共轭梯度法 (Conjugate Gradient Method) [1]

leolinuxer

August 7, 2020

Contents

1 背景和前置知识

1.1 CG 的适用场景

CG(Conjugate Gradient，共轭梯度) 算法是迭代式的算法，适用于求解如下形式的大规模线性方程组：

$$Ax = b$$

其中 x 是未知向量，b 是已知向量，A 是已知的、对称的、正定的（或非正定)、方阵。

类似 CG 类的迭代式方法，适用于 A 是稀疏矩阵的情况。

上式的展开形式为：

$$\begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1n} \\ A_{21} & A_{22} & \cdots & A_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{n1} & A_{n2} & \cdots & A_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix}$$

1.2 内积

两个向量 x, y 的内积记作：$x^T y$，表示对应元素的乘积和：$\sum_{i=1}^{n} x_i y_i$。

向量的内积满足：

$$x^T y = y^T x$$

如果 x 和 y 正交，则 $x^T y = 0$。

1.3 正定矩阵

如果对于任意非零向量 x，都有：

$$x^T A x \geq 0$$

则称 A 为正定矩阵。

1.4 矩阵的性质

$$(AB)^T = B^T A^T$$

$$(AB)^{-1} = B^{-1} A^{-1}$$

2 特征值和特征向量

2.1 特征向量的性质

给定矩阵 B 的特征向量 v，二者的乘积 Bv 只会对 v 形成比例变化 (或反向比例变化)，而不会形成旋转变化，也就是说 Bv 满足：$Bv = \lambda v$，其中 λ 是特征值。

对于任意常量 α，向量 αv 也是 B 的特征向量，特征值同样为 λ。这是因为 $B(\alpha v) = \alpha Bv = \lambda(\alpha v)$。

为什么需要回忆特征向量的知识点呢，这是因为迭代的方法通常都涉及到进行反复的矩阵-向量运算。当矩阵 B 反复作用于特征向量 v 后，会发生如下情况：

- 如果 $|\lambda| < 1$，那么 $B^i v = \lambda^i v$，当 i 趋近于无穷大时，$B^i v$ 会逐渐趋于 0（如图 9 所示）；
- 如果 $|\lambda| > 1$，那么 $B^i v = \lambda^i v$，当 i 趋近于无穷大时，$B^i v$ 会逐渐趋于无穷大（如图 10 所示）；

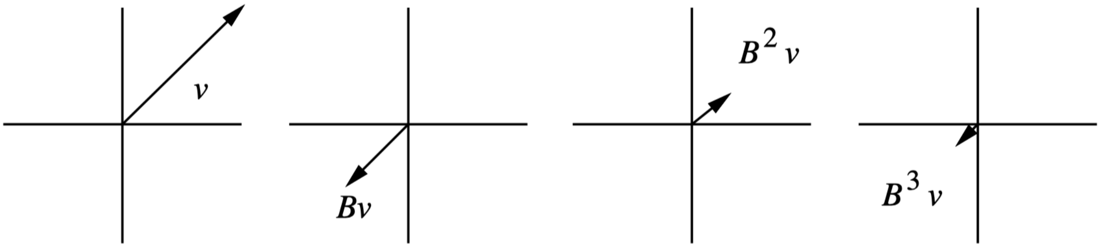


Figure 9: v is an eigenvector of B with a corresponding eigenvalue of -0.5. As i increases, $B^i v$ converges to zero.

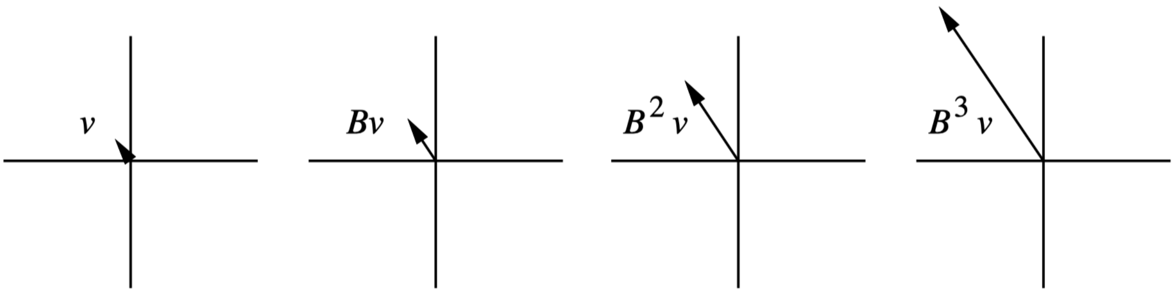


Figure 10: Here, v has a corresponding eigenvalue of 2. As i increases, $B^i v$ diverges to infinity.

