Численные методы
Лекция 5

Е.А. Яревский

02 декабря 2020

Минимизация квадратичной формы

Рассмотрим задачу минимизации квадратичной формы,

$$\Phi(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}\langle \mathbf{x}, A\mathbf{x}\rangle - \langle \mathbf{x}, \mathbf{b}\rangle.$$

Эта задача эквивалентна решению линейной системы $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$.
Действительно, пусть $\mathbf{x}$ – минимум. Для любого $\mathbf{s}$

$$\Phi(\mathbf{x}) \le \Phi(\mathbf{x}+\mathbf{s}) = \Phi(\mathbf{x}) + \frac{1}{2}\langle \mathbf{s}, A\mathbf{x}\rangle + \frac{1}{2}\langle \mathbf{x}, A\mathbf{s}\rangle + \frac{1}{2}\langle \mathbf{s}, A\mathbf{s}\rangle - \langle \mathbf{s}, \mathbf{b}\rangle.$$

Если матрица A симметрична, то

$$0 \le \langle \mathbf{s}, A\mathbf{x}\rangle - \langle \mathbf{s}, \mathbf{b}\rangle + \frac{1}{2}\langle \mathbf{s}, A\mathbf{s}\rangle = \langle \mathbf{s}, A\mathbf{x} - \mathbf{b}\rangle + \frac{1}{2}\langle \mathbf{s}, A\mathbf{s}\rangle.$$

Положительность выполнена, когда матрица A положительно определена и $A\mathbf{x} - \mathbf{b} = 0$.

Метод сопряжённых направлений

Существуют различные методы поиска минимума $\Phi(\mathbf{x})$:
– координатный спуск, наискорейший (градиентный) спуск...

Рассмотрим **метод сопряжённых направлений**.
Если матрица A положительно определена и симметрична, то

$$\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle_A = \langle \mathbf{x}, A\mathbf{y} \rangle$$

– скалярное произведение. Введем ортонормированный базис $\mathbf{e}_i$, $i = 1 : m$, в пространстве с нормой $\langle \cdot, \cdot \rangle_A$.
Назовём задаваемые этим базисом направления сопряжёнными.

Если $\mathbf{r}_0$ – заданная точка, то произвольная $\mathbf{r}$ задаётся как $\mathbf{r} = \mathbf{r}_0 + \sum_{i=1}^{m} \alpha_i \mathbf{e}_i$. Вычислим

$$\Phi(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}\langle \mathbf{r}_0 + \sum_{i=1}^{m} \alpha_i \mathbf{e}_i, A\mathbf{r}_0 + \sum_{i=1}^{m} \alpha_i A\mathbf{e}_i \rangle - \langle \mathbf{r}_0 + \sum_{i=1}^{m} \alpha_i \mathbf{e}_i, \mathbf{b} \rangle =$$

$$= \Phi(\mathbf{r}_0) + \sum_{i=1}^{m} \left[\frac{1}{2}\alpha_i^2 + \alpha_i \langle A\mathbf{r}_0, \mathbf{e}_i \rangle - \alpha_i \langle \mathbf{b}, \mathbf{e}_i \rangle \right].$$

Нет перекрестных слагаемых – независимая минимизация по всем направлениям. В точке минимума

$$\frac{\partial \Phi}{\partial \alpha_i} = \alpha_i + \langle A\mathbf{r}_0 - \mathbf{b}, \mathbf{e}_i \rangle = 0,$$

тогда $\alpha_i = -\langle A\mathbf{r}_0 - \mathbf{b}, \mathbf{e}_i \rangle$.

Построение базиса сопряжённых направлений

Берем произвольный базис в пространстве, и ортогонализуем его в скалярном произведении $\langle *, * \rangle_A$. Например, ортогонализация Грама-Шмидта.

Проблема: нужно хранить ВСЕ вектора, количество операций растет с ростом размерности как ... ?

Вычислим производную:

$$\Phi(\mathbf{x} + \mathbf{h}) - \Phi(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{h}, A\mathbf{x} \rangle - \langle \mathbf{h}, \mathbf{b} \rangle + O(||\mathbf{h}||^2),$$

и

$$\Phi'(\mathbf{x}) = A\mathbf{x} - \mathbf{b}.$$

т.о., минимум квадратичного функционала ищется точно решением линейной системы.

Построение базиса сопряжённых направлений

Пусть x_* – точка минимума, а $\{p_i\}$, $i = 1 : n$, – некий базис в пространстве. Для любой точки x_0, разность $x_* - x_0$ раскладывается по базису:

$$x_* - x_0 = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i p_i, \qquad x_* = x_0 + \sum_{i=1}^{n} \alpha_i p_i.$$

