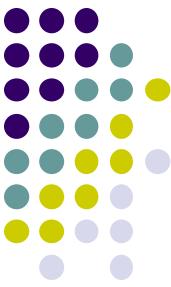
964  
创立



Fletcher

Hestenes

Stiefel



# 问题引出

线性方程组

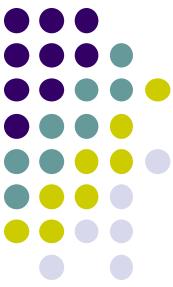
对称正定

$$\boxed{A}x = b$$

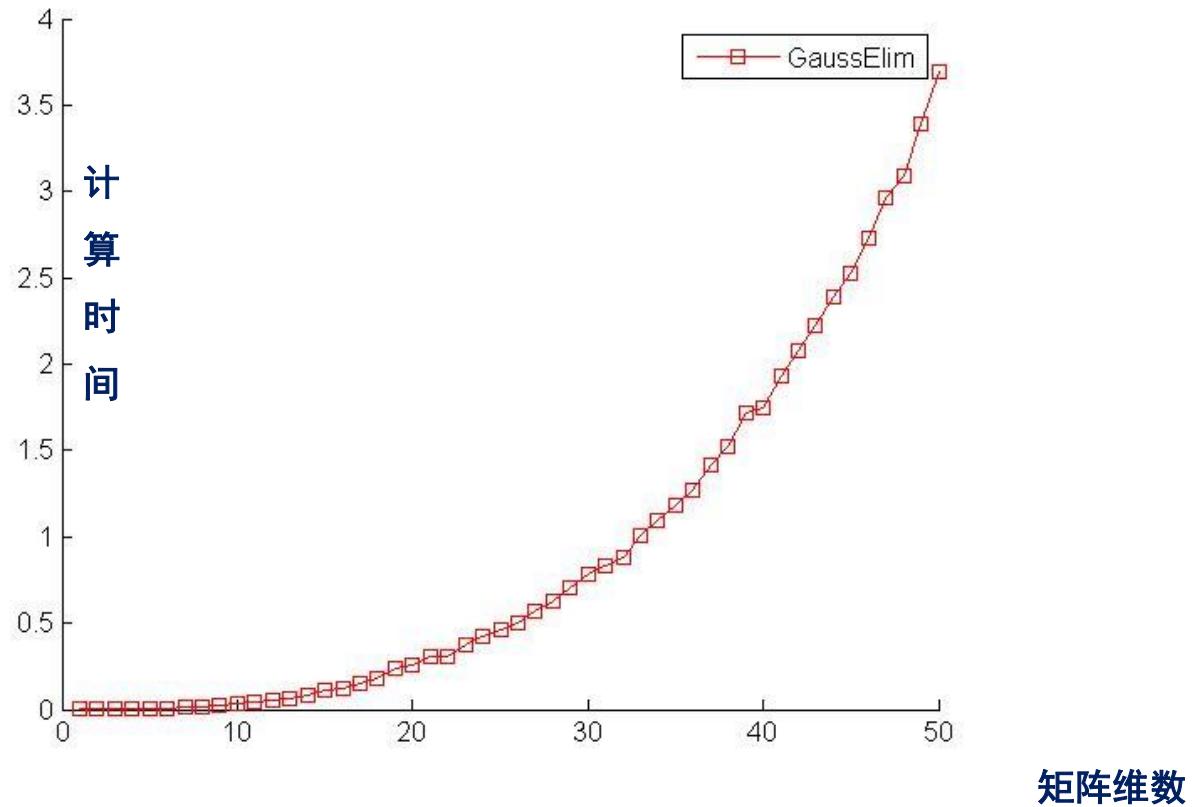
经典算法：

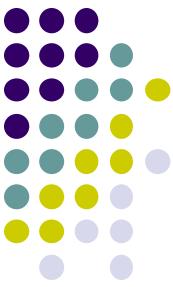
Gauss消元法、系数矩阵三角分解法

算法缺陷：计算时间随问题规模急速增长。

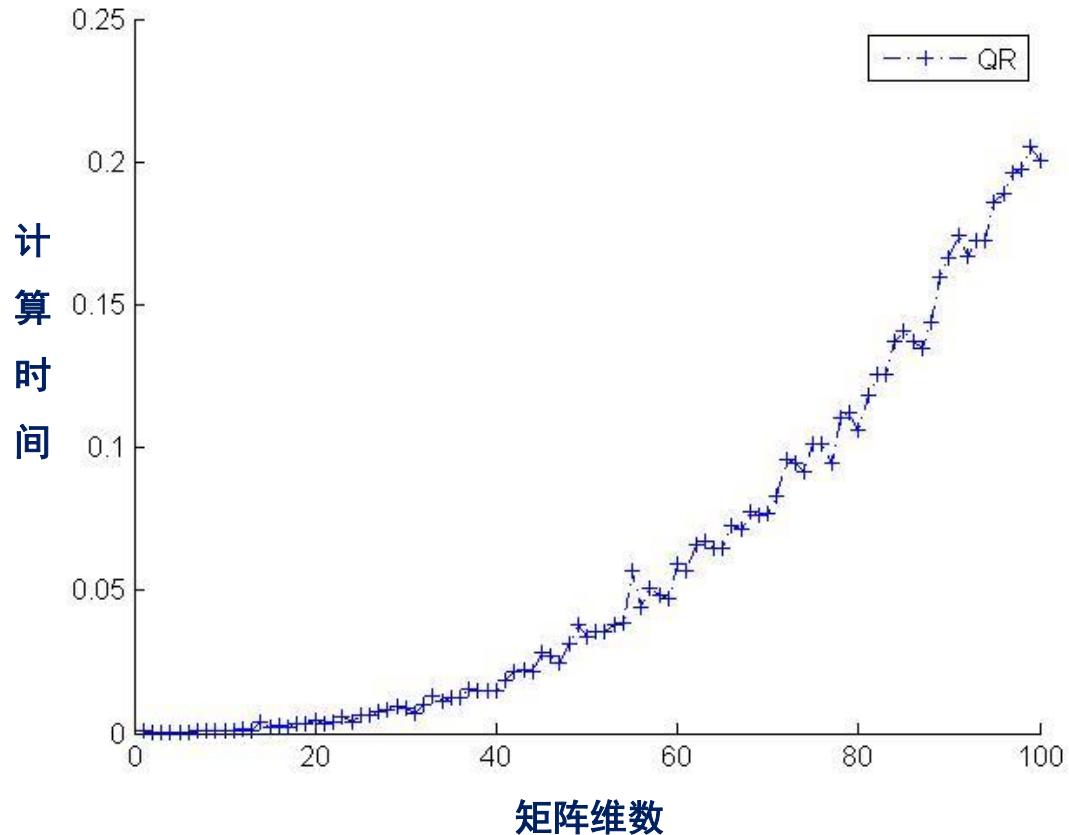


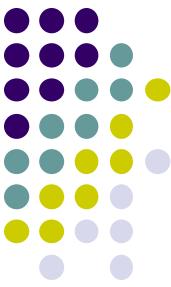
