最速下降法解线性方程组

算
收
一

2017年 08月14日

算法推导

已知待求解的线性方程组

$$Ax = b$$

其中 A 为对称正定矩阵，x 为向量。上述问题等价于求解如下二次型的极小值

$$f(x) = \frac{1}{2}x^T Ax - x^T b$$

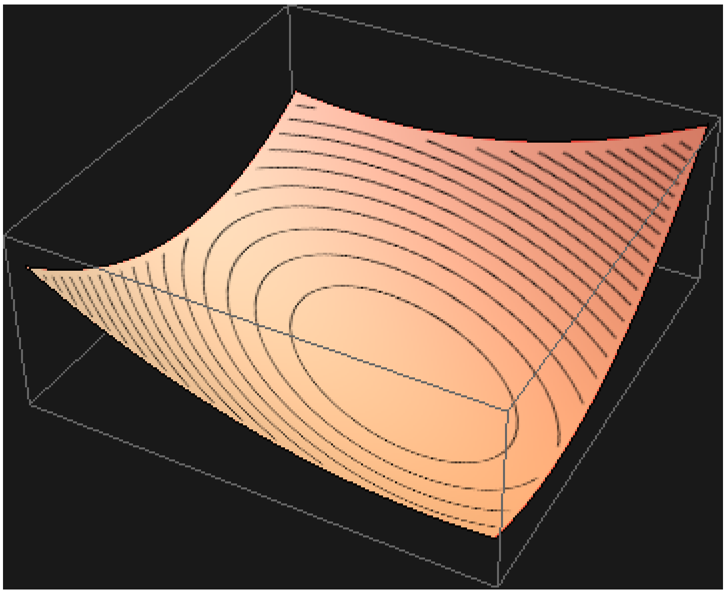
为了说明这种关系，考虑对 $f(x)$ 求导

$$f'(x) = \frac{1}{2}Ax + \frac{1}{2}x^T A - b$$

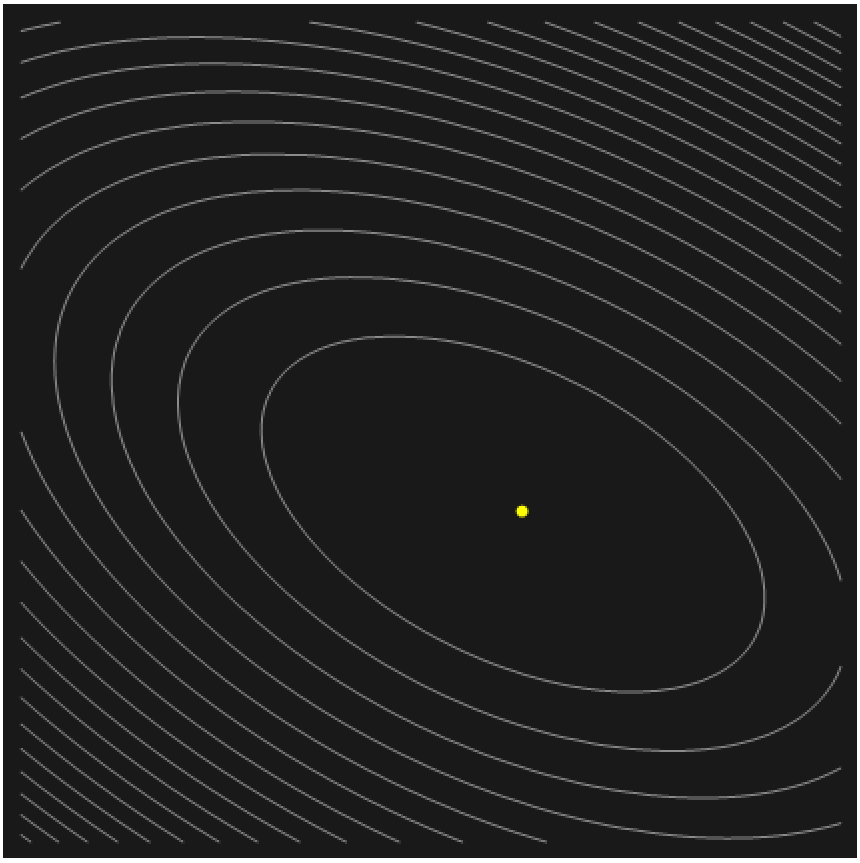
由于 A 为对称正定矩阵，所以

$$f'(x) = Ax - b$$

而 $f(x)$ 取得极小值的条件是 $f'(x) = 0$，即 $Ax - b = 0$，这就说明两个问题其实是等价的。事实上，若 A 为二阶矩阵，那么 $f(x)$ 的图像是空间上的抛物面，且开口向上



