极小化方法

一、与线性方程组等价的变分问题

二、最速下降法

三、共轭梯度法(共轭斜量法)

四、预条件共轭梯度法

一、与线性方程组等价的变分问题

设$x, y \in R^n$, 记 $(x, y) = x^T y$

- $(x, y) = (y, x)$;
- $(tx, y) = t(x, y)$;
- $(x+y, z) = (x, z) + (y, z)$;
- $(x, x) \geq 0$, 且$(x, x) = 0 \Leftrightarrow x = 0$;

设A是n阶对称正定阵

- $(Ax, y) = (x, Ay)$;
- $(Ax, x) \geq 0$, 且$(Ax, x) = 0 \Leftrightarrow x = 0$

设A对称正定，求解的线性方程组为

$$Ax = b \tag{1}$$

其中$A=(a_{ij})\in R^{n\times n}, x=(x_1,x_2,\ldots,x_n)^T, b=(b_1,b_2,\ldots,b_n)^T$

对应的二次函数φ：$R^{n\times n}\to R$，称为模函数，定义为

$$\varphi(x)=\frac{1}{2}(Ax,x)-(b,x)=\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}a_{ij}x_ix_j-\sum_{i=1}^{n}b_ix_i \tag{2}$$

例：$\quad A=\begin{bmatrix}1 & 2\\ 2 & 6\end{bmatrix},\qquad b=\begin{bmatrix}4\\ 10\end{bmatrix}$

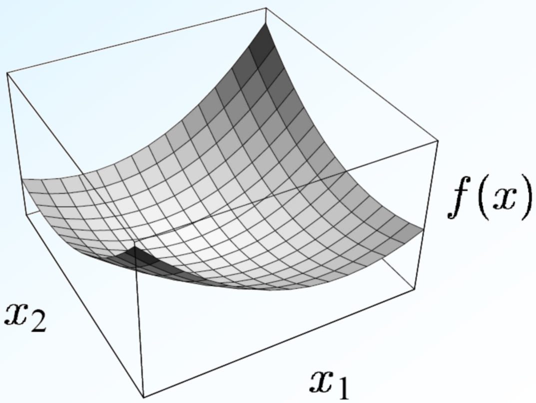
$$\varphi(x)=\frac{1}{2}(x_1^2+6x_2^2+4x_1x_2)-(4x_1+10x_2)$$

模函数(二维)

正定

$x^T A x > 0$

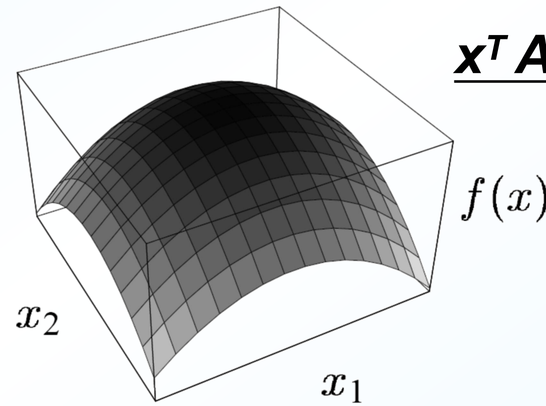
(a)



(b)

负定

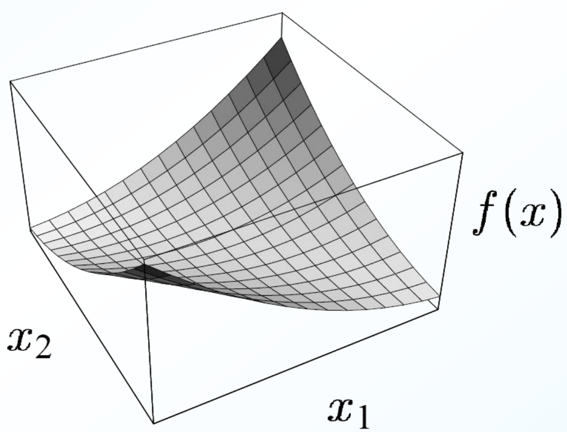
$x^T A x < 0$



(c)

