共轭梯度法

邓建松

2018 年 11 月 9 日

松弛迭代法的局限性

- SOR迭代法中如能取得最佳松弛因子，算法的效率会得到数量级上的提高

松弛迭代法的局限性

- SOR迭代法中如能取得最佳松弛因子，算法的效率会得到数量级上的提高
- 而最佳松弛因子只在系数矩阵具有较好性质时才有可能找到

松弛迭代法的局限性

- SOR迭代法中如能取得最佳松弛因子，算法的效率会得到数量级上的提高
- 而最佳松弛因子只在系数矩阵具有较好性质时才有可能找到
- 而且上节在计算最佳松弛因子时，还用到了对应的Jacobi迭代矩阵的谱半径

共轭梯度法

- 这是一种不需要确定任何参数的求解对称正定线性方程组的方法

共轭梯度法

- 这是一种不需要确定任何参数的求解对称正定线性方程组的方法
- 它是上世纪50年代初期由M.R. Hestenes和E. Stiefel首先提出的

共轭梯度法

- 这是一种不需要确定任何参数的求解对称正定线性方程组的方法
- 它是上世纪50年代初期由M.R. Hestenes和E. Stiefel首先提出的
- 自后得到了长足的发展，成为求解大型稀疏线性方程组最受欢迎的一类方法

共轭梯度法

- 这是一种不需要确定任何参数的求解对称正定线性方程组的方法
- 它是上世纪50年代初期由M.R. Hestenes和E. Stiefel首先提出的
- 自后得到了长足的发展，成为求解大型稀疏线性方程组最受欢迎的一类方法
- 它也是求解大型非线性优化问题的主要方法之一

线性方程组与对应的二次泛函

- 设A为对称正定矩阵

线性方程组与对应的二次泛函

- 设A为对称正定矩阵
- 考虑线性方程组$Ax = b$的求解

线性方程组与对应的二次泛函

- 设A为对称正定矩阵
- 考虑线性方程组$Ax = b$的求解
- 为此我们定义二次函数

$$\varphi(x) = x^T A x - 2b^T x$$

定理

定理

设A对称正定，求方程组$Ax=b$的解等价于求二次函数$\varphi(x)$的极小值点

定理证明

- 直接计算可得

$$\frac{\partial \varphi}{\partial x_i} = 2(a_{i1}x_1 + \cdots + a_{in}x_n) - 2b_i$$

定理证明

- 直接计算可得

$$\frac{\partial \varphi}{\partial x_i} = 2(a_{i1}x_1 + \cdots + a_{in}x_n) - 2b_i$$

- 所以

$$\nabla \varphi(x) = 2(Ax - b)$$

定理证明

- 直接计算可得
$$\frac{\partial\varphi}{\partial x_i}=2(a_{i1}x_1+\cdots+a_{in}x_n)-2b_i$$
- 所以
$$\nabla\varphi(x)=2(Ax-b)$$
- 若$\varphi(x)$在某点x_*达到极小，则必有$\nabla\varphi(x_*)=0$，从而$Ax_*=b$

定理证明

- 直接计算可得
$$\frac{\partial\varphi}{\partial x_i} = 2(a_{i1}x_1 + \cdots + a_{in}x_n) - 2b_i$$
- 所以
$$\nabla\varphi(x) = 2(Ax - b)$$
- 若$\varphi(x)$在某点x_*达到极小，则必有$\nabla\varphi(x_*) = 0$, 从而$Ax_* = b$
- 若x_*是$Ax = b$的解，而$\varphi(x)$的Hessian阵是A, 对称正定，从而x_*是$\varphi(x)$ 的极小值点

求解方法：盲人下山

- 为了求解线性方程组，我们可以计算二次函数$\varphi(x)$的极小值

求解方法：盲人下山

- 为了求解线性方程组，我们可以计算二次函数$\varphi(x)$的极小值
- 为了求二次函数的极小值，我们可以模拟盲人下山：先任意给定一个初始点x_0，确定一个下山的方向p_0，沿着经过点x_0而方向为p_0的直线$x = x_0 + \alpha p_0$上找一点x_1使$\varphi(x)$达到极小

重复：迈更多步

- 第一步走到x_1

重复：迈更多步

- 第一步走到x_1
- 然后在x_1点，再找一个下山的方向p_1，沿直线$x = x_1 + \alpha p_1$再跨出一步

重复：迈更多步

- 第一步走到x_1
- 然后在x_1点，再找一个下山的方向p_1, 沿直线$x = x_1 + \alpha p_1$再跨出一步
- ……

重复：迈更多步

- 第一步走到x_1
- 然后在x_1点，再找一个下山的方向p_1, 沿直线$x = x_1 + \alpha p_1$再跨出一步
- ……
- 这样就得到一串参数α_i和方向p_i.

重复：迈更多步

- 第一步走到x_1
- 然后在x_1点，再找一个下山的方向p_1, 沿直线$x = x_1 + \alpha p_1$再跨出一步
- ……
- 这样就得到一串参数α_i和方向p_i.
- p_i称为搜索方向，α_k为步长

重复：迈更多步

- 第一步走到x_1
- 然后在x_1点，再找一个下山的方向p_1，沿直线$x = x_1 + \alpha p_1$再跨出一步
- ……
- 这样就得到一串参数α_i和方向p_i.
- p_i称为搜索方向，α_k为步长
- 不同的确定搜索方向和步长的方法，就得出不同的算法

步长的确定

- 设x_k已确定，下山方向p_k也确定

步长的确定

- 设x_k已确定，下山方向p_k也确定
- 任务：在直线$x = x_k + \alpha p_k$上确定α_k使得$\varphi(x)$在$x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k$处达到极小