而其等高线则如下图所示，在中间的一点处，函数取得最小值。



为了找到 $f(x)$ 的极小值，可以考虑先假设一个初始值 $x^{(k)}$，然后沿 $f(x)$ 在 $x^{(k)}$ 处的负梯度方向移动，这是函数值下降最快的方向。假设移动的长度为 $\alpha^{(k)}$，到达点新的点

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \alpha^{(k)} f'(x^{(k)})$$

另一方面，$-f'(x) = b - Ax^{(k)}$ 是将 $x = x^{(k)}$ 代入 $Ax = b$ 后的残差，若是令 $r^{(k)} = b - Ax^{(k)}$，则有

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha^{(k)} r^{(k)}$$

为了确定步长 $\alpha^{(k)}$ 的大小，考虑到 $f(x^{(k+1)})$ 应该关于 $\alpha^{(k)}$ 取极小值（不然为什么要取这样的 $\alpha^{(k)}$），也就是必须满足

$$\frac{\mathrm{d}f(x^{(k+1)})}{\mathrm{d}\alpha^{(k)}} = \frac{\mathrm{d}f(x^{(k+1)})}{\mathrm{d}x^{(k+1)}} \frac{\mathrm{d}x^{(k+1)}}{\mathrm{d}\alpha^{(k)}} = 0$$