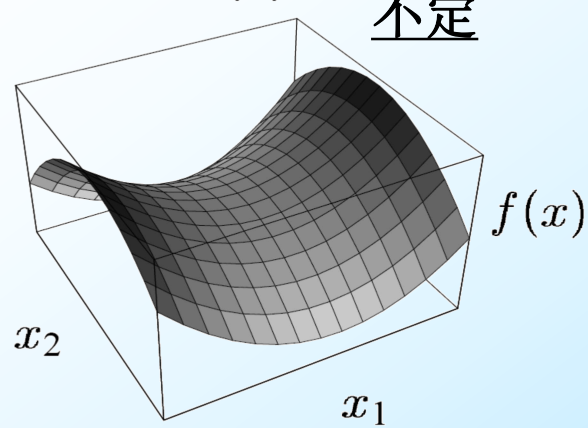
正不定

$x^T A x \geq 0$

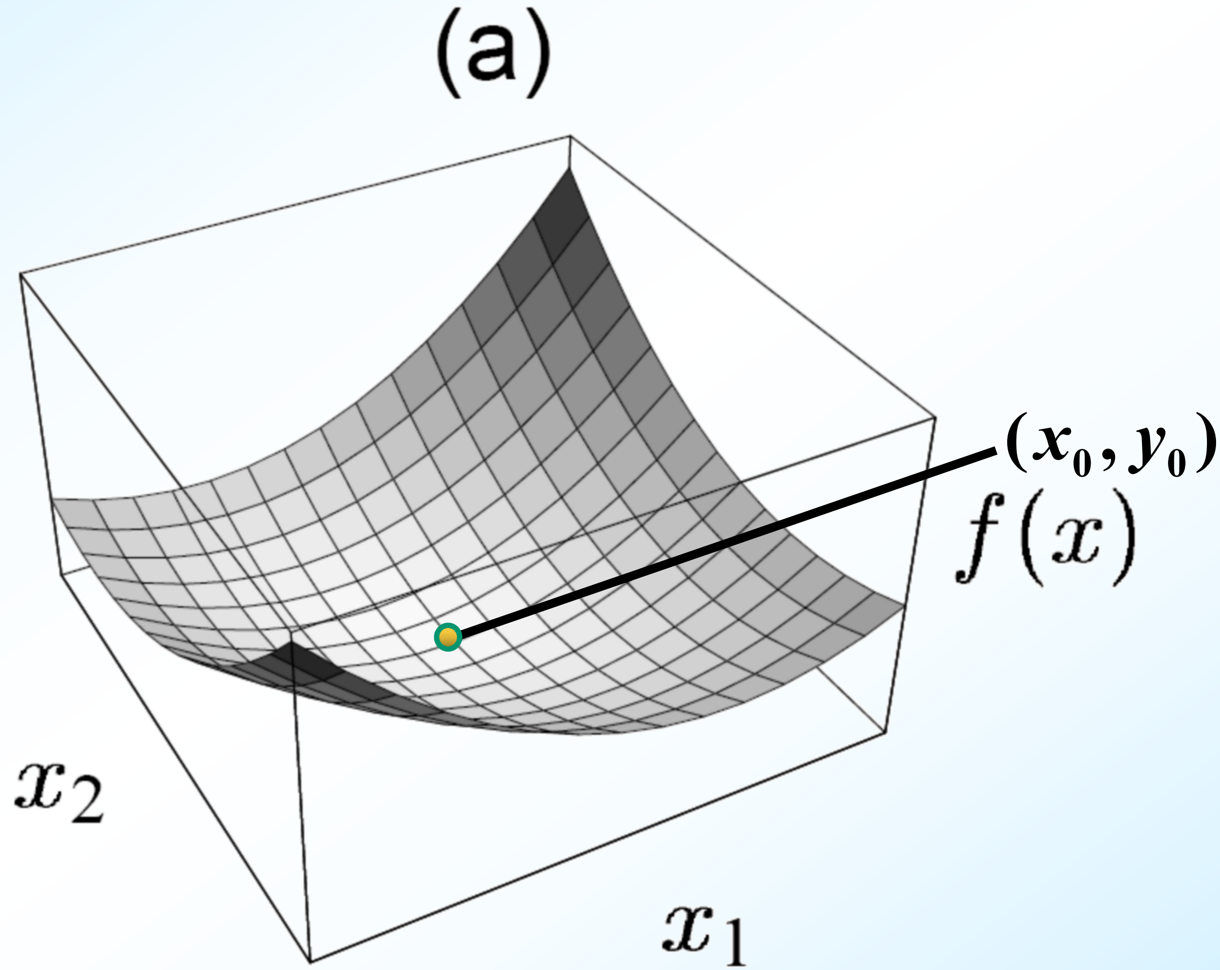


(d)

不定



正定的情形



$$\varphi(x)=\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}a_{ij}x_ix_j-\sum_{i=1}^{n}b_ix_i$$

φ有如下性质：

（1）对一切$x\in R^n$，有$\nabla\varphi(x)=\mathrm{grad}\,\varphi(x)=Ax-b=-r$（3）

证：
$$\frac{\partial\varphi}{\partial x_i}=\sum_{j=1}^{n}a_{ij}x_j-b_i=-r_i,\qquad i=1,2,\ldots,n$$

$$grad\,\varphi(x)=\begin{bmatrix}\frac{\partial\varphi}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial\varphi}{\partial x_n}\end{bmatrix}^T=Ax-b=-r$$