# Gauss消元法



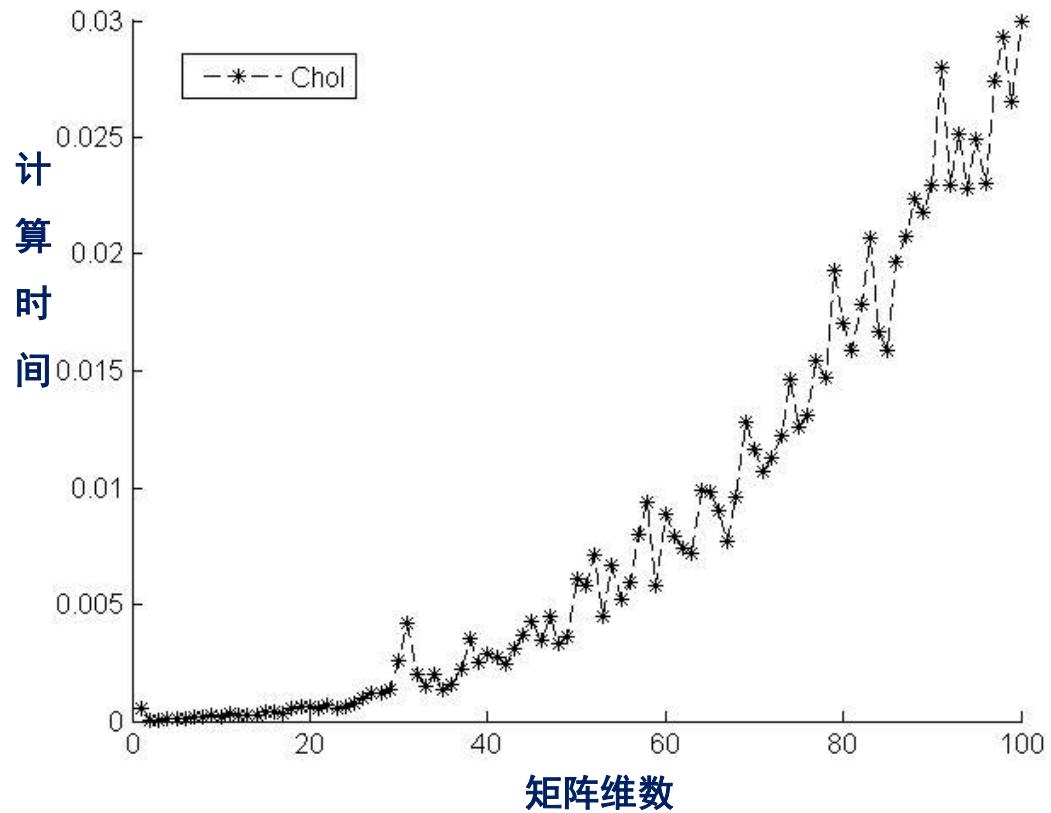


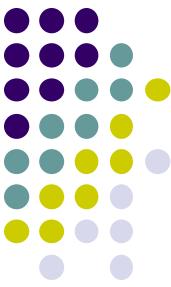
# 系数矩阵QR分解法



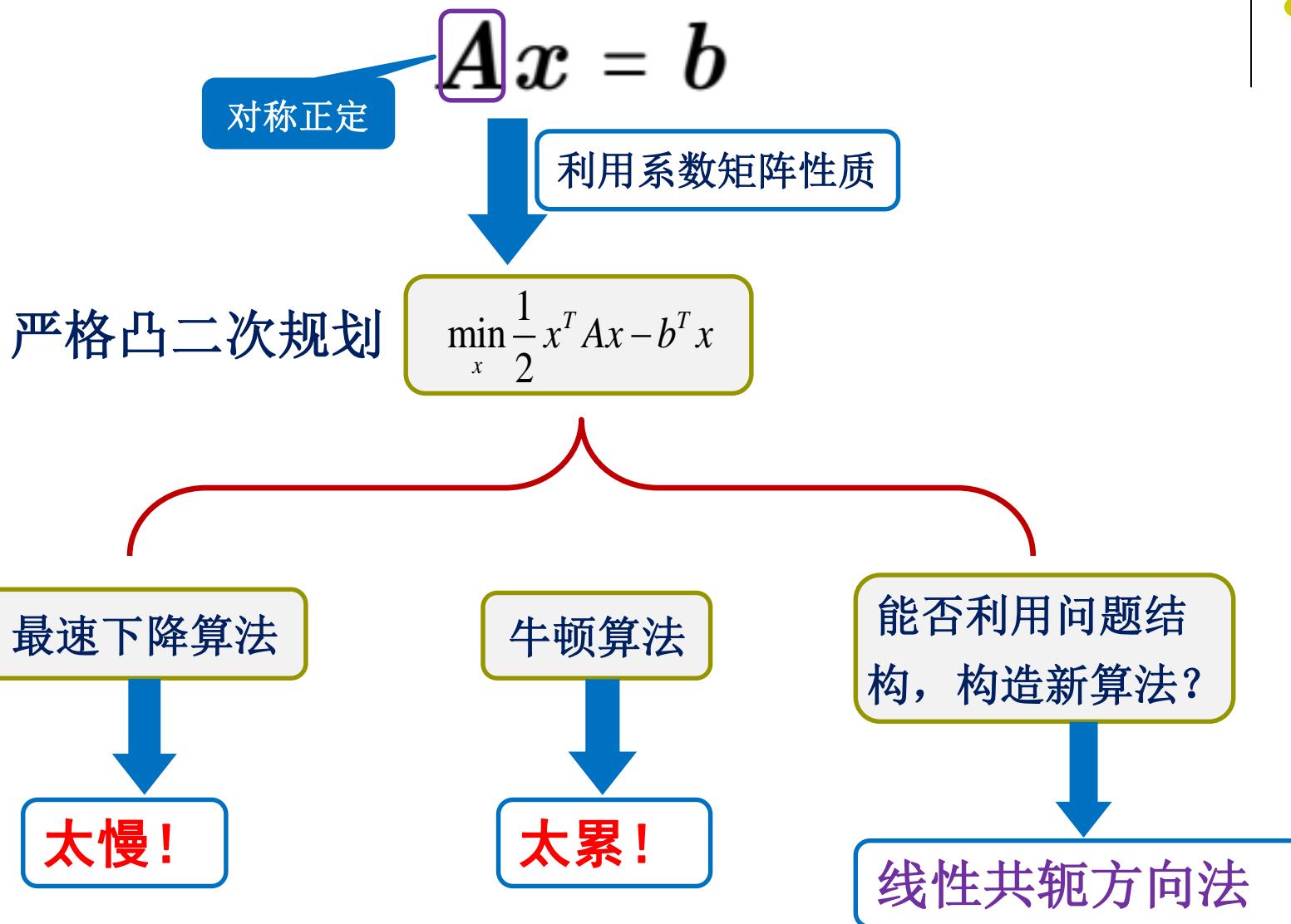


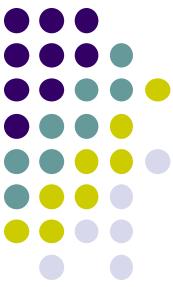
# 系数矩阵Cholesky分解法





# 问题：如何求解大规模对称线性方程组问题？

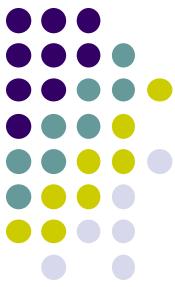




## 线性共轭方向法

**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

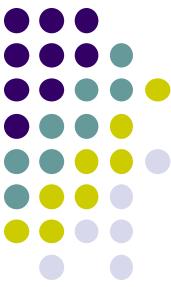
若向量组  $d_1, d_2, \dots, d_n$  关于对称正定阵  $A$  两两共轭，  
即满足

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

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

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) = \frac{1}{2} x^T A x - b^T x$$

步1、初始点  $x_0$ ，搜索方向  $d_0$  满足  $\langle d_0, g_0 \rangle < 0$ ，

终止参数  $\varepsilon \geq 0$  令  $k = 0$ 。

步2、若  $\|g_k\| \leq \varepsilon$ ，算法终止；否则，进入下一步。

步3、计算最优步长  $\alpha_k = \arg \min_{\alpha \geq 0} \{f(x_k + \alpha d_k)\}$

令  $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$

步4、构造  $d_{k+1}$ ，使其与  $d_0, d_1, \dots, d_k$  关于矩阵  $A$  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  $f(x) = \frac{1}{2}x^T Ax - b^T x$ , 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