如果 B 是对称矩阵，那么 B 存在 n 个线性无关的特征向量 $v_1, v_2, \cdots, v_n$（注意不是唯一集合，因为特征向量可以进行比例变换）和对应的 n 个特征值 $\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n$（特征值是唯一的，特征值间可以相等，也可以不等）。

2.2 谱半径

因为对称矩阵 B 的 n 个特征向量是线性无关的，所以**这组特征向量构成了空间 $\mathbb{R}^n$ 的一组正交基**。所以，当 B 与非特征向量 x 进行乘法时，可以把 x 用它的特征向量进行表示，然后分别观察在各个基上结果的变化。如图 11 所示，给定向量 x，将其表示为两个基向量 v_1, v_2 的和。那么

$Bx = B(v_1 + v_2) = Bv_1 + Bv_2$，所以 $B^i x = B^i v_1 + B^i v_2 = \lambda_1^i v_1 + \lambda_2^i v_2$。如果所有的特征值都小于 1，那么 $B^i x$ 会趋近于 0；如果至少有一个特征值大于 1，那么 $B^i x$ 会趋近于无穷大。由此引出了矩阵的 **谱半径（spectral radius）**：

$$\rho(B) = \max|\lambda_i|, \qquad \lambda_i\text{是}B\text{的特征向量}$$

如果期望 $B^i x$ 迅速趋近于 0，那么 $rho(B) < 1$，并且越小越好。

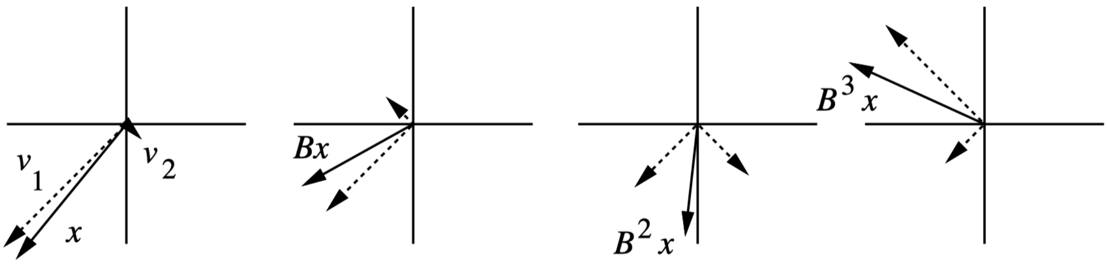


Figure 11: The vector x (solid arrow) can be expressed as a linear combination of eigenvectors (dashed arrows), whose associated eigenvalues are $\lambda_1 = 0.7$ and $\lambda_2 = -2$. The effect of repeatedly applying B to x is best understood by examining the effect of B on each eigenvector. When B is repeatedly applied, one eigenvector converges to zero while the other diverges; hence, $B^i x$ also diverges.

2.3 正定矩阵的特征值

正定矩阵的特征值均大于 0，证明如下

$$Bv = \lambda v$$
$$v^T Bv = \lambda v^T v$$

因为 B 是正定矩阵，所以对于任意非零向量 v 都有 $v^T Bv > 0$，所以必有 $\lambda > 0$。

2.4 一个具体的例子

给定矩阵 A，它的特征向量 v 和特征值 λ 满足：

$$Av = \lambda v = \lambda I v \Rightarrow (\lambda I - A)v = 0$$

因为 v 是非零向量，所以 $\det(\lambda I - A) = 0$，以后文会用到的 $A = \begin{bmatrix} 3 & 2 \\ 2 & 6 \end{bmatrix}$ 为例，有：

$$\det \begin{bmatrix} \lambda - 3 & -2 \\ -2 & \lambda - 6 \end{bmatrix} = \lambda^2 - 9\lambda + 14 = (\lambda - 7)(\lambda - 2)$$

所以，特征是是 $\lambda_1 = 7, \lambda_2 = 2$。当 $\lambda_1 = 7$ 时，有：

$$(\lambda I - A)v = \begin{bmatrix} 4 & -2 \\ -2 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \end{bmatrix} = 0$$

$$\therefore 4v_1 - 2v_2 = 0$$

任意满足该方程的解都可以构成对应的特征向量，比如 $v = [1, 2]^T$。同理，可以求得特征值 $\lambda_2 = 2$ 对应的特征向量为 $v = [-2, 1]^T$。如下图所示，A 的两个特征向量对应了图中的两个箭头，并且较大的特征值 $\lambda_1 = 7$ 对应了更陡的斜率。

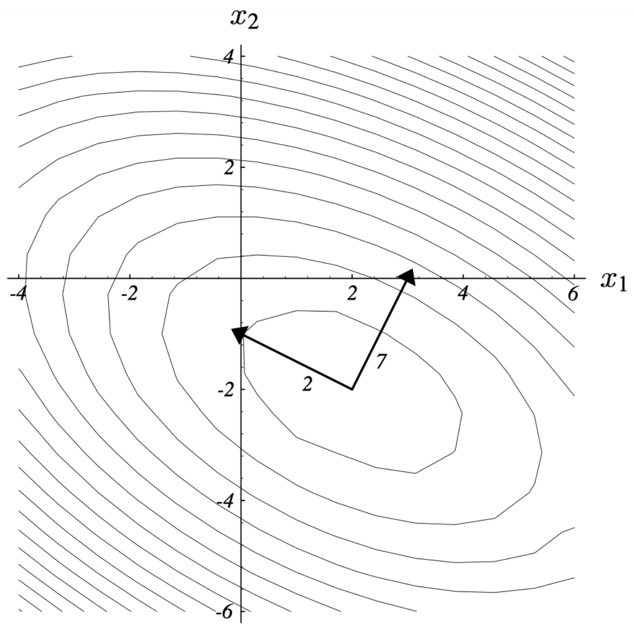


Figure 12: The eigenvectors of A are directed along the axes of the paraboloid defined by the quadratic form $f(x)$. Each eigenvector is labeled with its associated eigenvalue. Each eigenvalue is proportional to the steepness of the corresponding slope.