（2）对一切$x, y \in R^n, \alpha \in R$

$$\varphi(x+\alpha y)=\frac{1}{2}(A(x+\alpha y), x+\alpha y)-(b, x+\alpha y)$$

$$=\frac{1}{2}(Ax, x)-(b, x)+\alpha(Ax, y)-\alpha(b, y)+\frac{\alpha^2}{2}(Ay, y)$$

$$=\varphi(x)+\alpha(Ax-b, y)+\frac{\alpha^2}{2}(Ay, y) \qquad (4)$$

$$\boxed{\varphi(x)=\frac{1}{2}(Ax, x)-(b, x)}$$

定理1 设$A=(a_{ij})_{n\times n}$为**实对称正定矩阵**, b, $x\in R^n$, 则 x使二次函数

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

取极小值 $\Leftrightarrow x$ 是线性方程组$Ax=b$ 的解。

证明：**必要性(解是极小值点)**. 设 u 是 $Ax=b$的解

$$\Rightarrow \quad Au=b \quad \Rightarrow \quad f(u)=-\frac{1}{2}(Au,u)$$

对任意 $x\in R^n$, 只须证明 $f(x)-f(u)\geqslant 0$

$$f(x)-f(u)=\frac{1}{2}(Ax,x)-(b,x)+\frac{1}{2}(Au,u)$$

$$=\frac{1}{2}(A(x-u),(x-u))\geq 0$$

充分性. 设u使 $f(x)$取极小值. 取非零向量 $x\in R^n$,

对任意 $t\in R$, 有

$$f(u+tx)=\frac{1}{2}(A(u+tx),u+tx)-(b,u+tx)$$

$$=f(u)+t(Au-b,x)+\frac{t^2}{2}(Ax,x)$$

令 $g(t)=f(u+tx)$，由于$g(t)$是关于t的连续函数，当 $g'(t)=0$，取得极小值。

另一方面令 $g(t)=f(u+tx)$，当 $t=0$ 时，$g(0)=f(u)$ 达到极小值。

于是 $g'(0)=0$，即

$$(Au-b,x)=0 \quad \Rightarrow \quad Au-b=0$$

所以，u是方程组$Ax=b$的解.

求二次函数$\varphi(x)$极小值点的一般方法是：

构造一个向量序列$\{x^{(k)}\}$，使$\varphi(x^{(k)}) \to \min \varphi(x)$

可以采取以下方法：

（1）任取一个初始向量$x^{(0)}$，

（2）构造迭代格式

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k p^{(k)}, \qquad (k = 0,1,\ldots)$$

其中$p^{(k)}$是搜索方向，α_k是搜索步长，

（3）选择$p^{(k)}$和α_k使得

$$\varphi(x^{(k+1)}) = \varphi(x^{(k)} + \alpha_k p^{(k)}) < \varphi(x^{(k)})$$

则当$k \to \infty$时，有$\varphi(x^{(k)}) \to \varphi(x^*) = \min_{x \in R^n} \varphi(x)$

（4）算出误差限ε，直到

$$\left\| x^{(k)} - x^{(k-1)} \right\| < \varepsilon \text{或} \left\| r^{(k)} \right\| = \left\| b - Ax^{(k)} \right\| < \varepsilon$$

迭代为止。

对迭代格式

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k p^{(k)}, \qquad (k = 0, 1, \ldots)$$

关键是要确定搜索方向p$^{(k)}$和搜索步长α_k。

（1）确定搜索方向p$^{(k)}$

最速下降法：p$^{(k)}$取为模函数$\varphi(x)$减少最快的方向，

即 :$\varphi(x)$的负梯度方向$-\mathrm{grad}(\varphi(x))$.

共轭斜量法：取A－共轭方向p$^{(k)}$。

（2）确定搜索步长α_k

确定α_k使得从k步到k+1步是最优的，即：

$$\varphi(x^{(k+1)}) = \varphi(x^{(k)} + \alpha_k p^{(k)}) = \min_{\alpha} \varphi(x^{(k)} + \alpha p^{(k)})$$

这称为沿p$^{(k)}$方向的一维极小搜索。$\varphi(x^{(k+1)})$是局部极小。

对确定的搜索方向$p^{(k)}$，构造一个α的函数

$$F(\alpha)=\varphi(x^{(k+1)})=\varphi(x^{(k)}+\alpha p^{(k)})$$

$$=\frac{1}{2}(A(x^{(k)}+\alpha p^{(k)}),x^{(k)}+\alpha p^{(k)})-(b,x^{(k)}+\alpha p^{(k)})$$

$$=\frac{1}{2}(Ax^{(k)},x^{(k)})-(b,x^{(k)})+\alpha(Ax^{(k)},p^{(k)})-\alpha(b,p^{(k)})$$

$$+\frac{\alpha^2}{2}(Ap^{(k)},p^{(k)})$$

$$=\varphi(x^{(k)})+\alpha(Ax^{(k)}-b,p^{(k)})+\frac{\alpha^2}{2}(Ap^{(k)},p^{(k)})$$

$$=\varphi(x^{(k)})-\alpha(r^{(k)},p^{(k)})+\frac{\alpha^2}{2}(Ap^{(k)},p^{(k)})$$