Каждое следующее приближение вычисляется как

$$x_k = x_0 + \sum_{i=1}^{k} \alpha_i p_i = x_{k-1} + \alpha_k p_k.$$

Построение базиса сопряжённых направлений

Выбираем произвольный вектор x_0. На каждой итерации находим

$$\alpha_k = \arg\min_{\alpha_k} \Phi(x_{k-1} + \alpha_k p_k).$$

Базисные вектора p_k вычисляются по формулам

$$p_1 = -\Phi'(x_0), \qquad p_{k+1} = -\Phi'(x_k) + \beta_k p_k,$$

где $\Phi'(x) = Ax - b$.
Коэффициенты β_k выбираются так, что вектора p_k и p_{k+1} были ортогональны в новом скалярном произведении:

$$\beta_k = \frac{\langle \Phi'(x_k), p_k \rangle}{\langle Ap_k, p_k \rangle}.$$

Для всех векторов в $\langle *, * \rangle_A$ автоматически получаем:

$$\langle p_k, p_m \rangle_A = \langle Ap_k, p_m \rangle = 0, \quad \forall k, m, \ k \neq m.$$

Построение базиса сопряжённых направлений

В терминах невязки $r_k = b - Ax_k = -\Phi'(x_k)$, окончательно метод записывается как

$$r_1 = b - Ax_0, \quad p_1 = r_1,$$

$$\text{loop:} \quad \alpha_k = \frac{\langle r_k, r_k \rangle}{\langle Ap_k, p_k \rangle},$$

$$x_{k+1} = x_k - \alpha_k Ap_k, \quad r_{k+1} = r_k - \alpha_k Ap_k,$$

$$\beta_k = \frac{\langle r_{k+1}, r_{k+1} \rangle}{\langle r_k, r_k \rangle},$$

$$p_{k+1} = r_{k+1} + \beta_k p_k, \quad \text{endloop}.$$

Сходимость

Для симметричной положительно определенной матрицы размерности n, метод сходится к решению системы не более, чем за n шагов (в точной арифметике!).
Более тонкий анализ показывает, что число итераций не превышает m, где m – число различных собственных значений матрицы A.

Вычислительная сложность:
На каждой итерации – $O(n^2)$ операций, основное их количество – умножение матрицы на вектор при вычислении нового скалярного произведения.
Суммарная вычислительная сложность метода не превышает $O(n^3)$, так как число итераций не больше n.

Оптимизация скорости сходимости

Вернёмся к процессу

$$x^{k+1} = x^k + H_k(b - Ax^k) = (I - H_k A)x^k + H_k b.$$

Выберем простейший стационарный процесс:

$$H_k \equiv H = \tau I.$$

Скорость сходимости определяется максимальным по модулю с.з. матрицы $I - \tau A$.

Пусть A – положительно определена, тогда $\lambda_i(A) > 0$.

Часто бывают известны оценки $0 < \mu \le \lambda_i \le M < \infty$.

Скорость сходимости определяется величиной

$$q(\tau) = \max_{\mu \le \lambda \le M} |1 - \tau\lambda|.$$

Нужно найти такое τ, чтобы $q(\tau)$ было минимально.

Минимальное значение достигается, когда функция $1-\tau\lambda$ меняет знак (как функция λ) на интервале $\mu \le \lambda \le M$, и значения на концах равны по модулю:

$$1-\tau_{opt}\mu = -(1-\tau_{opt}M).$$

Тогда

$$\tau_{opt} = 2/(\mu+M),$$

$$q(\tau_{opt}) = \frac{M-\mu}{M+\mu} = \frac{\kappa-1}{\kappa+1},$$

где $\kappa = \kappa^*(A) = M/\mu$ – число обусловленности.
Число итераций N_{iter} для уменьшения погрешности в e раз:

$$N_{iter} = 1/(-\ln q).$$

При $\kappa \gg 1$, $N_{iter} \sim \kappa$.

Сходимость метода сопряженных градиентов

Оценка скорости сходимости:

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

Число итераций N_{iter} для уменьшения погрешности в e раз:

$$N_{iter} = 1/(-\ln q) \approx \sqrt{\kappa}/2 \quad \text{при} \quad \kappa \gg 1.$$

Элементарные ортогональные преобразования

Рассмотрим вначале матрицы для $N = 2$.
Ортогональная матрица называется матрицей вращения, если

$$Q = \begin{bmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ -\sin\theta & \cos\theta \end{bmatrix}.$$

Вектор $y = Q^\top x$ получается поворотом x на угол θ против часовой стрелки.
Ортогональная матрица называется матрицей отражения, если

$$Q = \begin{bmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ \sin\theta & -\cos\theta \end{bmatrix}.$$

Вектор $y = Q^\top x$ получается отражением x относительно прямой, идущей под углом $\theta/2$.
Оба преобразования позволяют обнулять выбранные элементы.