3 二次型 (Quadratic Form)

向量的二次型形式为：

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

其中 A 是矩阵，b 和 x 是向量，c 是常量。

如果 A 是对称正定阵，那么当 $Ax = b$ 时，$f(x)$ 取得最小值。

3.1 一个具体的例子

$$A = \begin{bmatrix} 3 & 2 \\ 2 & 6 \end{bmatrix} \qquad b = \begin{bmatrix} 2 \\ -8 \end{bmatrix} \qquad c = 0$$

$Ax = b$ 的图像如下：

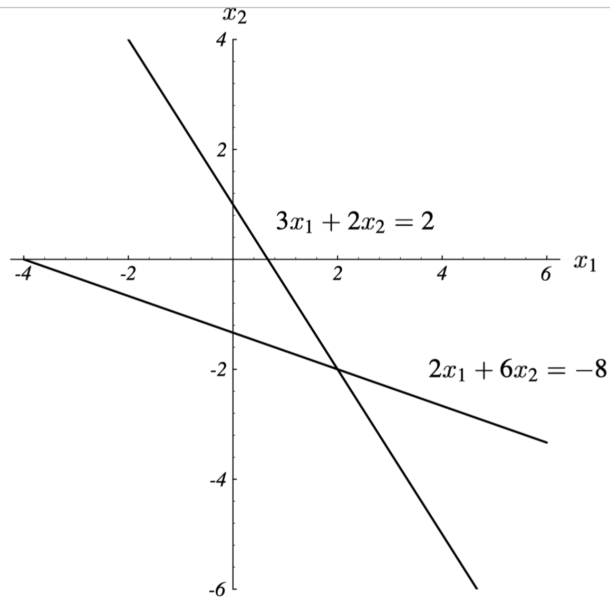
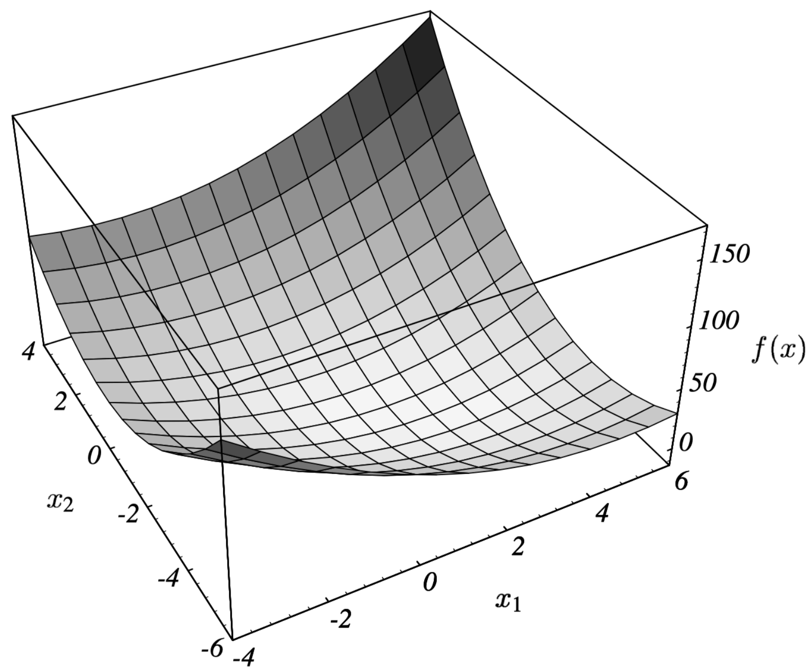


Figure 1: Sample two-dimensional linear system. The solution lies at the intersection of the lines.