令$F'(\alpha)=0$,即$:-(r^{(k)},p^{(k)})+\alpha(Ap^{(k)},p^{(k)})=0$

得 $$\alpha=\frac{(r^{(k)},p^{(k)})}{(Ap^{(k)},p^{(k)})}$$

$$F'(\alpha)=-(r^{(k)},p^{(k)})+\alpha(Ap^{(k)},p^{(k)})$$

$$\because F''(\alpha)=(Ap^{(k)},p^{(k)})>0,\qquad (A\text{正定})$$

取 $\alpha_k=\dfrac{(r^{(k)},p^{(k)})}{(Ap^{(k)},p^{(k)})}$， α_k是$\varphi(x^{(k)}+\alpha p^{(k)})$下降的极小值点，

即α_k是$k\to k+1$步的最优步长。

二、最速下降法

最速下降法： $p^{(k)}$取为模函数$\varphi(x)$减少最快的方向，即：$\varphi(x)$的负梯度方向$-\mathrm{grad}(\varphi(x))$，

$$p^{(k)}=-\mathrm{grad}(\varphi(x^{(k)}))=r^{(k)}.$$

从$x^{(0)}$出发寻找$\varphi(x)$的极小点，$\varphi(x)=\varphi(x^{(0)})$是$\varphi(x)$的等值面，因为$A$正定，它是$n$维空间的一个椭球面，从$x^{(0)}$出发先找一个使$\varphi(x)$减小最快的方向，这就是正交于椭球面的$\varphi(x)$负梯度方向$-\nabla\varphi(x^{(0)})$.

最速下降算法：

(1) 选取 $x^{(0)} \in R^n$

(2) 对 $k = 0,1,2,\ldots.$

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

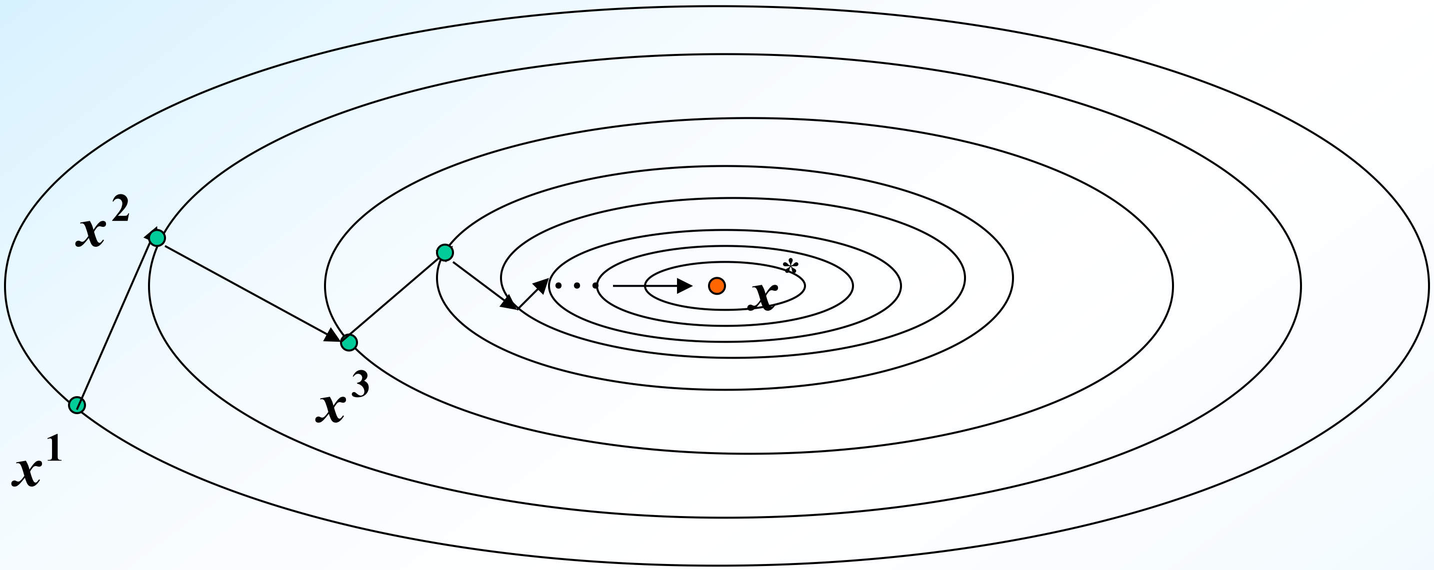
$$\alpha_k = \frac{(r^{(k)}, r^{(k)})}{(Ar^{(k)}, r^{(k)})}$$

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

(3)当 $\left\| x^{(k+1)} - x^{(k)} \right\| < \varepsilon$ 时，终止迭代。

$$\boxed{\alpha = \frac{\left(r^{(k)}, p^{(k)}\right)}{\left(Ap^{(k)}, p^{(k)}\right)}}$$