考虑到前面推导的 $x^{(k+1)}$ 与 $\alpha^{(k)}$ 的关系，上式又可写成

$$f'(x^{(k+1)}) \cdot (-f'(x^{(k)})) = 0$$

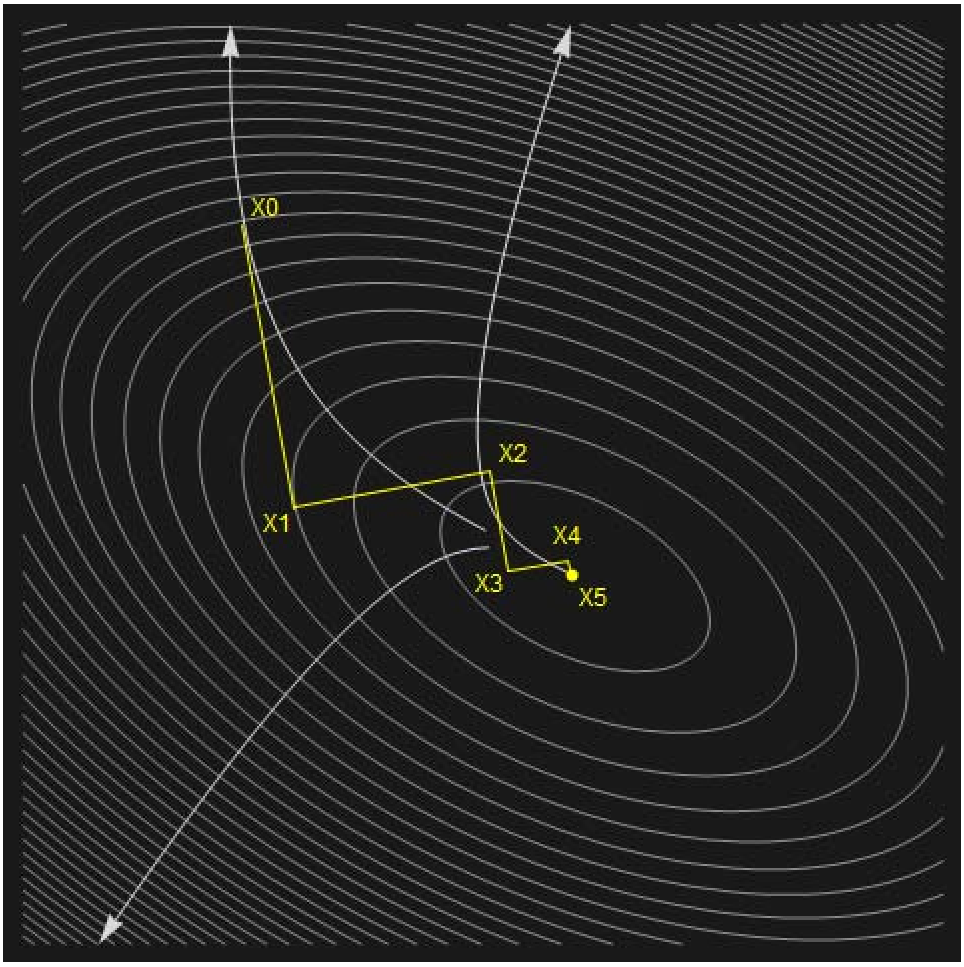
再考虑到 $r^{(k)} = -f'(x^{(k)})$，于是有

$$
\begin{aligned}
r^{(k+1)} \cdot r^{(k)} &= 0 \\
(b - Ax^{(k+1)}) \cdot r^{(k)} &= 0 \\
(b - A(x^{(k)} + \alpha^{(k)} r^{(k)})) \cdot r^{(k)} &= 0 \\
(b - Ax^{(k)} - A\alpha^{(k)} r^{(k)}) \cdot r^{(k)} &= 0 \\
r^{(k)} \cdot r^{(k)} &= A\alpha^{(k)} r^{(k)} \cdot r^{(k)} \\
\alpha^{(k)} &= \frac{r^{(k)} \cdot r^{(k)}}{Ar^{(k)} \cdot r^{(k)}}
\end{aligned}
$$

综合前面的讨论，下面给出最速下降法的伪码(其中的乘法为点积)：

```
initialize  x, r = b - A x, epsilon
while(check(r) > epsilon){
        alpha = r * r / (A * r * r)
        x = x + alpha * r
        r = b - A x
}
```

直观地看，整个算法迭代路线如下图所示



收敛性分析

首先定义迭代过程中 x 的近似值与精确值间的误差量

$$e^{(k)} = x^{(k)} - x$$

由于 $r^{(k)} = b - Ax^{(k)}$ 以及 $0 = b - Ax$， 可知

$$r^{(k)} = -Ae^{(k)}$$

下面考虑最简单的情况，即假设 $e^{(k)}$ 是 A 的特征向量，且对应的特征值为 $\lambda^{(k)}$。那么

$$r^{(k)} = -Ae^{(k)} = -\lambda^{(k)} e^{(k)}$$

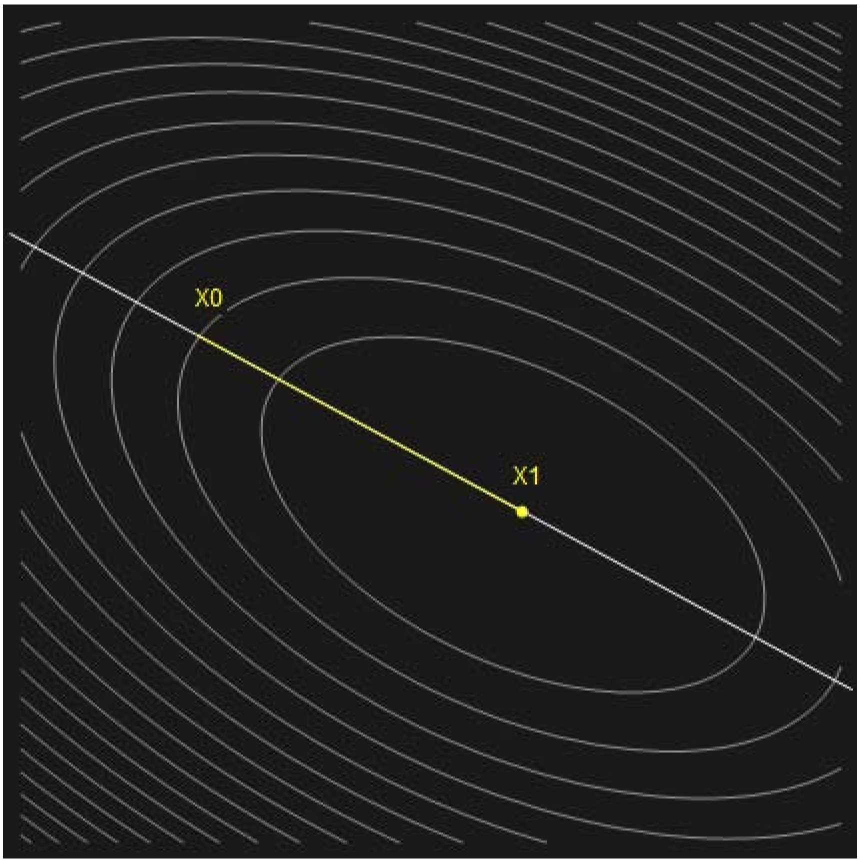
又由于

$$Ar^{(k)} = -A\lambda^{(k)} e^{(k)} = -\lambda^{(k)}\lambda^{(k)} e^{(k)} = \lambda^{(k)} r^{(k)}$$