方程的解位于 $n = 2$ 维超平面的交点处，每个超平面有 $n - 1 = 1$ 维。本方程的解为 $x = [2, -2]^T$；对应的二次型 $f(x)$ 的图像为：



它的等高线图如下：

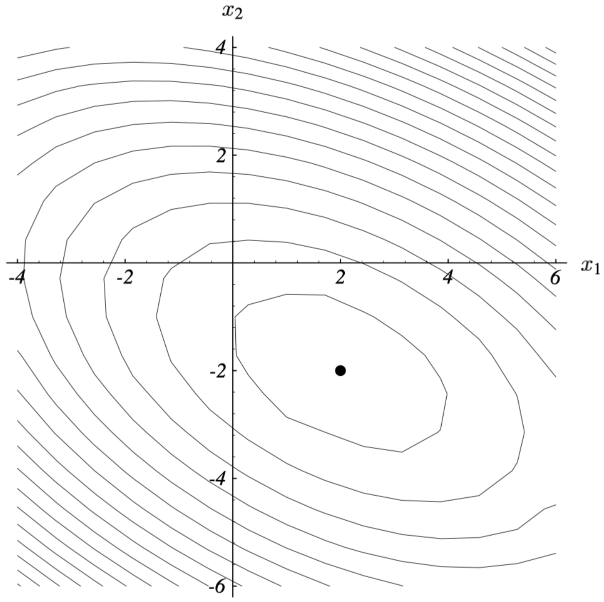


Figure 3: Contours of the quadratic form. Each ellipsoidal curve has constant $f(x)$.

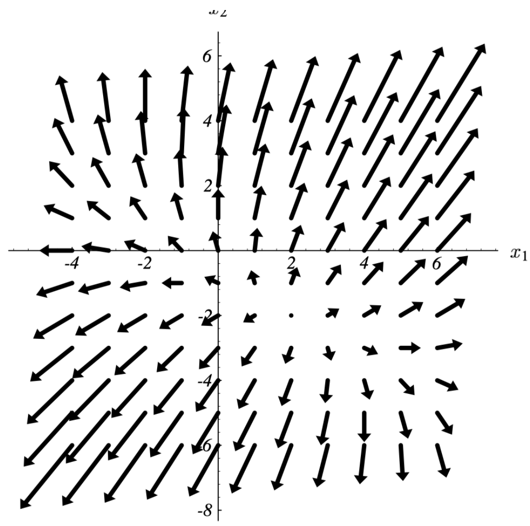
因为 A 是正定矩阵，所以 $f(x)$ 的形状为抛物面形。

3.2 梯度向量

$f(x)$ 的梯度为：

$$f'(x) = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x_1} f(x) \\ \frac{\partial}{\partial x_2} f(x) \\ \vdots \\ \frac{\partial}{\partial x_n} f(x) \end{bmatrix}$$

上面例子的梯度向量如下图所示：



当 $f'(x) = 0$ 时，$f(x)$ 可以取得最小值。

根据 $f(x)=\frac{1}{2}x^TAx-b^Tx+c$ ，有：

$$f'(x)=\frac{1}{2}A^Tx+\frac{1}{2}Ax+b$$

如果 A 是对称矩阵，那么有

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

所以，当 $f'(x)=Ax-b=0$ 时，$f(x)$ 有最小值。也就是说，$Ax=b$ 的解是 $f(x)$ 的 critical point。如果 A 是正定对称阵，那么 $Ax=b$ 的解对应 $f(x)$ 的最小值；

如果 A 不是对称阵，那么根据 $f'(x)=0$ 有：$\frac{1}{2}(A^T+A)x=b$，并且 $\frac{1}{2}(A^T+A)$ 是对称的。

3.3 进一步解释

根据 $f(x)=\frac{1}{2}x^TAx-b^Tx+c$，我们可以知道如果 A 是对称阵（无论是否正定），对于任意点 p 和 $x=A^{-1}b$，都有：

$$f(p)=f(x)+\frac{1}{2}(p-x)^TA(p-x)$$

如果 A 是正定的，那么根据正定矩阵的性质，对于任意 $p\neq x$，都有 $\frac{1}{2}(p-x)^TA(p-x)>0$，所以 $p=x$ 是 $f(x)$ 的最小值解。

证明：如果 A 是对称正定阵，那么 $Ax=b$ 的解最小化二次型

假定 A 是对称阵，e 是误差项，那么有：

$$\begin{aligned}
f(x+e)&=\frac{1}{2}(x+e)^TA(x+e)-b^T(x+e)+c\\
&=\frac{1}{2}x^TAx+e^TAx+\frac{1}{2}e^TAe-b^Tx-b^Te+c\\
&=\frac{1}{2}x^TAx-b^Tx+c+e^Tb+\frac{1}{2}e^TAe-b^Te\\
&=f(x)+\frac{1}{2}e^TAe
\end{aligned}$$

如果 A 同时也是正定的，那么对于任意 $e\neq 0$，都有 $\frac{1}{2}e^TAe>0$；所以，x 是 $f(x)$ 的最小值解。证毕。

进而，假定 $p=x+e$，即 $e=p-x$，那么有：

$$\begin{aligned}
f(p)&=f(x+e)\\
&=f(x)+\frac{1}{2}e^TAe\\
&=f(x)+\frac{1}{2}(p-x)^TA(p-x)
\end{aligned}$$