步长的确定

- 设x_k已确定，下山方向p_k也确定
- 任务：在直线$x = x_k + \alpha p_k$上确定α_k使得$\varphi(x)$在$x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k$处达到极小
- 令$f(\alpha) = \varphi(x_k + \alpha p_k)$，则

$$
\begin{aligned}
f(\alpha) &= (x_k + \alpha p_k)^T A (x_k + \alpha p_k) - 2b^T (x_k + \alpha p_k) \\
&= \alpha^2 p_k^T A p_k - 2\alpha r_k^T p_k + \varphi(x_k)
\end{aligned}
$$

其中$r_k = b - Ax_k$为$\varphi(x)$在$x = x_k$的负梯度方向

求导确定α_k

- 计算$f(\alpha)$的导数：

$$f'(\alpha) = 2\alpha p_k^T A p_k - 2 r_k^T p_k$$

求导确定α_k

- 计算$f(\alpha)$的导数：

$$f'(\alpha) = 2\alpha p_k^T A p_k - 2 r_k^T p_k$$

- 令$f'(\alpha) = 0$即得$\alpha_k = \dfrac{r_k^T p_k}{p_k^T A p_k}$，由此算出$x_{k+1}$

求导确定α_k

- 计算$f(\alpha)$的导数：

$$f'(\alpha) = 2\alpha p_k^T A p_k - 2 r_k^T p_k$$

- 令$f'(\alpha) = 0$即得$\alpha_k = \dfrac{r_k^T p_k}{p_k^T A p_k}$，由此算出$x_{k+1}$
- 验证:

$$\begin{aligned}\varphi(x_{k+1}) - \varphi(x_k) &= \alpha_k^2 p_k^T A p_k - 2\alpha_k r_k^T p_k \\ &= -\frac{(r_k^T p_k)^2}{p_k^T A p_k}\end{aligned}$$

因此只要$r_k^T p_k \neq 0$，我们就有$\varphi(x_{k+1}) < \varphi(x_k)$

新到达点原搜索方向与新梯度方向垂直

- 在第k步确定了搜索方向p_k后，按照前述公式确定步长α_k，那么到达了新点$x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k$

新到达点原搜索方向与新梯度方向垂直

- 在第k步确定了搜索方向p_k后，按照前述公式确定步长α_k，那么到达了新点$x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k$
- 显然p_k与等值线$\varphi(x) = \varphi(x_{k+1})$相切于点$x = x_{k+1}$

新到达点原搜索方向与新梯度方向垂直

- 在第k步确定了搜索方向p_k后，按照前述公式确定步长α_k，那么到达了新点$x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k$
- 显然p_k与等值线$\varphi(x) = \varphi(x_{k+1})$相切于点$x = x_{k+1}$
- $r_{k+1} = b - Ax_{k+1}$是上述等值线在$x = x_{k+1}$处的法向量

新到达点原搜索方向与新梯度方向垂直

- 在第k步确定了搜索方向p_k后，按照前述公式确定步长α_k，那么到达了新点$x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k$
- 显然p_k与等值线$\varphi(x) = \varphi(x_{k+1})$相切于点$x = x_{k+1}$
- $r_{k+1} = b - Ax_{k+1}$是上述等值线在$x = x_{k+1}$处的法向量
- 所以$r_{k+1}^T p_k = 0$

新到达点原搜索方向与新梯度方向垂直

- 在第k步确定了搜索方向p_k后，按照前述公式确定步长α_k, 那么到达了新点$x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k$
- 显然p_k与等值线$\varphi(x) = \varphi(x_{k+1})$相切于点$x = x_{k+1}$
- $r_{k+1} = b - Ax_{k+1}$是上述等值线在$x = x_{k+1}$处的法向量
- 所以$r_{k+1}^T p_k = 0$
- 后面我们用代数方法证明更一般性的结论

下山方向的确定：最速下降法

- $\varphi(x)$增加最快的方向是梯度方向

下山方向的确定：最速下降法

- $\varphi(x)$增加最快的方向是梯度方向
- 因此负梯度方向应该是$\varphi(x)$减小最快的方向

下山方向的确定：最速下降法

- $\varphi(x)$增加最快的方向是梯度方向
- 因此负梯度方向应该是$\varphi(x)$减小最快的方向
- 所以我们取p_k为负梯度方向

$$r_k = b - Ax_k$$

收敛定理的准备：一个引理

引理

设A的特征值为$0 < \lambda_1 \leqslant \cdots \leqslant \lambda_n$, $P(t)$是一个关于t的多项式，则对$\forall x \in \mathbb{R}^n$

$$\|P(A)x\|_A \leqslant \max_{1\leqslant i\leqslant n} |P(\lambda_i)| \|x\|_A$$

其中$\|x\|_A = \sqrt{x^T A x}$

引理的证明

- 取由A对应于$\lambda_1, \ldots, \lambda_n$的特征向量$y_1, \ldots, y_n$，其构成$\mathbb{R}^n$的一组标准正交基

引理的证明

- 取由A对应于$\lambda_1, \dots, \lambda_n$的特征向量$y_1, \dots, y_n$，其构成$\mathbb{R}^n$的一组标准正交基
- 对任意$x \in \mathbb{R}^n$, $x = \sum_{i=1}^n \beta_i y_i$, 从而有

$$
\begin{aligned}
x^T P(A) A P(A) x &= \left(\sum_{i=1}^n \beta_i P(\lambda_i) y_i \right)^T A \left(\sum_{i=1}^n \beta_i P(\lambda_i) y_i \right) \\
&= \sum_{i=1}^n \lambda_i \beta_i^2 P^2(\lambda_i) \leqslant \max_{1 \leqslant i \leqslant n} P^2(\lambda_i) \sum_{i=1}^n \lambda_i \beta_i^2 \\
&= \max_{1 \leqslant i \leqslant n} P^2(\lambda_i) x^T A x
\end{aligned}
$$