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

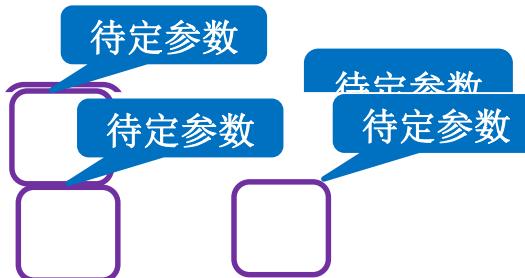


## 二、线性共轭梯度法

**问题：**线性共轭方向法具有二次终止性，如何构造共轭方向？

**策略：**取  $d_0 = -g_0$ 。然后依次以负梯度为基准，对其进行校正，使新搜索方向与已有的搜索方向共轭。

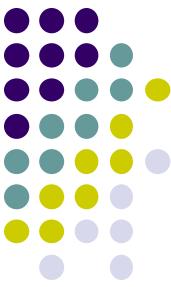
$$d_0 = -g_0;$$



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

待定参数

待定参数



## 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

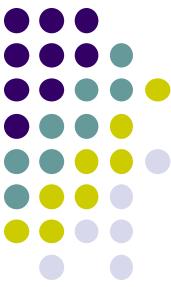
选择参数  $\beta_0$  满足共轭条件  $\mathbf{d}_1^T \mathbf{A} \mathbf{d}_0 = 0$

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

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

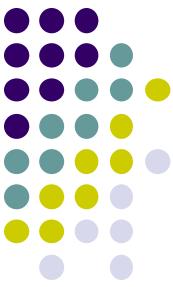
选择参数  $\beta_0, \beta_1$ , 使满足共轭条件

$$\begin{cases} \mathbf{d}_2^T \mathbf{A} \mathbf{d}_0 = 0 \\ \mathbf{d}_2^T \mathbf{A} \mathbf{d}_1 = 0 \end{cases} \xrightarrow{\hspace{1cm}} \begin{cases} \beta_0 = \frac{\mathbf{g}_2^T \mathbf{A} \mathbf{d}_0}{\mathbf{d}_0^T \mathbf{A} \mathbf{d}_0} = 0 \\ \beta_1 = \frac{\mathbf{g}_2^T \mathbf{A} \mathbf{d}_1}{\mathbf{d}_1^T \mathbf{A} \mathbf{d}_1} = \frac{\mathbf{g}_2^T (\mathbf{g}_2 - \mathbf{g}_1)}{\mathbf{d}_1^T (\mathbf{g}_2 - \mathbf{g}_1)} = \frac{\mathbf{g}_2^T \mathbf{g}_2}{\mathbf{g}_1^T \mathbf{g}_1} \end{cases}$$

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  $\beta_0, \beta_1, \beta_2, \dots, \beta_{k-1}$  使满足共轭条件

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

→

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

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

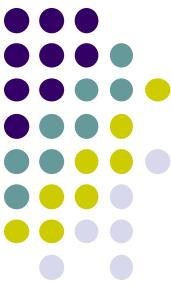
**初始步：**取  $d_{-1} = 0$ , 初始点  $x_0$ , 终止参数  $\varepsilon \geq 0$ . 令

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

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

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

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



## 线性共轭梯度法性质

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

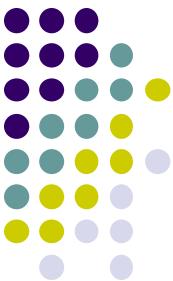
最优步长规则下的共轭梯度法经  $m \leq n$  步迭代后终止, 且对任意的  $0 \leq k \leq m-1$ , 成立