所以，$r^{(k)}$ 也为 A 的特征向量，对应的特征值也为 $\lambda^{(k)}$。这时将迭代公式两边同时减去 x，可得

$$\begin{aligned}
x^{(k+1)} - x &= x^{(k)} - x + \alpha^{(k)} r^{(k)} \\
e^{(k+1)} &= e^{(k)} + \alpha^{(k)} r^{(k)} \\
&= e^{(k)} + \frac{r^{(k)} \cdot r^{(k)}}{Ar^{(k)} \cdot r^{(k)}}(-Ae^{(k)}) \\
&= e^{(k)} + \frac{r^{(k)} \cdot r^{(k)}}{\lambda^{(k)} r^{(k)} \cdot r^{(k)}}(-\lambda^{(k)} e^{(k)}) \\
&= 0
\end{aligned}$$

也就是说，只需经过一次迭代，即可达到精确解。从几何直观来说，点 $x^{(k)}$ 刚好落在二次型形成的超抛物面的椭圆形等高线的轴上，这时残差向量 $e^{(k)}$ 指向椭圆中心，于是选取合适的 $\alpha^{(k)}$ 可以直接将 $x^{(k+1)}$ 定位到椭圆中心，即超抛物面的极小点。过程如下图所示：



现在考虑稍微复杂一点的情况，即 $e^{(k)}$ 为一般向量。可以证明矩阵 A 的特征向量张成整个空间，于是 $e^{(k)}$ 可以用 A 的特征向量的线性组合表示为

$$e^{(k)} = \sum \xi_i \nu_i$$

其中 $\nu_i(i = 1, 2, , , n)$ 为一组正交单位向量（可以证明对任意对称矩阵，都存在这样一组正交单位特征向量）。正交向量组具有性质

$$\nu_i \cdot \nu_j = \begin{cases} 0 & i = j \\ 1 & i \neq j \end{cases}$$

利用正交向量组，残差可以表示为

$$r^{(k)} = -Ae^{(k)} = -\sum \xi_i A\nu_i = -\sum \xi_i \lambda_i \nu_i$$

这时再考虑误差迭代格式

$$\begin{aligned} e^{(k+1)} &= e^{(k)} + \alpha^{(k)} r^{(k)} \\ &= e^{(k)} + \frac{r^{(k)} \cdot r^{(k)}}{Ar^{(k)} \cdot r^{(k)}} r^{(k)} \end{aligned}$$

其中

$$r^{(k)} \cdot r^{(k)} = \sum \xi_i \lambda_i \nu_i \cdot \sum \xi_j \lambda_j \nu_j = \sum \xi_i^2 \lambda_i^2$$

$$
\begin{aligned}
Ar^{(k)} \cdot r^{(k)} &= \sum \xi_i \lambda_i A \nu_i \cdot \sum \xi_j \lambda_j \nu_j \\
&= \sum \xi_i \lambda_i^2 \nu_i \cdot \sum \xi_j \lambda_j \nu_j \\
&= \sum \xi_i^2 \lambda_i^3
\end{aligned}
$$