Отражения Хаусхолдера

Матрица (отражение) Хаусхолдера (матрица отражений) для ненулевого v:

$$H = I - 2vv^\top / v^\top v.$$

Умножение H на x – отражение относительно гиперплоскости, ортогональной v.
Матрица $vv^\top = \{v_{ij}\}$, $v_{ij} = v_i v_j$.
Очевидно, что $H = H^\top$ и

$$HH^\top = \left(I - 2\frac{vv^\top}{v^\top v}\right)\left(I - 2\frac{vv^\top}{v^\top v}\right) = I - 4\frac{vv^\top}{v^\top v} + \frac{4}{(v^\top v)^2} vv^\top vv^\top = I.$$

Преобразование удобно использовать для обнуления выбранных компонент вектора.
Пусть задан вектор x, и мы хотим найти преобразование H такое, чтобы Hx был кратен $e_1 = (1, 0, ..., 0)$ – первому столбцу I.

$$Hx = \left(I - \frac{2vv^\top}{v^\top v}\right)x = x - \frac{2vv^\top x}{v^\top v}.$$

Т.о. v находится в плоскости, образованной e_1 и x, $v = x + \alpha e_1$.

$$v^\top x = x^\top x + \alpha x_1, \quad v^\top v = x^\top x + 2\alpha x_1 + \alpha^2.$$

$$Hx = \left(1 - 2\frac{x^\top x + \alpha x_1}{x^\top x + 2\alpha x_1 + \alpha^2}\right)x - 2\alpha\frac{v^\top x}{v^\top v}e_1.$$

Чтобы обнулить коэффициент при x, выбираем $\alpha = \pm||x||_2$.
Очень простое представление!

$$v = x \pm ||x||_2 e_1, \quad Hx = \left(I - \frac{2vv^\top}{v^\top v}\right) x = \mp||x||_2 e_1.$$

Для минимизации погрешности вычисления H выбирают

$$v = x + \mathrm{sign}(x_1)||x||_2 e_1, \quad \text{так что} \quad ||v||_2 \geq ||x||_2.$$

Умножение на матрицы Хаусхолдера

$$HA = \left(I - \frac{2vv^\top}{v^\top v}\right) A = A + vw^\top, \quad w = \beta A^\top v, \quad \beta = -2/v^\top v.$$

Для умножения на м.Х. слева (и справа) требуется $\sim N^2$ операций.

QR-разложение

Произвольная матрица A может быть представлена в виде произведения ортогональной Q и верхней треугольной R матриц:

$$A = QR.$$

Будем приводить матрицу к верхней треугольной с помощью последовательности преобразований Хаусхолдера.
Возьмем в качестве вектора x первый столбец матрицы A:

$$x_1 = (a_{11}, a_{21}, \dots, a_{N1})^\top.$$

Умножаем A слева на H_1, построенную, как описано раньше.
Получим $A^{(1)} = H_1 A$, у которой первый столбец – нулевой, кроме диагонального элемента a_{11}.

На l-ом шаге определяем блочную матрицу

$$H_l = \begin{bmatrix} I_l & 0 \\ 0 & V_l \end{bmatrix}, \quad A^{(l)} = H_l A^{(l-1)}.$$

Размерность V_l равна $N - l + 1$, она строится по вектору

$$x_l = (a_{l,l}^{(l-1)}, a_{l+1,l}^{(l-1)}, \ldots, a_{N,l}^{(l-1)})^\top.$$

После $N-1$ шага получаем правую треугольную матрицу

$$A^{(N-1)} = H_{N-1} H_{N-2} \ldots H_1 A = HA.$$

Умножаем на $H^\top$,

$$A = H^\top A^{(N-1)},$$

получаем требуемое равенство.
Количество операций $\sim 4/3\ N^3$ (как решение СЛАУ).

Матрицы Хессенберга (почти треугольные м.)

Матрица A называется верхней матрицей Хессенберга (правой почти треугольной), если $a_{ij} = 0$ при $j < i - 1$ (т.е. нижняя субдиагональ – ненулевая).

Приведение к верхней матрице Хессенберга.
Строим последовательность матриц $A^{(l)}$ таких, что первые l столбцов матрицы $A^{(l)}$ имеют вид первых l столбцов верхней матрицы Хессенберга, $a_{ij} = 0$ при $j < i - 1$ и $j \leq l$.
По элементам $l + 1$ столбца матрицы $A^{(l)}$ строим матрицу отражений H_{l+1} так, чтобы в матрице $B = H_{l+1}A^{(l)}$ элементы $b_{1,l+1}, b_{2,l+1}, \ldots, b_{l,l+1}$ были те же, что в $A^{(l)}$,
а $b_{l+3,l+1}, \ldots, b_{N,l+1}$ – нулевыми.

Определим $A^{(l+1)} = H_{l+1} A^{(l)} H_{l+1}$.
Умножение справа на $H_{l+1}^{\top}$ не меняет первые $l+1$ столбцов B, так что требуемый вид сохраняется.
Получаем подобные матрицы $A^{(l)}$, вплоть до $A^{(N-1)}$.

Если матрица A симметрична: то

$$(A^{(l+1)})^{\top} = H_{l+1} (A^{(l)})^{\top} H_{l+1},$$

и все матрицы $A^{(l)}$ симметричны.
Т.о., матрица $A^{(N-1)}$ является трёхдиагональной.

Количество операций для приведения – $O(N^3)$.

Литература

1. Бахвалов Н.С., Жидков Н.П., Кобельков Г.М., *Численные методы*, М.: Бином. Лаборатория знаний, 2012. - 636 с. Параграфы 6.1 – 6.2, 6.6, 6.7, 6.11.

2. Голуб Д.Х, Ван Лоун Ч.Ф., *Матричные вычисления*, М.: Мир, 1999. - 548 с. Параграфы 5.2, 8.2, 9.1.