不同 A 的正定情况，对应着不同的图像如下：

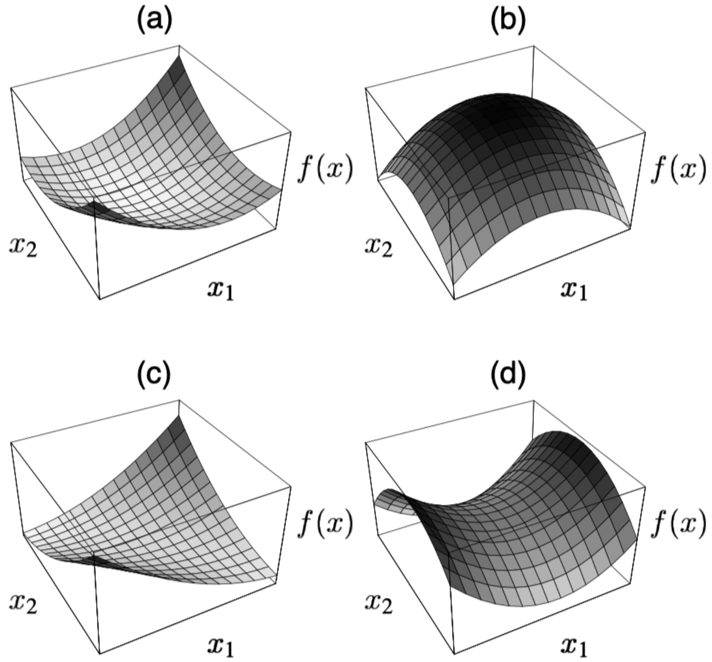


Figure 5: (a) Quadratic form for a positive-definite matrix. (b) For a negative-definite matrix. (c) For a singular (and positive-indefinite) matrix. A line that runs through the bottom of the valley is the set of solutions. (d) For an indefinite matrix. Because the solution is a saddle point, Steepest Descent and CG will not work. In three dimensions or higher, a singular matrix can also have a saddle.

4 最速下降法（Steepest Descent）

4.1 最速下降法过程推导

最速下降法：从任意点 x_0 出发，沿着梯度下降，途经点为 $x_1, x_2, \cdots$ 直到足够接近解 x。其中，每次下降都选择 f 下降最快的方向，也就是 $f'(x_i)$ 的反方向，即：$-f'(x_i) = -Ax_i + b$。

定义如下符号：

- 误差 $e_i = x_i - x$，表示 x_i 与 x 的接近程度；
- 余量 $r_i = b - Ax_i$，表示 Ax_i 与 b 的接近程度；显然，有：$r_i = -Ae_i$，所以可以把 r_i 想象为误差 e_i 经过矩阵 A 变换后得到的量。同时，有 $r_i = -f'(x_i)$，也就是说 r_i 就是最速下降的方向。

假定从 $x_0 = [-2, -2]^T$ 出发，沿着最速下降方向（图 6(a) 的实现方向）前进，到达：

$$x_1 = x_0 + \alpha r_0$$

其中 α 是前进的步长，那么，应该向前走多远呢？

可以采用线搜索（line search）的方法，寻找到能够使得沿着该方向前进后，f 取得最小值的最佳 α。如图 6(b) 所示，垂直的平面是最速下降的方向，需要找到该平面和抛物面的交点。图 6(c) 是相交得到

的抛物线（注意，横轴为 α，纵轴为 $f(x_i+\alpha r_i)$）；那么，该如何确定 α 呢，其实就是要找到该抛物线的最低点。

显然，当 $\frac{d}{d\alpha}f(x_1)=0$ 时，能够求得 f 的最小值。根据链式法则，有：$\frac{d}{d\alpha}f(x_1)=f'(x_1)^T\frac{d}{d\alpha}x_1=f'(x_1)^Tr_0$，令该式为 0，即 $f'(x_1)^Tr_0=0$，也就是说，**此时** $f'(x_1)$ **与** r_0 **正交**，如图 6 (d) 所示。