收敛定理

定理

设A的特征值为$0 < \lambda_1 \leqslant \cdots \leqslant \lambda_n$，则由最速下降法产生的序列$\{x_k\}$满足

$$\|x_k - x_*\|_A \leqslant \left(\frac{\lambda_n - \lambda_1}{\lambda_n + \lambda_1}\right)^k \|x_0 - x_*\|_A$$

其中$x_* = A^{-1}b$

定理证明

- 展开$(x-x_*)^TA(x-x_*)$，并利用$Ax_*=b$可得

$$\varphi(x)+x_*^TAx_*=(x-x_*)^TA(x-x_*)$$

定理证明

- 展开$(x-x_*)^TA(x-x_*)$，并利用$Ax_*=b$可得

$$\varphi(x)+x_*^TAx_*=(x-x_*)^TA(x-x_*)$$

- 根据x_k的构造方法，我们有

$$\varphi(x_k)\leqslant\varphi(x_{k-1}+\alpha r_{k-1}),\quad \forall\alpha\in\mathbb{R}$$

定理证明

- 展开$(x-x_*)^TA(x-x_*)$，并利用$Ax_*=b$可得

$$\varphi(x)+x_*^TAx_*=(x-x_*)^TA(x-x_*)$$

- 根据x_k的构造方法，我们有

$$\varphi(x_k)\leqslant\varphi(x_{k-1}+\alpha r_{k-1}),\quad \forall\alpha\in\mathbb{R}$$

- 所以

$$\begin{aligned}&(x_k-x_*)^TA(x_k-x_*)\\ \leqslant&(x_{k-1}+\alpha r_{k-1}-x_*)^TA(x_{k-1}+\alpha r_{k-1}-x_*)\end{aligned}$$

定理证明

- 根据构造方法，

  $r_{k-1} = b - Ax_{k-1} = A(x_* - x_{k-1})$

定理证明

- 根据构造方法，
  $r_{k-1} = b - Ax_{k-1} = A(x_* - x_{k-1})$
- 所以我们有

$$
\begin{aligned}
&(x_k - x_*)^T A(x_k - x_*) \\
\leqslant&(x_{k-1} + \alpha r_{k-1} - x_*)^T A(x_{k-1} + \alpha r_{k-1} - x_*) \\
=&((I - \alpha A)(x_{k-1} - x_*))^T A((I - \alpha A)(x_{k-1} - x_*))
\end{aligned}
$$

- 取$P_\alpha(t) = 1 - \alpha t$, 则由引理对$\forall\alpha \in \mathbb{R}$有

$$\begin{aligned}\|x_k - x_*\|_A &\leqslant \|P_\alpha(A)(x_{k-1} - x_*)\|_A \\ &\leqslant \max_{1\leqslant i\leqslant n} |P_\alpha(\lambda_i)| \|x_{k-1} - x_*\|_A\end{aligned}$$

- 取$P_\alpha(t) = 1 - \alpha t$, 则由引理对$\forall \alpha \in \mathbb{R}$有

$$\begin{aligned}\|x_k - x_*\|_A &\leqslant \|P_\alpha(A)(x_{k-1} - x_*)\|_A \\ &\leqslant \max_{1\leqslant i\leqslant n} |P_\alpha(\lambda_i)| \|x_{k-1} - x_*\|_A\end{aligned}$$

- 根据Chebyshev多项式的性质，

$$\min_{\alpha} \max_{\lambda_1\leqslant t\leqslant \lambda_n} |1 - \alpha t|$$

应在$1 - \alpha\lambda_1$与$1 - \alpha\lambda_n$互为相反数时达到，此时$\alpha = \dfrac{2}{\lambda_1 + \lambda_n}$, 极值为$\dfrac{\lambda_n - \lambda_1}{\lambda_n + \lambda_1}$

注解

- 上述定理表明，从任一初始向量x_0出发，由最速下降法产生的点列总是收敛到方程组的解

注解

- 上述定理表明，从任一初始向量x_0出发，由最速下降法产生的点列总是收敛到方程组的解
- 收敛速度由$(\lambda_n - \lambda_1)/(\lambda_n + \lambda_1)$的大小决定的

注解

- 上述定理表明，从任一初始向量x_0出发，由最速下降法产生的点列总是收敛到方程组的解
- 收敛速度由$(\lambda_n - \lambda_1)/(\lambda_n + \lambda_1)$的大小决定的
- 最速下降法简单易实现，而且可以充分利用A的稀疏性，但在$\lambda_1 \ll \lambda_n$时速度变得非常之慢

注解

- 上述定理表明，从任一初始向量x_0出发，由最速下降法产生的点列总是收敛到方程组的解
- 收敛速度由$(\lambda_n - \lambda_1)/(\lambda_n + \lambda_1)$的大小决定的
- 最速下降法简单易实现，而且可以充分利用A的稀疏性，但在$\lambda_1 \ll \lambda_n$时速度变得非常之慢
- 在求解线性方程组时很少用它，但它的想法很重要，并且在非线性优化求解中有大量的应用和拓展

注解

- 上述定理表明，从任一初始向量x_0出发，由最速下降法产生的点列总是收敛到方程组的解
- 收敛速度由$(\lambda_n - \lambda_1)/(\lambda_n + \lambda_1)$的大小决定的
- 最速下降法简单易实现，而且可以充分利用A的稀疏性，但在$\lambda_1 \ll \lambda_n$时速度变得非常之慢
- 在求解线性方程组时很少用它，但它的想法很重要，并且在非线性优化求解中有大量的应用和拓展