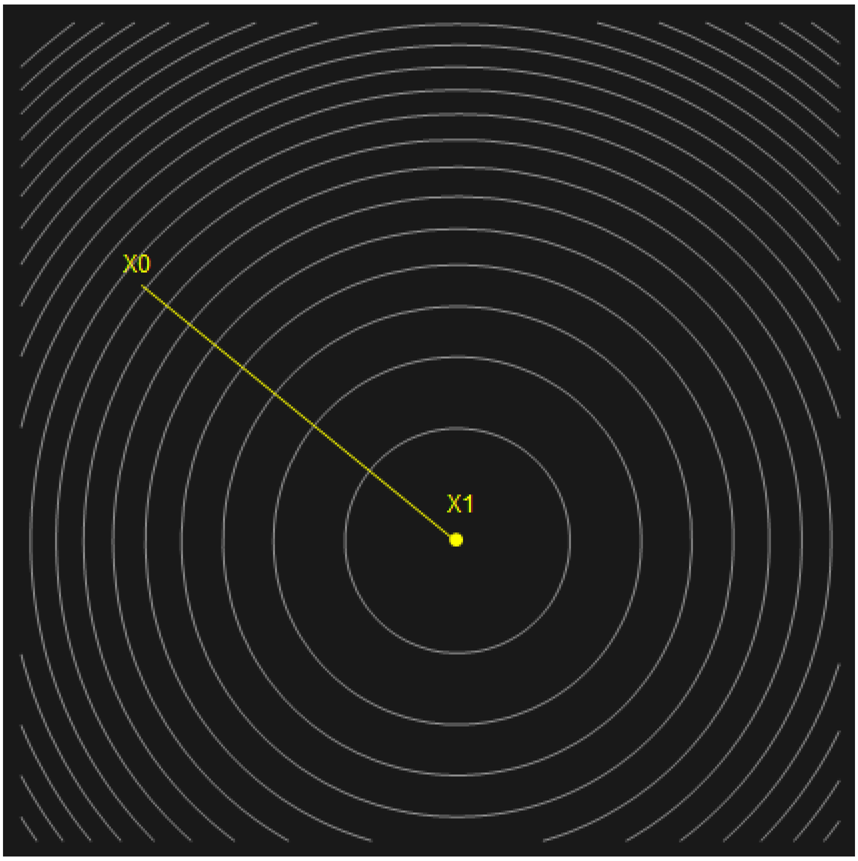
代入后得到

$$
e^{(k+1)} = e^{(k)} + \frac{\sum \xi_i^2 \lambda_i^2}{\sum \xi_i^2 \lambda_i^3} r^{(k)}
$$

如果假设 A 的所有特征值都相同，那么

$$
\begin{aligned}
e^{(k+1)} &= e^{(k)} + \frac{\lambda^2 \sum \xi_i^2}{\lambda^3 \sum \xi_i^2} (-\lambda \sum x i_i \nu_i) \\
&= e^{(k)} - \sum \xi_i \nu_i \\
&= 0
\end{aligned}
$$

可以看到，又只经过一次迭代便达到精确解。从几何意义上来看，要求 A 的所有特征值都相同，意味着二次型的超抛物面的等高线为超球，这时，无论在何处取初始值，其残差方向都指向球心，选取合适的步长，即可一次迭代便达到精确解。过程如下图所示：



一般情况下的收敛性分析

前面，我们对误差的定义为

$$e^{(k)} = x^{(k)} - x$$

这就意味着，只要是与精确解 x 距离相等的一圈点，它们的误差都是一样的。但实际上除非矩阵 A 的特征值都相同，即等高线为圆形，否则这些点上的函数值距离极小值并不相同。为了改进这种不太合适声明，下面新定义一种误差函数

$$||e||_A = Ae \cdot e$$

可以证明上述误差定义满足条件——同一等高线上的点，误差值相同。下面推导影响误差收敛性的因素

$$\begin{aligned}
||e^{(k+1)}||_A &= Ae^{(k)} \cdot e^{(k)} \\
&= A(e^{(k)} + \alpha^{(k)}) \cdot (e^{(k)} + \alpha^{(k)}) \\
&= Ae^{(k)} \cdot e^{(k)} + 2\alpha^{(k)} Ae^{(k)} \cdot r^{(k)} + (\alpha^{(k)})^2 Ar^{(k)} \cdot r^{(k)} \\
&= ||e^{(k)}||_A + 2\frac{r^{(k)} \cdot r^{(k)}}{Ar^{(k)} \cdot r^{(k)}}(-r^{(k)} \cdot r^{(k)}) + \left(\frac{r^{(k)} \cdot r^{(k)}}{Ar^{(k)} \cdot r^{(k)}}\right)^2 Ar^{(k)} \cdot r^{(k)} \\
&= ||e^{(k)}||_A - \frac{r^{(k)} \cdot r^{(k)}}{Ar^{(k)} \cdot r^{(k)}} \\
&= ||e^{(k)}||_A \left(1 - \frac{(r^{(k)} \cdot r^{(k)})^2}{Ar^{(k)} \cdot r^{(k)} Ae^{(k)} \cdot e^{(k)}}\right) \\
&= ||e^{(k)}||_A \left(1 - \frac{(\sum \xi_i^2 \lambda_i^2)^2}{\sum \xi_i^2 \lambda_i^3 \sum \xi_i^2 \lambda_i}\right)
\end{aligned}$$

若令

$$\omega^2 = \left(1 - \frac{(\sum \xi_i^2 \lambda_i^2)^2}{\sum \xi_i^2 \lambda_i^3 \sum \xi_i^2 \lambda_i}\right)$$

可得简化形式

$$||e^{(k+1)}||_A = ||e^{(k)}||_A \omega^2$$

现在考虑我们之前提到的两种简化情况

1. 当误差 $e^{(k)}$ 为 A 的特征向量时。意味着 $\xi_i (i = 1,,,n)$ 除了一项为1，其余项都为0。此时 $\omega = 0$，只需迭代一步即收敛。
2. 当 A 的所有特征值都相同时，$\omega = 0$，也是迭代一步收敛。

可见上面推导的公式蕴含之前假设的特殊情况。而在一般情况下，只要 $||\omega|| < 1$，则算法就一定收敛。

clouswang@gmail.com