目标函数为二次函数，　其等值面为椭球面。



注　　最速下降方向反映了目标函数的一种局部性质。它只是局部目标函数值下降最快的方向。

最速下降法是线性收敛的算法。

不难验证，相邻两次的搜索方向是正交的，即

$$(r^{(k+1)}, r^{(k)}) = 0$$

容易看到，$\left\{\varphi(x^{(k)})\right\}$是单调下降有界序列，它存在极限，

可以证明 $\lim\limits_{k\to\infty} x^{(k)} = x^* = A^{-1}b$

而且 $\left\| x^{(k)} - x^* \right\|_A \le \left(\dfrac{\lambda_1 - \lambda_n}{\lambda_1 + \lambda_n} \right)^k \left\| x^{(0)} - x^* \right\|_A$

其中λ_1, λ_n分别是对称正定阵A的最大、最小特征值，

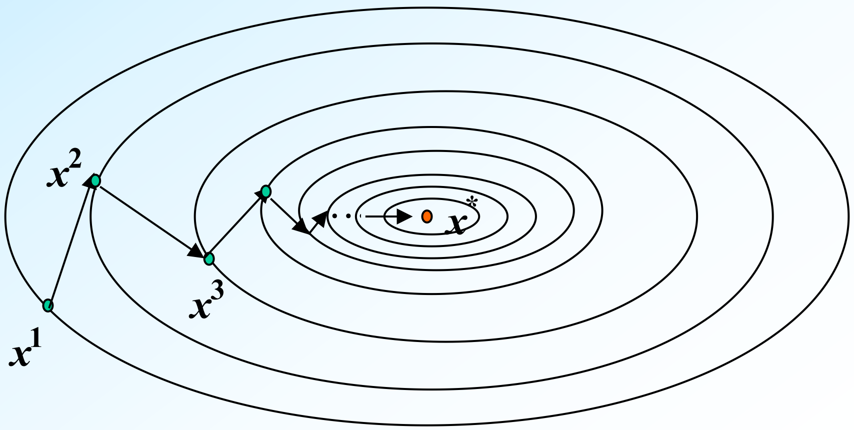
$\|u\|_A = (Au, u)^{1/2}$

当$\lambda_1 >> \lambda_n$时，收敛是很慢的，

当$\left\| r^{(k)} \right\|$很小时，因舍入误差的影响，计算将出现不稳定现象。

三、共轭梯度法 (CG) (共轭斜量法)

$\nabla f(x) = AX\text{-}b$



$$x^* = x^{(1)} + tp^{(1)}, t \in R$$

$$\underline{Ax^* - b} = \underline{Ax^{(1)} - b} + tAp^{(1)}$$

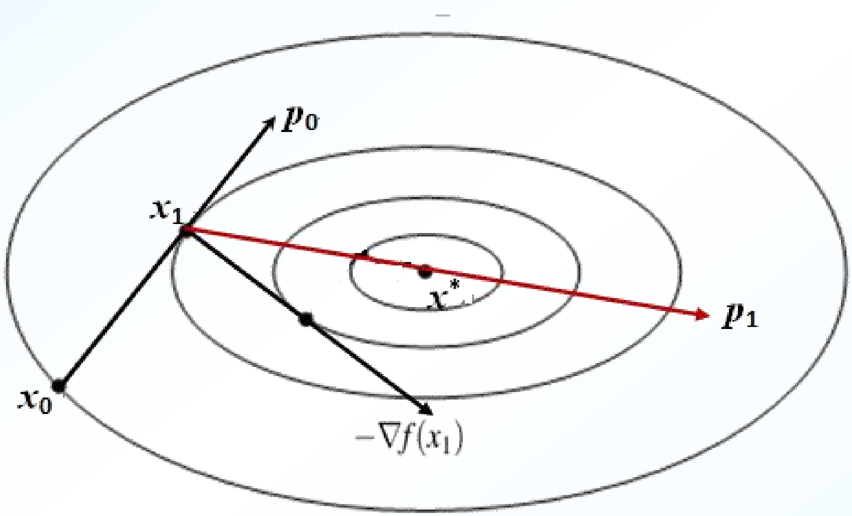
$$\nabla f(x^*) = \nabla f(x^{(1)}) + tAp^{(1)}$$

