共轭梯度法求解矩阵方程
Fletcher-Reeves方法
Krylov子空间上的迭代

东川路第一可爱猫猫虫

主要内容

感谢粉丝大佬
s7win99
的充电支持

- 求解矩阵方程等价于最小化二次型函数
- Krylov子空间
- 为什么要把Krylov子空间作为解的搜索空间：合理性与必要性
- H内积与H共轭
- 一组两两H共轭的向量是线性无关的
- 为什么要用共轭梯度法解矩阵方程
- 步骤

    初始化

    迭代

    终止条件

求解Hx=g

- 共轭梯度法一般用于对称正定的H
- $H_{n \times n}$
- $g_{n \times 1}$
- 直接求的话

  n很大

  计算成本和存储成本很高
- 共轭梯度法

  把计算量减少到了H与列向量的乘积

求解Hx=g等价于最小化$\frac{1}{2}x^T Hx - g^T x$

- 由于H对称正定，其二次型$x^T Hx$为凸函数
- $\frac{1}{2}x^T Hx - g^T x$也是凸函数，存在最小值
- 最小化$\frac{1}{2}x^T Hx - g^T x$

  需要求其梯度

  梯度为0处为最小值点
- $\frac{1}{2}x^T Hx - g^T x$的梯度为Hx-g
- 求解Hx=g实际上是最小化这个二次型函数

Krylov子空间

- Krylov子空间

  由一个矩阵和一个向量通过计算生成的线性空间

  (H,g)的Krylov子空间$\mathcal{K}_n(H,g)$为

  $$\mathrm{span}\{g, Hg, H^2g, \ldots, H^{n-1}g\}$$

- 如果能证明解$x^* = H^{-1}g \in \mathcal{K}_n(H,g)$

  那么我们在求解Hx=g的时候

  可以把Krylov子空间作为解的搜索空间

- 下面我们证明

  解$x^* = H^{-1}g \in \mathcal{K}_n(H,g)$

解$x^* = H^{-1}g \in \mathcal{K}_n(H,g)$

- Proof
- 由Cayley-Hamilton Theorem

  任一方阵一定满足其特征方程
- 假设H的特征方程为$x^n + a_{n-1}x^{n-1} + \cdots + a_0 = 0$

  则$H^n + a_{n-1}H^{n-1} + \cdots + a_0 I = 0$

  $H^n + a_{n-1}H^{n-1} + \cdots + a_1 H = -a_0 I$

  $H^{n-1} + a_{n-1}H^{n-2} + \cdots + a_1 = -a_0 H^{-1}$

  H^{-1}可以表示为$I, H, \ldots, H^{n-1}$的线性组合

  $x^* = H^{-1}g$可以表示为$g, Hg, H^2 g, \ldots, H^{n-1}g$的线性组合
- $x^* = H^{-1}g \in \mathcal{K}_n(H,g)$

H共轭性与H内积

- 因此我们将
  Krylov子空间作为解的搜索空间
- 自然基$g, Hg, H^2g, \ldots, H^{n-1}g$
  可以张成目标搜索空间$\mathcal{K}_n(H, g)$
  但是这组基不满足H共轭性
- H共轭性
  由矩阵H诱导的**H内积**下的正交性
- 欧式正交即内积为0
  H共轭即H内积为0

H共轭性

- H内积

  $$< u, v >_H = u^T H v$$

- H共轭

  由矩阵H诱导的**H内积**下的正交性

  $d_i, d_j (i \neq j)$有：$d_i^T H d_j = 0$，则称d_i与d_j是H共轭的

- 若一组向量两两H共轭

  则这组向量线性无关

- 下面给出证明

若一组向量两两H共轭
则这组向量线性无关

- Proof
- 假设$\{d_0, d_1, \ldots, d_k\}$两两H共轭且线性相关

  存在不全为0的$\alpha_0, \ldots, \alpha_k$使得$\alpha_0 d_0 + \cdots + \alpha_k d_k = 0$

  任取$i \in \{0,1,2 \ldots, k\}$

  $\alpha_0 d_i^T H d_0 + \cdots + \alpha_k d_i^T H d_k = 0$

  由于$\{d_0, d_1, \ldots, d_k\}$两两H共轭，因此$d_i^T H d_j = 0 \ (i \neq j)$

  $\alpha_i d_i^T H d_i = 0$

  由于H是对称正定阵，其二次型$d_i^T H d_i > 0$

  因此$\alpha_i = 0$ 故矛盾

为什么要用共轭梯度法

- 自然基$g, Hg, H^2g, \ldots, H^{n-1}g$可以张成目标搜索空间$\mathcal{K}_n(H,g)$

  但他们不是H共轭的
- 如果我们可以找到目标搜索空间$\mathcal{K}_n(H,g)$的一组H共轭的基

  我们就可以就可以把问题解耦到n个单一维度

  在一个维度上优化不会破坏其他任何维度

  只需在每个共轭方向上完成单次优化

    即可穷尽该维度的优化空间且不影响其他维度

  经过n次迭代就可以穷尽$\mathcal{K}_n(H,g)$
- 共轭梯度法就是在这n个H共轭的基（搜索方向）上做优化

共轭梯度法的步骤

- 初始化

  初始解x_0

  初始残量$r_0 = g - Hx_0 = -\nabla f(x_0)$

  初始化搜索方向$p_0 = r_0$
- 如何迭代

  现有x_k, r_k, p_k

  下一步要找第k步的步长α_k，用来求x_{k+1}, p_{k+1}

计算步长α_k 

- 当前我们要在p_k这个搜索方向上求解最小化问题

  第k+1步迭代的解$x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k$

  最小化$f(x_{k+1})$

  $$f(x_{k+1}) = \frac{1}{2}(x_k + \alpha_k p_k)^T H (x_k + \alpha_k p_k) - g^T (x_k + \alpha_k p_k)$$

  $$\frac{\partial f}{\partial \alpha_k} = (x_k + \alpha_k p_k)^T H p_k - g^T p_k = 0$$