共轭梯度法的动机

- 从局部来看，负梯度方向确实是最佳的下山方向

共轭梯度法的动机

- 从局部来看，负梯度方向确实是最佳的下山方向
- 但从整体看看，它并非最佳：迭代得到的各点连线具有明显的锯齿形状

共轭梯度法的动机

- 从局部来看，负梯度方向确实是最佳的下山方向
- 但从整体看看，它并非最佳：迭代得到的各点连线具有明显的锯齿形状
- 我们要寻找更好的下山方向，而且在方向寻找上付出的代价不要太大

共轭梯度法的计算过程

- 给定初始点x_0，第一步仍然选负梯度方向为下山方向，即$p_0 = r_0$，于是有

$$\alpha_0 = \frac{r_0^T r_0}{r_0^T A r_0}, x_1 = x_0 + \alpha_0 p_0, r_1 = b - Ax_1$$

共轭梯度法的计算过程

- 给定初始点x_0, 第一步仍然选负梯度方向为下山方向，即$p_0 = r_0$, 于是有

$$\alpha_0 = \frac{r_0^T r_0}{r_0^T A r_0}, x_1 = x_0 + \alpha_0 p_0, r_1 = b - Ax_1$$

- 在第$k+1 (k \geqslant 1)$步，下山方向不再简单地取r_k, 而是在过点x_k由向量r_k, p_{k-1}所张成的二维平面π_2内找出使函数φ下降最快的方向作为p_k

共轭梯度法的计算过程

- 给定初始点x_0, 第一步仍然选负梯度方向为下山方向，即$p_0 = r_0$, 于是有

$$\alpha_0 = \frac{r_0^T r_0}{r_0^T A r_0}, x_1 = x_0 + \alpha_0 p_0, r_1 = b - Ax_1$$

- 在第$k+1(k \geqslant 1)$步，下山方向不再简单地取r_k, 而是在过点x_k由向量r_k, p_{k-1}所张成的二维平面π_2内找出使函数φ下降最快的方向作为p_k
  - 注意：$r_k \perp p_{k-1}$

新下山方向的计算

- 考虑φ在π_2上的限制：

$$
\begin{aligned}
\psi(\xi,\eta) &= \varphi(x_k+\xi r_k+\eta p_{k-1}) \\
&= (x_k+\xi r_k+\eta p_{k-1})^T A(x_k+\xi r_k+\eta p_{k-1}) \\
&\quad - 2b^T(x_k+\xi r_k+\eta p_{k-1})
\end{aligned}
$$

新下山方向的计算

- 考虑φ在π_2上的限制：

$$\begin{aligned}\psi(\xi,\eta) &= \varphi(x_k+\xi r_k+\eta p_{k-1})\\ &= (x_k+\xi r_k+\eta p_{k-1})^T A(x_k+\xi r_k+\eta p_{k-1})\\ &\quad -2b^T(x_k+\xi r_k+\eta p_{k-1})\end{aligned}$$

- 分别对ξ,η求偏导，得到局部下降最快的方向

新下山方向的计算

- 考虑φ在π_2上的限制：

$$\begin{aligned}\psi(\xi,\eta) &= \varphi(x_k+\xi r_k+\eta p_{k-1}) \\ &= (x_k+\xi r_k+\eta p_{k-1})^T A(x_k+\xi r_k+\eta p_{k-1}) \\ &\quad - 2b^T(x_k+\xi r_k+\eta p_{k-1})\end{aligned}$$

- 分别对ξ,η求偏导，得到局部下降最快的方向
  - 实际上直接求出的是在π_2中达到最小值的点

新下山方向的计算

- 求偏导：

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial \psi}{\partial \xi} &= 2r_k^T A(x_k + \xi r_k + \eta p_{k-1}) - 2b^T r_k \\
&= 2(\xi r_k^T A r_k + \eta r_k^T A p_{k-1} - r_k^T r_k) \\
\frac{\partial \psi}{\partial \eta} &= 2p_{k-1}^T A(x_k + \xi r_k + \eta p_{k-1}) - 2b^T p_{k-1} \\
&= 2(\xi r_k^T A p_{k-1} + \eta p_{k-1}^T A p_{k-1})
\end{aligned}
$$

这里利用了$r_k^T p_{k-1} = 0$

- 由此得唯一极值点$\tilde{x} = x_k + \xi_0 r_k + \eta_0 p_{k-1}$，其中$\xi_0$和$\eta_0$满足

$$\begin{cases} \xi_0 r_k^T A r_k + \eta_0 r_k^T A p_{k-1} = r_k^T r_k \\ \xi_0 r_k^T A p_{k-1} + \eta_0 p_{k-1}^T A p_{k-1} = 0 \end{cases}$$

- 由此得唯一极值点$\tilde{x} = x_k + \xi_0 r_k + \eta_0 p_{k-1}$，其中$\xi_0$和$\eta_0$满足

$$\begin{cases} \xi_0 r_k^T A r_k + \eta_0 r_k^T A p_{k-1} = r_k^T r_k \\ \xi_0 r_k^T A p_{k-1} + \eta_0 p_{k-1}^T A p_{k-1} = 0 \end{cases}$$