$$0 = \underline{\nabla f(x^{(1)}) + tAp^{(1)}}$$

$$0 = p^{(0)^T} \nabla f(x^{(1)}) + tp^{(0)^T} Ap^{(1)}$$

$$0 = p^{(0)^T} Ap^{(1)}$$

共轭

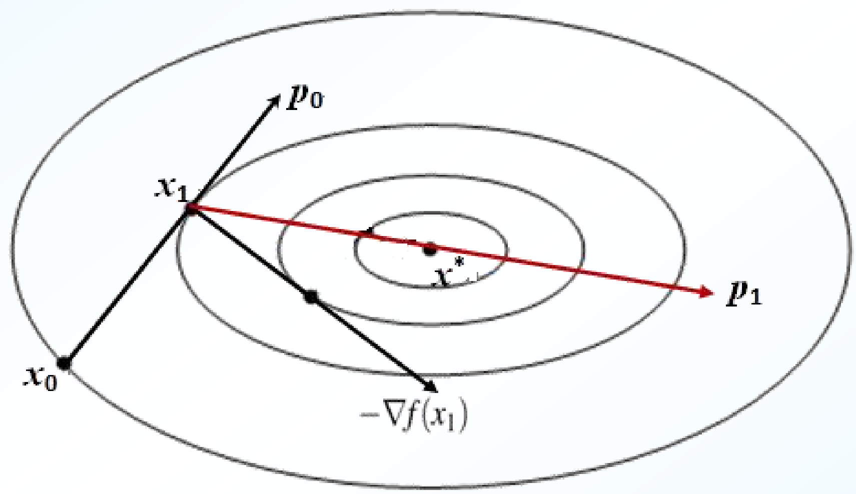


对于二维问题，如何计算p_1

由于 $-\nabla f(x)\perp p^{(0)}$

并且 $p^{(0)},\nabla f(x),p^{(1)}$ 共面

所以 $p^{(1)}=-\nabla f(x)+\beta_1 p^{(0)}$



上式两边左乘 $\left(p^{(0)}\right)^T A$ 得

$$\left(p^{(0)}\right)^T Ap^{(1)}=-\left(p^{(0)}\right)^T A\nabla f(x)+\beta_1\left(p^{(0)}\right)^T Ap^{(0)}$$

由于$p^{(0)}$和$p^{(1)}$共轭，得

$$0=-\left(p^{(0)}\right)^T A\nabla f(x)+\beta_1\left(p^{(0)}\right)^T Ap^{(0)}$$

从而

$$\boxed{\beta_1=\frac{\left(p^{(0)}\right)^T A\nabla f(x)}{\left(p^{(0)}\right)^T Ap^{(0)}}}$$

对多维问题的推广

二维的迭代格式：

$$x^* = x^{(1)} + tp^{(1)}, t \in R$$

$$t = \frac{(r^{(k)}, p^{(k)})}{(Ap^{(k)}, p^{(k)})}$$

对多维问题的迭代格式：

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k p^{(k)}$$

不失一般性地设$x^{(0)}=0$，反复利用上式 有：

$$x^{(k+1)} = \alpha_0 p^{(0)} + \alpha_1 p^{(1)} + ... + \alpha_k p^{(k)}$$

现在考虑$p^{(0)}, p^{(1)}, ...$，取什么方向?

定义 A对称正定，若R^n中向量组$\left\{p^{(0)},\ldots,p^{(l)}\right\}$满足

$$(Ap^{(i)},p^{(j)})=0,\qquad i\neq j$$

则称它为R^n中的一个$A-$共轭向量组，或称$A-$正交向量组。

注：

1、当$l<n$时，不含零向量的$A-$共轭向量组线性无关；

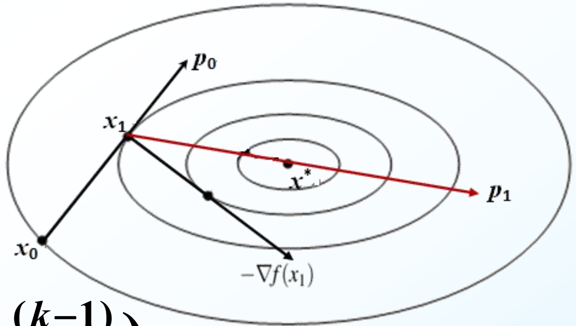
2、当$A=I$时，$A-$共轭性质就是一般的正交性；

3、给了一组线性无关的向量，可以按$Schmidt$正交化的方法得到对应的$A-$共轭向量组。

$$p^{(1)}=-\nabla f(x)+\beta_1 p^{(0)}$$

计算$p^{(k)}$：

取$p^{(0)}=r^{(0)}$，$p^{(k)}$就取为与$p^{(0)},\ldots,p^{(k-1)}$ $A-$共轭的向量，这样的向量不是唯一的，CG法中取$p^{(k)}$为$r^{(k)}$与$p^{(k-1)}$的线性组合，设



$$p^{(k)}=r^{(k)}+\beta_{k-1}p^{(k-1)}$$

利用

$$\begin{aligned}(p^{(k)},Ap^{(k-1)})&=(r^{(k)}+\beta_{k-1}p^{(k-1)},Ap^{(k-1)})\\&=(r^{(k)},Ap^{(k-1)})+\beta_{k-1}(p^{(k-1)},Ap^{(k-1)})\\&=0,\end{aligned}$$

可得

$$\beta_{k-1}=-\frac{(r^{(k)},Ap^{(k-1)})}{(p^{(k-1)},Ap^{(k-1)})}$$

可以证明这样得到的向量序列$\{p^{(k)}\}$是一个$A-$共轭向量组.

