Метод сопряженных градиентов

Метод сопряженных градиентов - один из наиболее популярных и хорошо известных итеративных методов для решения систем линейных алгебраических уравнений. Задача состоит в минимизации тестовой функции:

1

((х) = —хТАх — хТЬ

где b,xeRn, AeRnxnи A - симметричная положительно определенная матрица.

Пусть х\* - точка минимума функции р, тогда

Vp(x\*) =Ax\* — b = О

или

Ах\* = Ъ

То есть точка минимума функции р(х) также является решением системы линейных уравнений Ах = b, что позволяет минимизировать функцию р(х) вместо прямого поиска решения системы уравнений. Единственность решения гарантируется ограничениями, наложенными на матрицу A. Идея метода состоит в следующем: выбираем начальную позицию х0, затем на каждом шаге движемся в направлении, таком, что р(хк+^ < р(хк). Причем хк+-!\_ = хк + а кр к, где ак - длина шага, рк - направление поиска; выбор ак и рк зависит от конкретного метода. Введем обозначение

Гк = Vp(x^ = Ахк — b Длина шага выбирается следующим образом:

\_ У((хк)ТУ((хк) = г/гк ак V (р(хк)т А V (р(хк) г/АГк Будем искать теперь n линейно независимых векторов {р 0)р 1 ,...,pn\_-J - базис . Тогда можно минимизировать функцию ( ), минимизируя ее вдоль каждой оси. Тогда, так как - базис , разность между

точным решением х\* и первым приближением х0 может быть выражена следующим образом:

х\* - Х0 = бТоРо + °lPl + + (Jn-lVn-1 Заметим, что ак совпадают с ак, тогда

X\* = Х0 + CCqPo "I" alPl + "I" «n-lPn-l Для диагональных матриц ^ на каждом шаге хк - проекция точного решения х\* на пространство, покрытое к векторами.

Другое полезное свойство: каждый следующий сопряженный вектор рк может быть получен, опираясь только на предыдущий вектор рк\_1, без знания о предыдущих векторах. Новый вектор автоматически будет ортогонален каждому из них. Формула для направления на к-ом шаге:

Рк = ~rk + PuVk-i

где

р \_ rkTAPk-i \_ гктгк Рк-1ТАРк-1 гк-1Тгк-1 Весь алгоритм выглядит следующим образом:

1. Подготовка:

* Выбор начального приближения х0
* г0 = Ах0 — b
* Ро = —о
  1. (к+1)-ая итерация:

rjrk

ак+1 —

РкТАРк

хк+1 — хк + ak+lPk rk+1 — rk + ak+lAPk

т

п rk+1 rk+1

Рк+1 — „ Ту гк гк

9

9

Рк+1 — ~rk+1 + Pk+lPk