- 由上式可知若$r_k \neq 0$, 则必有$\xi_0 \neq 0$ (为什么？)因此可取新的下山方向为

$$p_k = \frac{1}{\xi_0}(\tilde{x} - x_k) = r_k + \frac{\eta_0}{\xi_0} p_{k-1}$$

- 由此得唯一极值点$\tilde{x} = x_k + \xi_0 r_k + \eta_0 p_{k-1}$，其中$\xi_0$和$\eta_0$满足

$$\begin{cases} \xi_0 r_k^T A r_k + \eta_0 r_k^T A p_{k-1} = r_k^T r_k \\ \xi_0 r_k^T A p_{k-1} + \eta_0 p_{k-1}^T A p_{k-1} = 0 \end{cases}$$

- 由上式可知若$r_k \neq 0$, 则必有$\xi_0 \neq 0$ (为什么？)因此可取新的下山方向为

$$p_k = \frac{1}{\xi_0}(\tilde{x} - x_k) = r_k + \frac{\eta_0}{\xi_0} p_{k-1}$$

- η_0是否可以等于0呢？

- 令$\beta_{k-1}=\eta_0/\xi_0$，则由ξ_0和η_0满足的第二个方程可知

$$\beta_{k-1}=-\frac{r_k^TAp_{k-1}}{p_{k-1}^TAp_{k-1}}$$

- 令$\beta_{k-1} = \eta_0/\xi_0$，则由$\xi_0$和$\eta_0$满足的第二个方程可知

$$\beta_{k-1} = -\frac{r_k^T A p_{k-1}}{p_{k-1}^T A p_{k-1}}$$

- 如此确定的p_k满足

$$p_k^T A p_{k-1} = \left(r_k - \frac{r_k^T A p_{k-1}}{p_{k-1}^T A p_{k-1}} p_{k-1} \right)^T A p_{k-1} = 0$$

即p_k与p_{k-1}是关于A相互共轭的

公式初步梳理

- p_k确定以后，可以采用前面的方法确定α_k

公式初步梳理

- p_k确定以后，可以采用前面的方法确定α_k
- 总结公式为

$$\alpha_k = \frac{r_k^T p_k}{p_k^T A p_k}, \quad x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k$$

$$r_{k+1} = b - A x_{k+1}$$

$$\beta_k = -\frac{r_{k+1}^T A p_k}{p_k^T A p_k}, \quad p_{k+1} = r_{k+1} + \beta_k p_k$$

r_{k+1}的简化

- 根据r_{k+1}的定义，

$$
\begin{aligned}
r_{k+1} &= b - Ax_{k+1} = b - A(x_k + \alpha_k p_k) \\
&= r_k - \alpha_k A p_k
\end{aligned}
$$

r_{k+1}的简化

- 根据r_{k+1}的定义，

$$
\begin{aligned}
r_{k+1} &= b - Ax_{k+1} = b - A(x_k + \alpha_k p_k) \\
&= r_k - \alpha_k A p_k
\end{aligned}
$$

- Ap_k在计算α_k时已求出，所以计算r_{k+1}时就可以用上述递推公式得到

r_{k+1}的简化

- 根据r_{k+1}的定义，

$$
\begin{aligned}
r_{k+1} &= b - Ax_{k+1} = b - A(x_k + \alpha_k p_k) \\
&= r_k - \alpha_k A p_k
\end{aligned}
$$

- Ap_k在计算α_k时已求出，所以计算r_{k+1}时就可以用上述递推公式得到
- 由上式可得

$$
Ap_k = \frac{1}{\alpha_k}(r_k - r_{k+1})
$$

α_k和β_k的简化

- 注意等式（证明后面给出）

$$r_k^T r_{k+1} = r_k^T p_{k-1} = r_{k+1}^T p_k = 0, k = 1, 2, \ldots$$

α_k和β_k的简化

- 注意等式（证明后面给出）

$$r_k^T r_{k+1} = r_k^T p_{k-1} = r_{k+1}^T p_k = 0, k = 1, 2, \ldots$$

- 从而我们有

$$r_{k+1}^T A p_k = \frac{1}{\alpha_k} r_{k+1}^T (r_k - r_{k+1}) = -\frac{1}{\alpha_k} r_{k+1}^T r_{k+1}$$

$$\begin{aligned} p_k^T A p_k &= \frac{1}{\alpha_k} p_k^T (r_k - r_{k+1}) = \frac{1}{\alpha_k} p_k^T r_k \\ &= \frac{1}{\alpha_k} r_k^T (r_k + \beta_{k-1} p_{k-1}) = \frac{1}{\alpha_k} r_k^T r_k \end{aligned}$$

α_k和β_k的简化

- 回忆：

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

α_k和β_k的简化

- 回忆：

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

- 对α_k的分式进行简化；并且把前页两式相除，可对β_k进行简化：

$$\alpha_k = \frac{r_k^T r_k}{p_k^T A p_k} \quad \beta_k = \frac{r_{k+1}^T r_{k+1}}{r_k^T r_k}$$

基本性质

由共轭梯度法得到的向量组$\{r_i\}$和$\{p_i\}$具有下面的性质：

1. $p_i^T r_j = 0,\ 0 \leqslant i < j \leqslant k$

基本性质

由共轭梯度法得到的向量组$\{r_i\}$和$\{p_i\}$具有下面的性质：

1. $p_i^T r_j = 0,\ 0 \leqslant i < j \leqslant k$
2. $r_i^T r_j = 0,\ i \neq j,\ 0 \leqslant i, j \leqslant k$

基本性质

由共轭梯度法得到的向量组$\{r_i\}$和$\{p_i\}$具有下面的性质：

1. $p_i^T r_j = 0,\ 0 \leqslant i < j \leqslant k$
2. $r_i^T r_j = 0,\ i \neq j,\ 0 \leqslant i, j \leqslant k$
3. $p_i^T A p_j = 0,\ i \neq j,\ 0 \leqslant i, j \leqslant k$