$$\alpha = \frac{(r^{(k)}, p^{(k)})}{(Ap^{(k)}, p^{(k)})}$$

计算汇总：

$$\beta_{k-1} = -\frac{(r^{(k)}, Ap^{(k-1)})}{(p^{(k-1)}, Ap^{(k-1)})}$$

$$p^{(k)} = r^{(k)} + \beta_{k-1} p^{(k-1)}$$

$$\alpha_k = \frac{(r^{(k)}, p^{(k)})}{(Ap^{(k)}, p^{(k)})}$$

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k p^{(k)}$$

$$r^{(k+1)} = b - Ax^{(k+1)} = r^{(k)} - \alpha_k Ap^{(k)}$$

公式α_k化简

$$\alpha_k = \frac{(r^{(k)}, p^{(k)})}{(Ap^{(k)}, p^{(k)})}$$

$$r^{(k+1)} = r^{(k)} - \alpha_k A p^{(k)}$$

由上面两式有

$$(r^{(k+1)}, p^{(k)}) = (r^{(k)},\ p^{(k)}) - \alpha_k (Ap^{(k)},\ p^{(k)}) = 0$$

由 $p^{(k)} = r^{(k)} + \beta_{k-1} p^{(k-1)}$有

$$(r^{(k)},\ p^{(k)}) = (r^{(k)},\ r^{(k)} + \beta_{k-1} p^{(k-1)}) = (r^{(k)},\ r^{(k)})$$

从而有：

$$\alpha_k = \frac{(r^{(k)}, p^{(k)})}{(Ap^{(k)}, p^{(k)})} = \frac{(r^{(k)}, r^{(k)})}{(Ap^{(k)}, p^{(k)})}$$

当$r^{(k)} \neq 0$时， $\alpha_k > 0.$

公式β_k化简

$$\beta_{k-1} = -\frac{(r^{(k)}, Ap^{(k-1)})}{(p^{(k-1)}, Ap^{(k-1)})}$$

$$Ap^{(k)} = \alpha_k^{-1}\left(r^{(k+1)} - r^{(k)}\right) \Longleftarrow r^{(k+1)} = r^{(k)} - \alpha_k Ap^{(k)},$$

$$\beta_k = -\frac{(r^{(k+1)}, Ap^{(k)})}{(p^{(k)}, Ap^{(k)})} = -\frac{(r^{(k+1)}, \alpha_k^{-1}(r^{(k)} - r^{(k+1)}))}{(p^{(k)}, Ap^{(k)})}$$

$$= -\frac{\alpha_k^{-1}(r^{(k+1)}, r^{(k+1)})}{(p^{(k)}, Ap^{(k)})} = \frac{(r^{(k+1)}, r^{(k+1)})}{(r^{(k)}, r^{(k)})}$$

$$\alpha_k = \frac{(r^{(k)}, r^{(k)})}{(Ap^{(k)}, p^{(k)})}$$

当$r^{(k+1)} \neq 0$时，$\beta_k > 0$.

改进的CG算法:

(1)$x^{(0)} \in R^{(n)}$

(2)$r^{(0)} = b - Ax^{(0)}, p^{(0)} = r^{(0)}$

(3)$k = 0, 1, \ldots,$

$$\alpha_k = \frac{(r^{(k)}, r^{(k)})}{(Ap^{(k)}, p^{(k)})},$$

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k p^{(k)},$$

$$r^{(k+1)} = r^{(k)} - \alpha_k Ap^{(k)},$$

$$\beta_k = \frac{(r^{(k+1)}, r^{(k+1)})}{(r^{(k)}, r^{(k)})},$$

$$p^{(k+1)} = r^{(k+1)} + \beta_k p^{(k)},$$

注：

(1) 剩余向量相互正交，而R^n中至多有n个相互正交的非零向量，所以$r^{(0)},r^{(1)},\ldots,r^{(n)}$中至少有一个向量为零。若$r^{(k)}=0$，则$x^{(k)}=x^*$.

(2)实际计算中，由于舍入误差的影响，n步内得不到准确解，故还需继续迭代。一般因$p^{(0)},p^{(1)},\ldots,p^{(n\text{-}1)}$是一组$A$-共轭向量组，继续迭代时，要取$x^{(0)}=x^{(n)}$.

(3)由误差估计式

$$\left\|x^{(k)}-x^*\right\|_A \le 2\left[\frac{\sqrt{cond(A)_2}-1}{\sqrt{cond(A)_2}+1}\right]^k \left\|x^{(0)}-x^*\right\|_A$$

当A的条件数很小时，共轭斜量法收敛很快，但当A是病态严重的矩阵时，共轭斜量法收敛速度很慢。可采用预处理技术，降低A的条件数。

方法对比

最速下降算法:

(1) 选取$x^{(0)} \in R^n$

(2) 对$k = 0,1,2,....$

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

$$\alpha_k = \frac{(r^{(k)}, r^{(k)})}{(Ar^{(k)}, r^{(k)})}$$

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

(3)当$\left\| x^{(k+1)} - x^{(k)} \right\| < \varepsilon$ 时, 终止迭代。

改进的CG算法:

(1)$x^{(0)} \in R^{(n)}$

(2)$r^{(0)} = b - Ax^{(0)}, p^{(0)} = r^{(0)}$

(3)$k = 0,1,...,$

$$\alpha_k = \frac{(r^{(k)}, r^{(k)})}{(Ap^{(k)}, p^{(k)})},$$

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k p^{(k)},$$

$$r^{(k+1)} = r^{(k)} - \alpha_k A p^{(k)},$$

$$\beta_k = \frac{(r^{(k+1)}, r^{(k+1)})}{(r^{(k)}, r^{(k)})},$$

$$p^{(k+1)} = r^{(k+1)} + \beta_k p^{(k)},$$

方法对比

最速下降法的收敛性结果

$$\left\|x^{(k)}-x^*\right\|_A \le \left(\frac{\lambda_1-\lambda_n}{\lambda_1+\lambda_n}\right)^k \left\|x^{(0)}-x^*\right\|_A$$

其中λ_1,λ_n分别是对称正定阵A的最大、最小特征值, $\|u\|_A=(Au,u)^{1/2}$

共轭梯度法的收敛性结果

$$\left\|x^{(k)}-x^*\right\|_A \le 2\left[\frac{\sqrt{cond(A)_2}-1}{\sqrt{cond(A)_2}+1}\right]^k \left\|x^{(0)}-x^*\right\|_A$$

当A的条件数很小时，两种方法收敛都很快，但当A是病态严重的矩阵时，两个方法收敛速度都慢。整体上看，一般共轭梯度法优于最速下降法。

四、预条件共轭梯度法(PCG)

寻找一个非奇异矩阵C，使$\overline{A}=C^{-1}AC^{-T}$的条件数比原系数矩阵A的条件数得到改善.

$$Ax=b \quad \Leftrightarrow C^{-1}AC^{-T}C^{T}x=C^{-1}b \Leftrightarrow \overline{A}\,\overline{x}=\overline{b}$$

其中 $\overline{A}=C^{-1}AC^{-T},\overline{b}=C^{-1}b,\overline{x}=C^{T}x,$

令

$$M=CC^{T}\approx A,$$

$$\overline{A}=C^{-1}AC^{-T}\approx C^{-1}MC^{-T}=C^{-1}CC^{T}C^{-T}$$

$$=I,\quad cond(\overline{A})_2\approx 1$$

令$M=CC^{T}$称为预优矩阵，当M接近A时,$\overline{A}$接近单位阵，$\mathrm{cond}(\overline{A})_2$接近1，对$\overline{A}\,\overline{x}=\overline{b}$用共轭斜量法求解，可达到加速的目的。

预条件共轭梯度法

1、计算 $\overline{A} = C^{-1}AC^{-T}, \overline{b} = C^{-1}b$

2、解 $\overline{A}\,\overline{x} = \overline{b}$，得 $\overline{x}^{(k)}$，

(1) $\overline{x}^{(0)} \in R^{(n)}$

(2) $\overline{r}^{(0)} = b - \overline{A}\,\overline{x}^{(0)}, \overline{p}^{(0)} = \overline{r}^{(0)}$

(3) $k = 0,1,\ldots,$

$$\overline{\alpha}_k = \frac{(\overline{r}^{(k)}, \overline{r}^{(k)})}{(\overline{A}\,\overline{p}^{(k)}, \overline{p}^{(k)})}$$

$$\overline{x}^{(k+1)} = \overline{x}^{(k)} + \overline{\alpha}_k \overline{p}^{(k)},$$

$$\overline{r}^{(k+1)} = \overline{r}^{(k)} - \overline{\alpha}_k \overline{A}\,\overline{p}^{(k)},$$

$$\overline{\beta}_k = \frac{(\overline{r}^{(k+1)}, \overline{r}^{(k+1)})}{(\overline{r}^{(k)}, \overline{r}^{(k)})}$$

$$p^{(k+1)} = r^{(k+1)} + \beta_k p^{(k)}$$

3、$x^{(k)} = C^{-T}\overline{x}^{(k)}$.

实际计算，可通过变换，转化成用原方程组的量来计算。

PCG算法：

(1)取初值$x^{(0)} \in R^{(n)}, r^{(0)} = b - Ax^{(0)}$,

(2)解方程组$Mz^{(0)} = r^{(0)}$,求出$z^{(0)}$，令$p^{(0)} = z^{(0)}$

(3)$k = 0,1,\ldots,$

$$\alpha_k = \frac{(z^{(k)}, r^{(k)})}{(Ap^{(k)}, p^{(k)})}$$

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k p^{(k)}$$

$$r^{(k+1)} = r^{(k)} - \alpha_k Ap^{(k)}$$

解方程组$\mathrm{M}z^{(k+1)} = r^{(k+1)}$

$$\beta_k = \frac{(z^{(k+1)}, r^{(k+1)})}{(z^{(k)}, r^{(k)})} \qquad p^{(k+1)} = z^{(k+1)} + \beta_k p^{(k)}$$

(4)直到$\left\| r^{(k+1)} \right\| < \varepsilon$,输出$x^{(k+1)}$。