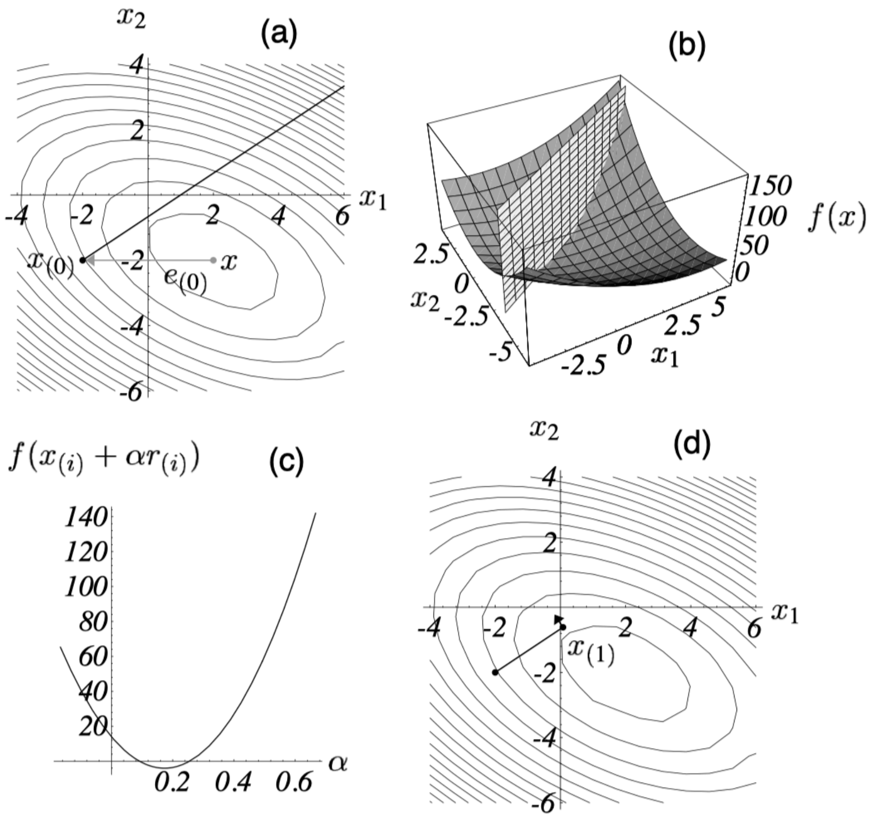


Figure 6: The method of Steepest Descent. (a) Starting at $[-2,-2]^T$, take a step in the direction of steepest descent of f. (b) Find the point on the intersection of these two surfaces that minimizes f. (c) This parabola is the intersection of surfaces. The bottommost point is our target. (d) The gradient at the bottommost point is orthogonal to the gradient of the previous step.

另外，从图 7 也可以看出来，为什么 $f'(x_1)$ 需要与 r_0 正交。图 7 的实线方向是 $f'(x_1)$ 的方向（也就是 line search 的方向），该实线上不同的点有不同的梯度方向（实线箭头），对应了 f 的不同的下降速率（虚线箭头），显然当下降速率为 0 时，f 下降的最多，也就是说，此时的梯度与 $f'(x_1)$ 是正交的。

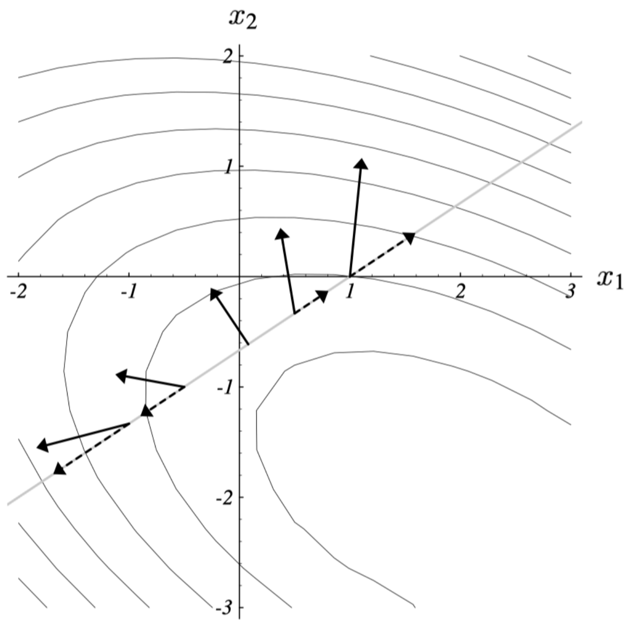


Figure 7: The gradient f' is shown at several locations along the search line (solid arrows). Each gradient's projection onto the line is also shown (dotted arrows). The gradient vectors represent the direction of steepest increase of f, and the projections represent the rate of increase as one traverses the search line. On the search line, f is minimized where the gradient is orthogonal to the search line.

因为有 $f'(x_1) = -r_1$，所以可以如下推导出 α：

$$
\begin{aligned}
f'(x_1) r_0 = 0 &\Rightarrow \\
r_1 r_0 = 0 &\Rightarrow \\
(b - Ax_1)^T r_0 &= 0 \\
(b - A(x_0 + \alpha r_0))^T r_0 &= 0 \\
(b - Ax_0)^T r_0 - \alpha (Ar_0)^T r_0 &= 0 \\
(b - Ax_0)^T r_0 &= \alpha (Ar_0)^T r_0 \Rightarrow \\
r_0^T r_0 &= \alpha r_0^T (Ar_0) \Rightarrow \\
\alpha &= \frac{r_0^T r_0}{r_0^T A r_0}
\end{aligned}
$$