基本性质

由共轭梯度法得到的向量组$\{r_i\}$和$\{p_i\}$具有下面的性质：

1. $p_i^T r_j = 0,\ 0 \leqslant i < j \leqslant k$
2. $r_i^T r_j = 0,\ i \neq j,\ 0 \leqslant i, j \leqslant k$
3. $p_i^T A p_j = 0,\ i \neq j,\ 0 \leqslant i, j \leqslant k$
4. 定义$\mathcal{K}(A, r_0, k+1) = \mathrm{span}\{r_0, Ar_0, \ldots, A^k r_0\}$，称为Krylov子空间，则$\mathrm{span}\{r_0, \ldots, r_k\} = \mathrm{span}\{p_0, \ldots, p_k\} = \mathcal{K}(A, r_0, k+1)$

$k = 1$时性质的证明

- 对k进行归纳证明

$k=1$时性质的证明

- 对k进行归纳证明
- 当$k=1$时，因为

$$
\begin{aligned}
& p_0=r_0, r_1=r_0-\alpha_0 A p_0, p_1=r_1+\beta_0 p_0, \\
& p_0^T r_1=r_1^T r_0=r_0^T\left(r_0-\alpha_0 A r_0\right) \\
& \qquad =r_0^T r_0-\alpha_0 r_0^T A r_0=0, \\
& p_1^T A p_0=\left(r_1+\beta_0 r_0\right)^T A r_0 \\
& \qquad =r_1^T A r_0-\frac{r_1^T A r_0}{r_0^T A r_0} r_0^T A r_0=0
\end{aligned}
$$

所以性质成立

性质(1)

假设性质在k时成立，我们证明在$k+1$时也成立

1. 由于$r_{k+1}=r_k-\alpha_k Ap_k$以及归纳假设，我们有

$$p_i^T r_{k+1}=p_i^T r_k-\alpha_k p_i^T Ap_k=0, 0\leqslant i\leqslant k-1$$

又由于

$$p_k^T r_{k+1}=p_k^T r_k-\frac{p_k^T r_k}{p_k^T Ap_k}p_k^T Ap_k=0$$

所以性质(1)在$k+1$时成立

性质(2)

2. 由归纳假设

$$\mathrm{span}\{r_0, \ldots, r_k\} = \mathrm{span}\{p_0, \ldots, p_k\}$$

则由性质(1)可知r_{k+1}与上述空间正交，从而性质(2)在$k+1$时成立

性质(3)

3. 根据归纳假设，当$i = 0, 1, \ldots, k-1$时

$$\begin{aligned} p_i^T A p_{k+1} &= p_i^T A(r_{k+1} + \beta_k p_k) = r_{k+1}^T A p_i \\ &= \frac{1}{\alpha_i} r_{k+1}^T (r_i - r_{i+1}) = 0 \\ p_{k+1}^T A p_k &= (r_{k+1} + \beta_k p_k)^T A p_k \\ &= r_{k+1}^T A p_k - \frac{r_{k+1}^T A p_k}{p_k^T A p_k} p_k^T A p_k = 0 \end{aligned}$$

所以性质(3)成立

性质(4)

4. 由归纳假设可知

$$r_k, p_k \in \mathcal{K}(A, r_0, k+1) = \mathrm{span}\{r_0, Ar_0, \ldots, A^k r_0\}$$

于是

$$\begin{aligned} r_{k+1} &= r_k - \alpha_k A p_k \in \mathcal{K}(A, r_0, k+2), \\ p_{k+1} &= r_k + \beta_k A p_k \in \mathcal{K}(A, r_0, k+2), \end{aligned}$$

而根据性质(2),(3)，$r_0, \ldots, r_{k+1}$和$p_0, \ldots, p_{k+1}$都是线性无关的，所以性质(4)成立

Krylov子空间

- 前述性质表明，向量组$r_0, \ldots, r_k$和$p_0, \ldots, p_k$分别是Krylov子空间$\mathcal{K}(A, r_0, k+1)$的正交基和共轭正交基

Krylov子空间

- 前述性质表明，向量组$r_0, \ldots, r_k$和$p_0, \ldots, p_k$分别是Krylov子空间$\mathcal{K}(A, r_0, k+1)$的正交基和共轭正交基
- 所以采用共轭梯度法至多n步就得到方程组的解x_*

Krylov子空间

- 前述性质表明，向量组$r_0, \ldots, r_k$和$p_0, \ldots, p_k$分别是Krylov子空间$\mathcal{K}(A, r_0, k+1)$的正交基和共轭正交基
- 所以采用共轭梯度法至多n步就得到方程组的解x_*
- 理论上讲，共轭梯度法是直接法

精度估计

定理

用共轭梯度法计算得到的近似解x_k满足

$$\varphi(x_k) = \min\{\varphi(x) : x \in x_0 + \mathcal{K}(A, r_0, k)\}$$

或者等价地表示为

$$\|x_k - x_*\|_A = \min\{\|x - x_*\|_A : x \in x_0 + \mathcal{K}(A, r_0, k)\}$$

定理证明

- 由$\varphi(x) + x_*^T A x_* = (x - x_*)^T A (x - x_*)$可知要证的两式是等价的。下面只证第二式成立

定理证明

- 由$\varphi(x) + x_*^T A x_* = (x - x_*)^T A (x - x_*)$可知要证的两式是等价的。下面只证第二式成立
- 假设共轭梯度法计算到ℓ步出现$r_\ell = 0$, 那么有

$$\begin{aligned}
x_* = x_\ell &= x_{\ell-1} + \alpha_{\ell-1} p_{\ell-1} \\
&= x_{\ell-2} + \alpha_{\ell-2} p_{\ell-2} + \alpha_{\ell-1} p_{\ell-1} \\
&= \cdots\cdots \\
&= x_0 + \alpha_0 p_0 + \alpha_1 p_1 + \cdots + \alpha_{\ell-1} p_{\ell-1}
\end{aligned}$$