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

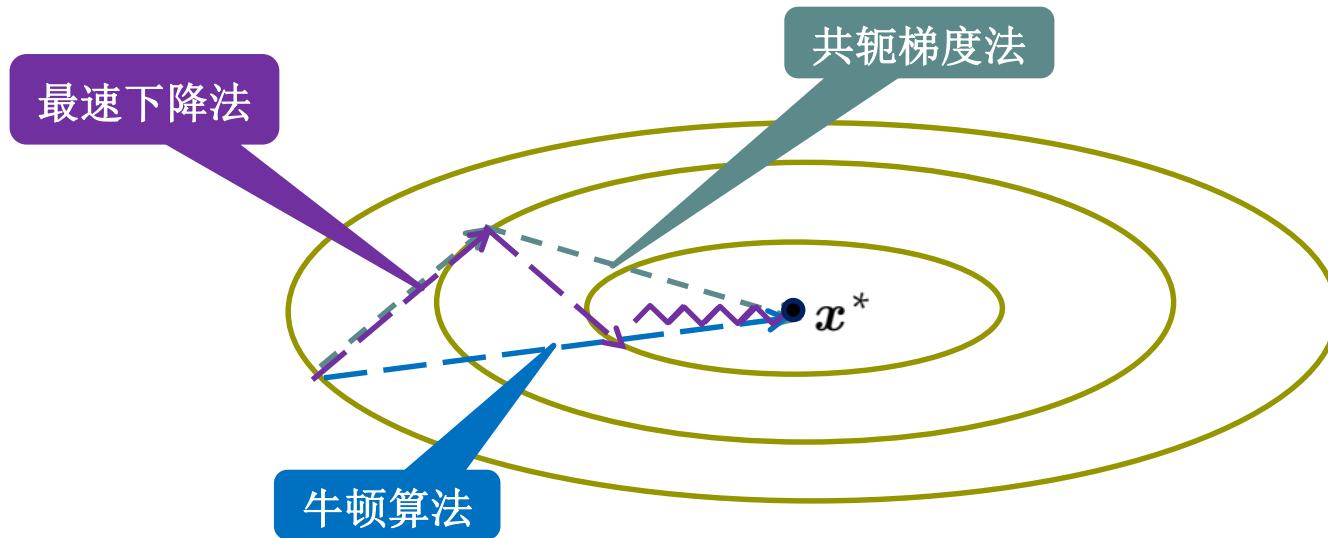
$$\mathbf{d}_k^T \mathbf{g}_k = -\mathbf{g}_k^T \mathbf{g}_k,$$

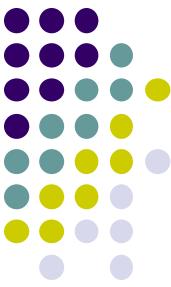
搜索方向的正交性

搜索方向  
的下降性



# 最速下降法、牛顿法、共轭梯度法的比较





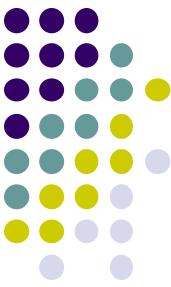
例  $\min x_1^2 + \frac{1}{2}x_2^2 + \frac{1}{2}x_3^2$

解：取初始点  $x_0 = (1; 1; 1)$ 。迭代过程：

$k$	$x_k$	$g_k$	$\beta_{k-1}$	$d_k$	$\alpha_k$
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

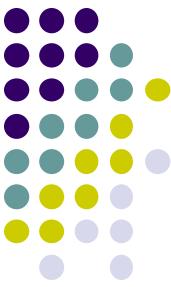
**定理** 对严格凸二次函数  $f(x) = \frac{1}{2}x^T Ax - b^T x$   
若系数矩阵  $A$  有  $r$  个相异特征根，则最优步长  
规则下的共轭梯度法至多  $r$  步迭代后终止。

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

$$\|x_k - x^*\|_A \leq \left( \frac{\kappa(A) - 1}{\kappa(A) + 1} \right)^k \|x_0 - x^*\|_A.$$