汇总后，就得到了最速下降法的具体过程：

$$r_i = b - Ax_i$$

$$\alpha_i = \frac{r_0^T r_0}{r_0^T A r_0}$$

$$x_{i+1} = x_i + \alpha_i r_i$$

图 8 是该过程的具体示例：

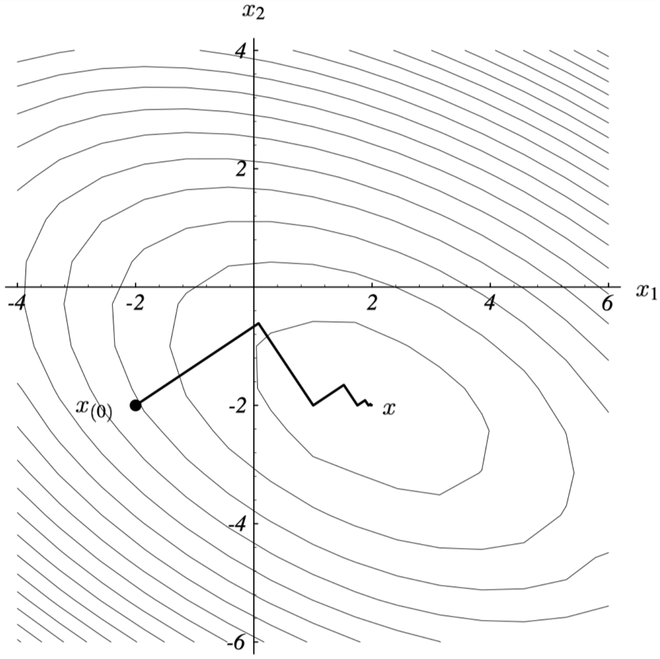


Figure 8: Here, the method of Steepest Descent starts at $[-2,-2]^T$ and converges at $[2,-2]^T$.

5 Jacobi iterations

5.1 算法介绍

使用 Jacobi 迭代法求解 $Ax=b$ 的过程如下：首先将 A 分位两部分：$A=D+E$；其中 D 是 A 的对角元素，其余元素为 0；E 是 A 的非对角元素，对角元素为 0。然后，按如下步骤求解：

$$
\begin{aligned}
Ax &= b \\
(D+E)x &= b \\
Dx &= -Ex+b \\
x &= -D^{-1}Ex+D^{-1}b \\
x &= Bx+z, \qquad B=-D^{-1}E, z=D^{-1}b
\end{aligned}
$$

因为 D 是对角线矩阵，所以很容易求逆。同时，观察最后一项：$x=Bx+z$ 可知，该方程的解 x 是其驻点（stationary point），也就是说当 $x_i=x$ 时，有 $x_{i+1}=x$；因此可以按照如下迭代的方法求解 x：

$$x_{i+1}=Bx_i+z$$

事实上，对 A 进行不同类型的分解，可以得到不同的解法，如 Gauss-Seidel 法，Successive Over-Relaxation（SOR）法等；

为了使迭代过程尽快收敛，显然需要 B 有尽量小的谱半径。

5.2 收敛性分析

假定从任意点 x_0 出发，每步迭代都有 $x_{i+1}=Bx_i+z$，将 x_i 分解为 x 和误差 e_i 的和，有：

$$\begin{aligned}x_{i+1}&=Bx_i+z\\&=B(x+e_i)+z\\&=Bx+z+Be_i\\&=x+Be_i\\\therefore e_{i+1}&=Be_i\end{aligned}$$

所以，如果 $\rho(B)<1$，那么误差项 e_i 可以收敛至 0，也就是说，选择任意初始向量 x_0 都不会影响最终结果。虽然 x_0 显然会影响迭代步数，但是起决定性因素的还是 $\rho(B)$ 。**如果 v_j 是 B 中具有最大特征值 λ_j 的特征向量，即 $\rho(B)=\lambda_j$。如果初始误差 e_0 按照 B 的特征向量分解后，包含 v_j 方向的部分，那么这部分收敛至 0 的速度是最慢的。**

5.3 Jacobi iterations 算法的缺陷

一般来说，即使 A 是对称矩阵，B 也未必是对称矩阵；并且，B 可能不存在特征向量；Jacobi iterations 的收敛速度取决于 $rou(B)$，B 又取决于 A；然而，即使 A 是正定矩阵，Jacobi 方法也未必能保证收敛。

5.4 一个具体的例子

给定矩阵 $A=\begin{bmatrix}3&2\\2&6\end{bmatrix},b=\begin{bmatrix}2\\-8\end{bmatrix}$，按照 Jacobi 方法，将 A 进行分解，有：$A=D+E$，其中：

$$D=\begin{bmatrix}3&0\\0&6\end{bmatrix}\qquad E=\begin{bmatrix}0&2\\2&0\end{bmatrix}$$

进而有：

$$D^{-1}=\begin{bmatrix}1/3&0\\0&1/6\end{bmatrix}$$

$$D^{-1}E=\begin{bmatrix}0&2/3\\1/3&0\end{bmatrix}\qquad D^{-1}b=\begin{bmatrix}2/3\\-4/3\end{bmatrix}$$

所以可以得到如下迭代过程:

$$\begin{aligned} x_{i+1} &= -D^{-1}Ex + D^{-1}b \\ &= \begin{bmatrix} 0 & -2/3 \\ -1/3 & 0 \end{bmatrix} x_i + \begin{bmatrix} 2/3 \\ -4/3 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