- 而对计算过程中任一步$k < \ell$, 我们有
$$x_k = x_0 + \sum_{j=0}^{k-1} \alpha_j p_j \in x_0 + \mathcal{K}(A, r_0, k)$$

- 而对计算过程中任一步$k < \ell$, 我们有

$$x_k = x_0 + \sum_{j=0}^{k-1} \alpha_j p_j \in x_0 + \mathcal{K}(A, r_0, k)$$

- 设$x \in \mathcal{K}(A, r_0, k)$为任一向量，则$x$有表示

$$x = x_0 + \sum_{j=0}^{k-1} \gamma_j p_j$$

- 而对计算过程中任一步$k < \ell$, 我们有

$$x_k = x_0 + \sum_{j=0}^{k-1} \alpha_j p_j \in x_0 + \mathcal{K}(A, r_0, k)$$

- 设$x \in \mathcal{K}(A, r_0, k)$为任一向量，则$x$有表示

$$x = x_0 + \sum_{j=0}^{k-1} \gamma_j p_j$$

- 于是

$$x_* - x = \sum_{j=0}^{k-1} (\alpha_j - \gamma_j) p_j + \sum_{j=k}^{\ell-1} \alpha_j p_j$$

- 而$x_* - x_k = \sum_{j=k}^{\ell} \alpha_j p_j$，根据共轭梯度法的性质(3)可得

$$\begin{aligned} \|x_* - x\|_A^2 &= \left\| \sum_{j=0}^{k-1} (\alpha_j - \gamma_j) p_j \right\|_A^2 + \left\| \sum_{j=k}^{\ell-1} \alpha_j p_j \right\|_A^2 \\ &\geqslant \left\| \sum_{j=k}^{\ell-1} \alpha_j p_j \right\|_A^2 = \|x_* - x_k\|_A^2 \end{aligned}$$

实用共轭梯度法

- 共轭梯度法在理论上确保至多n步得到方程组的精确解

实用共轭梯度法

- 共轭梯度法在理论上确保至多n步得到方程组的精确解
- 在实际使用时由于误差的存在，使得r_k之间的正交性很快损失，所以有限步终止性不再成立

实用共轭梯度法

- 共轭梯度法在理论上确保至多n步得到方程组的精确解
- 在实际使用时由于误差的存在，使得r_k之间的正交性很快损失，所以有限步终止性不再成立
- 而且在实际应用中，由于n一般很大，迭代n次迭代所耗费的计算时间令人无法接受

实用共轭梯度法

- 共轭梯度法在理论上确保至多n步得到方程组的精确解
- 在实际使用时由于误差的存在，使得r_k之间的正交性很快损失，所以有限步终止性不再成立
- 而且在实际应用中，由于n一般很大，迭代n次迭代所耗费的计算时间令人无法接受
- 所以通常仍把共轭梯度法作为一种迭代法使用，当$\|r_k\|$足够小或者达到指定迭代次数时终止

共轭梯度法的优点

- 在算法中，系数矩阵A仅仅用来由已知向量p产生向量Ap, 因此可以充分利用A的稀疏性，而且对某些提供矩阵A困难，而可以方便由p产生向量Ap的应用问题，这种方法十分有用

共轭梯度法的优点

- 在算法中，系数矩阵A仅仅用来由已知向量p产生向量Ap, 因此可以充分利用A的稀疏性，而且对某些提供矩阵A困难，而可以方便由p产生向量Ap的应用问题，这种方法十分有用
- 不需要预先估计任何参数就可以计算

共轭梯度法的优点

- 在算法中，系数矩阵A仅仅用来由已知向量p产生向量Ap, 因此可以充分利用A的稀疏性，而且对某些提供矩阵A困难，而可以方便由p产生向量Ap的应用问题，这种方法十分有用
- 不需要预先估计任何参数就可以计算
- 每次迭代的主要计算就是向量之间的运算，因此便于并行化

作为迭代法的收敛性估计

若系数矩阵与单位矩阵的差是一个秩为r的矩阵，而且r又很小的话，那么共轭梯度法收敛得很快

定理

如果$A = I + B$, $\operatorname{rank} B = r$, 那么共轭梯度法至多迭代$r+1$步即可得到方程组$Ax = b$的精确解

定理证明

- 注意到rank $B = r$蕴涵着

$$\mathrm{span}\{r_0, Ar_0, \ldots, A^k r_0\} = \mathrm{span}\{r_0, Br_0, \ldots, B^k r_0\}$$

的维数不会超过$r+1$, 因此定理成立。

误差估计

定理

用共轭梯度法求得的r_k有如下的误差估计：

$$\|x_k - x_*\|_A \leqslant 2\left(\frac{\sqrt{\kappa_2}-1}{\sqrt{\kappa_2}+1}\right)^k \|x_0 - x_*\|_A$$

其中$\kappa_2 = \kappa_2(A) = \|A\|_2\|A^{-1}\|_2$

定理证明

- 由共轭梯度法的性质可知，对任意的$x \in x_0 + \mathcal{K}(A, r_0, k)$有

$$
\begin{aligned}
x_* - x &= x_* - x_0 + \sum_{j=0}^{k-1} a_{k,j+1} A^j r_0 \\
&= \left(I + \sum_{j=1}^{k} a_{kj} A^j \right) A^{-1} r_0 = P_k(A) A^{-1} r_0
\end{aligned}
$$