  将残量$r_k = g - Hx_k$带入$\frac{\partial f}{\partial \alpha_k} = (x_k + \alpha_k p_k)^T H p_k - g^T p_k = 0$

  $$\alpha_k = \frac{r_k^T r_k}{p_k^T H p_k}$$

一组H共轭的搜索方向

- 我们已经确定了解就在Krylov子空间里
- 所有的迭代目标是高效
- 前提是在n个H共轭的基（搜索方向）上做优化
- 搜索方向同样是一步步迭代出来的
- 新方向由当前残量和上一个方向线性组合而成

$$p_{k+1} = r_{k+1} + \beta_k p_k$$

- 搜索方向的更新公式与β_k的计算公式

  构成Fletcher-Reeves（简称 FR）公式

新残量r_{k+1}与之前所有的搜索方向正交

- Proof
- 先证k=0时成立
- $r_1 = g - Hx_1 = g - H(x_0 + \alpha_0 p_0) = g - Hx_0 - \alpha_0 Hp_0 = r_0 - \alpha_0 Hp_0$
- $r_1^T p_0 = (r_0 - \alpha_0 Hp_0)^T p_0 = r_0^T p_0 - \alpha_0 p_0^T Hp_0$

$$= r_0^T p_0 - \frac{r_0^T r_0}{p_0^T Hp_0} p_0^T Hp_0 = 0$$

- 假设k=m时命题成立 对所有0-m之间的i都有$r_{m+1}^T p_i = 0$
- 要证明k=m+1时命题成立 对所有0-m+1之间的i都有$r_{m+2}^T p_i = 0$

新残量r_{k+1}与之前所有的搜索方向正交

- 目标是证明对所有0-m+1之间的i都有$r_{m+2}^T p_i = 0$
- 情况一：$0 \le i \le m$
- $r_{m+2} = r_{\mathrm{m+1}} - \alpha_{\mathrm{m+1}} H p_{\mathrm{m+1}}$
- $p_i^T r_{m+2} = p_i^T r_{\mathrm{m+1}} - \alpha_{\mathrm{m+1}} p_i^{\mathrm{T}} H p_{\mathrm{m+1}}$

  $= 0$

- 情况二：i=m+1
- $p_{m+1}^T r_{m+2} = p_{m+1}^T r_{m+1} - \alpha_{m+1} p_{m+1}^T H p_{m+1}$
- $p_{m+1}^T r_{m+1} = (r_{m+1} + \beta_m p_m)^T r_{m+1} = r_{m+1}^T r_{m+1} + \beta_m p_m^T r_{m+1} = r_{m+1}^T r_{m+1}$
- $\alpha_{m+1} p_{m+1}^T H p_{m+1}$ 带入$\alpha_k = \dfrac{r_k^T r_k}{p_k^T H p_k}$ 第二项 $= r_{m+1}^T r_{m+1}$

新残量r_{k+1}与之前所有的搜索方向正交

- 至此，我们通过数学归纳法

  证明了新残量r_{k+1}与之前所有的搜索方向正交
- 由此的一个推论

  $r_{k+1}^T p_i = 0$ 对所有 $i \le k$

  且p_k与r_k线性相关

  可以得到：$r_{k+1}^T r_k = 0$

  残量之间是欧式正交的

搜索方向的迭代更新

- 我们确定了步长$\alpha_k = \frac{r_k^T r_k}{p_k^T H p_k}$和解的更新公式$x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k$
- 下一步寻找搜索方向的迭代公式
- 要求$p_0, p_1, \ldots, p_n$两两的H共轭的
- 现有前k个搜索方向$p_0, p_1, \ldots, p_k$，我们要构造p_{k+1}

  新方向由当前残量和上一个方向线性组合而成

  $$p_{k+1} = r_{k+1} + \beta_k p_k$$
  $$(r_{k+1} + \beta_k p_k)^T H p_k = 0$$
  $$r_{k+1}^T H p_k + \beta_k p_k^T H p_k = 0$$

$$r_{k+1}^T H p_k + \beta_k p_k^T H p_k = 0$$

- $r_{k+1} = g - Hx_{k+1} = g - H(x_k + \alpha_k p_k) = g - Hx_k - \alpha_k Hp_k$

  $= r_k - \alpha_k Hp_k$
- $Hp_k = \frac{r_k - r_{k-1}}{\alpha_k}$
- 将其带入$r_{k+1}^T Hp_k = r_{k+1}^T \frac{r_k - r_{k+1}}{\alpha_k}$

  $$r_{k+1}^T Hp_k = -\frac{r_{k+1}^T r_{k+1}}{\alpha_k}$$
- $\beta_k p_k^T H p_k = \frac{r_{k+1}^T r_{k+1}}{\alpha_k} = \frac{r_{k+1}^T r_{k+1}}{\frac{r_k^T r_k}{p_k^T H p_k}}$
- $\beta_k = \frac{r_{k+1}^T r_{k+1}}{r_k^T r_k}$

终止条件

- 残差阈值

  残差的内积rdotr 小于预设阈值

- 最大迭代步数

  如果本身矩阵条件够好

  只需要一定步数就足够

  减少计算成本