B 的特征向量分别为:$v_1 = [\sqrt{2}, 1]^T, v_2 = [-\sqrt{2}, 1]^T$,对应的特征向量分别为:$\lambda_1 = -\sqrt{2}/3, \lambda_2 = \sqrt{2}/3$。从下面的图 13(a) 可以看出,$B$ 的特征向量与 A 并不重合;图 13(b) 表明了 Jacobi 方法的收敛过程,中间每一步的特征向量的变化在图 13(c)(d)(e)(f) 中有展示。

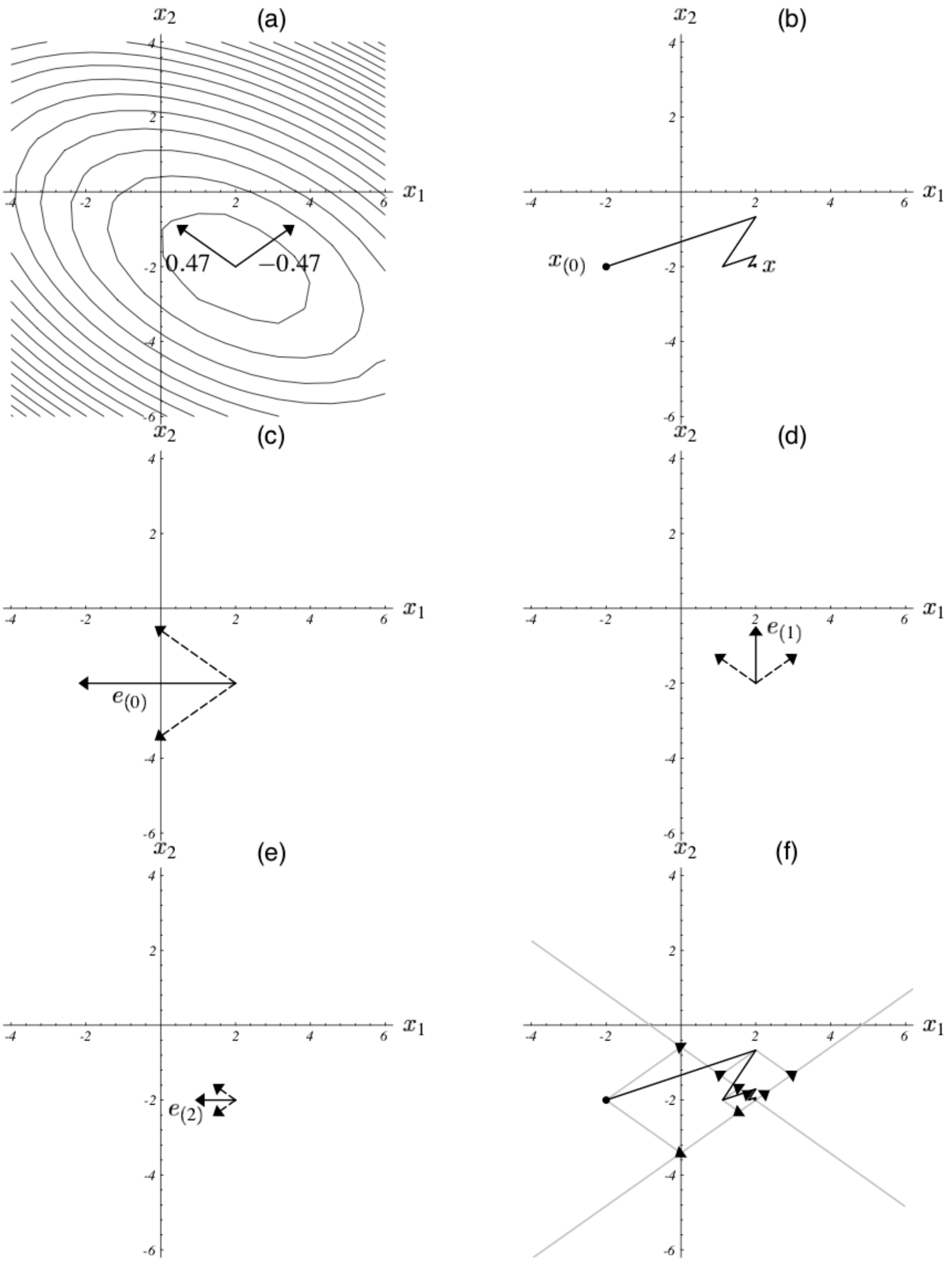


Figure 13: Convergence of the Jacobi Method. (a) The eigenvectors of B are shown with their corresponding eigenvalues. Unlike the eigenvectors of A, these eigenvectors are not the axes of the paraboloid. (b) The Jacobi Method starts at $[-2, -2]^T$ and converges at $[2, -2]^T$. (c, d, e) The error vectors $e_{(0)}$, $e_{(1)}$, $e_{(2)}$ (solid arrows) and their eigenvector components (dashed arrows). (f) Arrowheads represent the eigenvector components of the first four error vectors. Each eigenvector component of the error is converging to zero at the expected rate based on its eigenvalue.

6 最速下降法的收敛性分析

References

[1] J. R. Shewchuk, *An Introduction to the Conjugate Gradient Method Without the Agonizing Pain.*