其中， $x^*$  为目标函数的最小值点，

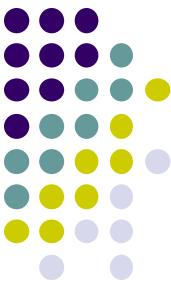
矩阵  $A$  的条件数  $\kappa(A) = \|A\| \|A^{-1}\| = \frac{\lambda_{\max}(A)}{\lambda_{\min}(A)}$



## 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  $f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} - \mathbf{b}^T \mathbf{x},$

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

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

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

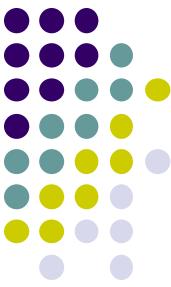
$$\begin{aligned} \mathbf{d}_k^T \mathbf{A} \mathbf{d}_j &= 0, \quad \mathbf{g}_k^T \mathbf{g}_j = \mathbf{g}_k^T \mathbf{d}_j = 0, \quad j \leq k-1, \\ \mathbf{d}_k^T \mathbf{g}_k &= -\mathbf{g}_k^T \mathbf{g}_k, \end{aligned}$$

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  $\beta_{k-1}$  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:  $d_k = -g_k + \beta_{k-1} d_{k-1}$

$$\beta_{k-1} = \frac{g_k^T (g_k - g_{k-1})}{d_{k-1}^T (g_k - g_{k-1})}$$

$$\beta_{k-1} = \frac{g_k^T g_k}{g_{k-1}^T g_{k-1}}$$

$$\beta_{k-1} = \frac{g_k^T (g_k - g_{k-1})}{g_{k-1}^T g_{k-1}}$$

$$\beta_{k-1} = -\frac{g_k^T g_k}{d_{k-1}^T g_{k-1}}$$

$$\beta_{k-1} = \frac{g_k^T g_k}{d_{k-1}^T (g_k - g_{k-1})}$$

Crowder-Wolfe公式

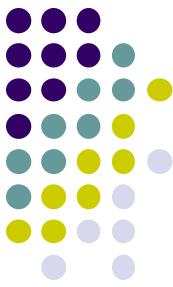
Fletcher-Reeves 公式

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

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

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

全局最优解:  $x^* = \mathbf{0}$ 。以  $x_0 = \left(\frac{5\sqrt{6}}{2}; 0; \frac{\sqrt{5}}{2}\right)$  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

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

迭代点列线性收敛到最优值点!

虽然如此, 无锯齿现象!



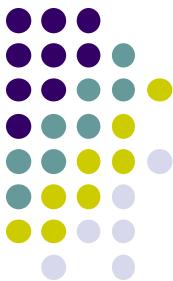
**原因分析：**当迭代点进入  $x^T Ax \leq 4$  区域后，尽管目标函数是凸二次函数，但由于初始搜索方向不是负梯度方向，后续产生的搜索方向关于系数矩阵不共轭，算法不有限步终止。

**改进举措：**迭代若干次后，调用一次负梯度方向（再开始共轭梯度法）。

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

$$\|x_{k+n} - x^*\| = O(\|x_k - x^*\|^2).$$



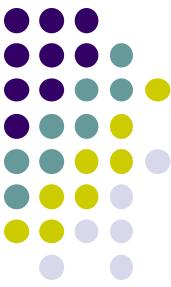
## 四、共轭梯度法收敛性

**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  $\liminf_{k \rightarrow \infty} \|\mathbf{g}_k\| = 0$ .

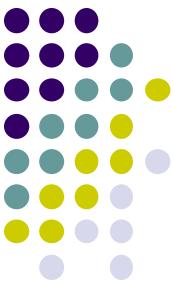


一般情况下，PR方法没有全局收敛性！

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。



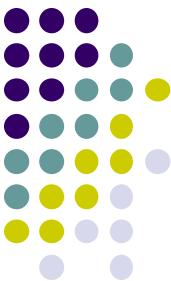
对一致凸函数，最优步长规则下，PR方法全局收敛。



**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	×