其中$P_k(\lambda) = 1 + \sum_{j=1}^{k} a_{kj} \lambda^j$

- 令$\mathcal{P}_k$为所有满足$P_k(0)=1$，且次数不超过k的实系数多项式全体，则（第一个不等号应用了“最速下降法”一节中已证的引理）

$$\begin{aligned}\|x_*-x_k\|_A &= \min\{\|x-x_*\|_A : x\in x_0+\mathcal{K}(A,r_0,k)\}\\ &= \min_{P_k\in\mathcal{P}_k}\|P_k(A)A^{-1}r_0\|_A\\ &\leqslant \min_{P_k\in\mathcal{P}_k}\max_{1\leqslant i\leqslant n}|P_k(\lambda_i)|\|A^{-1}r_0\|_A\\ &\leqslant \min_{P_k\in\mathcal{P}_k}\max_{a\leqslant\lambda\leqslant b}|P_k(\lambda)|\|x_*-x_0\|_A\end{aligned}$$

其中$0<a=\lambda_0\leqslant\cdots\leqslant\lambda_n=b$是$A$的特征值

- 根据Chebyshev多项式的性质，最优化问题 $\min_{P_k\in\mathcal{P}_k}\max_{a\leqslant\lambda\leqslant b}|P_k(\lambda)|$ 有唯一解

$$\tilde{P}_k(\lambda)=\frac{T_k\left(\dfrac{b+a-2\lambda}{b-a}\right)}{T_k\left(\dfrac{b+a}{b-a}\right)}$$

其中$T_k(x)$是k次Chebyshev多项式

暂停：Chebyshev多项式

- Chebyshev多项式：$T_n(x) = cos(n \arccos x)$，它是定义在$[-1, 1]$上，在所有同首项系数的$n$次多项式中，它在$[-1, 1]$上的绝对最大值最小

暂停：Chebyshev多项式

- Chebyshev多项式：$T_n(x) = cos(n \arccos x)$，它是定义在$[-1, 1]$上，在所有同首项系数的$n$次多项式中，它在$[-1, 1]$上的绝对最大值最小
- 在$[-1, 1]$外用多项式形式直接延拓

暂停：Chebyshev多项式

- Chebyshev多项式：$T_n(x) = cos(n \arccos x)$，它是定义在$[-1, 1]$上，在所有同首项系数的$n$次多项式中，它在$[-1, 1]$上的绝对最大值最小
- 在$[-1, 1]$外用多项式形式直接延拓
- 递推公式：$T_n(x) = 2xT_{n-1}(x) - T_{n-2}(x)$，$T_0(x) = 1$，$T_1(x) = x$

暂停：Chebyshev多项式

- Chebyshev多项式：$T_n(x) = cos(n \arccos x)$，它是定义在$[-1,1]$上，在所有同首项系数的$n$次多项式中，它在$[-1,1]$上的绝对最大值最小
- 在$[-1,1]$外用多项式形式直接延拓
- 递推公式：$T_n(x) = 2xT_{n-1}(x) - T_{n-2}(x)$，$T_0(x) = 1$，$T_1(x) = x$
- 基于上述公式，可以证明当$|x| \geqslant 1$时有
$$T_n(x) = \frac{1}{2}\left(\left(x - \sqrt{x^2-1}\right)^n + \left(x + \sqrt{x^2-1}\right)^n\right)$$

- 当$\gamma > 1$, $x = (\gamma+1)/(\gamma-1)$时

$$x \pm \sqrt{x^2-1} = \frac{(\sqrt{\gamma}\pm 1)^2}{\gamma - 1},$$

- 当$\gamma > 1$, $x = (\gamma+1)/(\gamma-1)$时

$$x \pm \sqrt{x^2-1} = \frac{(\sqrt{\gamma}\pm 1)^2}{\gamma-1},$$

- 从而有

$$T_n\left(\frac{\gamma+1}{\gamma-1}\right) = \frac{(\sqrt{\gamma}+1)^{2n}+(\sqrt{\gamma}-1)^{2n}}{2(\gamma-1)^n} \geqslant \frac{(\sqrt{\gamma}+1)^{2n}}{2(\gamma-1)^n}$$

重回证明

- 根据Chebyshev多项式的性质，我们有

$$
\begin{aligned}
\max_{a\leqslant x\leqslant b}|\tilde{P}_k(\lambda)| &= \frac{1}{T_k\left(\dfrac{b+a}{b-a}\right)} \\
&\leqslant \frac{2(b-a)^k}{(\sqrt{b}+\sqrt{a})^{2k}} \\
&= 2\left(\frac{\sqrt{\kappa_2}-1}{\sqrt{\kappa_2}+1}\right)^k
\end{aligned}
$$

这就完成了证明($\kappa_2 = b/a$)

注解

- 上述估计是十分粗糙的

注解

- 上述估计是十分粗糙的
- 实际收敛速度往往比这个估计快得多

注解

- 上述估计是十分粗糙的
- 实际收敛速度往往比这个估计快得多
- 但这个结果告诉我们，只要系数矩阵是十分良态的（即$\kappa_2 \approx 1$），那么共轭梯度法就会收敛得很快

注解

- 上述估计是十分粗糙的
- 实际收敛速度往往比这个估计快得多
- 但这个结果告诉我们，只要系数矩阵是十分良态的（即$\kappa_2 \approx 1$），那么共轭梯度法就会收敛得很快
- 对比于最速下降法收敛估计中的因子，我们有

$$\frac{\lambda_n - \lambda_1}{\lambda_n + \lambda_1} \geqslant \frac{\sqrt{\lambda_n} - \sqrt{\lambda_1}}{\sqrt{\lambda_n} + \sqrt{\lambda_1}}$$