7 Метод на спрегнатия градиент. Алгоритъм. Основни свойства.

7.1 Общи характеристики на итерационните методи

Нека разгледаме системата от линейни алгебрични уравнения

$$H\tilde{x} = b,$$

където H е симетрична и положително определена матрица. Всеки итерационен метод се свежда до построяване на редица от приближени решения

$$x^0, x^1, \ldots, x^k, \ldots$$

Методът е сходящ, когато тази редица клони към точното решение. В класическата теория на итерационните методи се разглеждат два основни класа: явни и неявни. Явните итерационни методи имат каноничен вид

$$\frac{x^{k+1} - x^k}{\tau_k} + Hx^k = b.$$

При тях за получаването на всяко следващо приближение не се налага решаване на спомагателна система от линейни алгебрични уравнения. Представител на явните методи е методът на простата итерация. При неявните методи се въвежда така наречената регуляризираща матрица C. Техният каноничен вид е

$$C^k \frac{x^{k+1} - x^k}{\tau_k} + Hx^k = b.$$

На всяка стъпка от неявния метод се решава система с матрицата C^k. Такъв е методът на Гаус-Зайдел, при който регуляризиращата матрица е триъгълна. Разгледаните явни и неявни методи са двуслойни. При тях новото итерационно решение се получава, като се използва само предходното. Двуслойните методи имат вида

$$x^{k+1} = F(x^k).$$

Тук ние ще разгледаме метода на спрегнатия градиент (CG метод), който е представител на съвременните проекционни итерационни методи. Методът на спрегнатия градиент е изчислително най-ефективният измежду известните двуслойни явни методи за решаване на системи линейни алгебрични уравнения със симетрична и положително определена матрица.

7.2 Формулировка на метода. Основни свойства.

Методът на спрегнатия градиент е вариационен метод. Той се основава на замяна на изходната система със задача за минимизиране на квадратичен функционал

Лема 7.1 *Решението на системата $H\hat{x} = b$ съвпада с минимума на функционала*

$$f(x) = \frac{1}{2}x^T Hx - b^T x + C. \tag{7.1}$$

Д о к а з а т е л с т в о. За всяко Δx е в сила представянето

$$f(x + \Delta x) = \frac{1}{2}(x + \Delta x)^T H(x + \Delta x) - b^T(x + \Delta x) + C$$

$$= \frac{1}{2}(\Delta x^T Hx + x^T H\Delta x) - b^T \Delta x + \frac{1}{2}x^T Hx - b^T x + C + \frac{1}{2}\Delta x^T H\Delta x$$

и следователно

$$f(x + \Delta x) = f(x) + (x^T H - b^T)\Delta x + \frac{1}{2}\Delta x^T H\Delta x.$$

а) Нека $Hx = b$. Следователно $x^T H - b^T = 0$ и тъй като H е симетрична и положително определена, то $f(x + \Delta x) \geq f(x)$, т.е. x минимизира функционала.

б) Нека x минимизира функционала и нека допуснем, че $Hx \neq b$, т.е. $x^T H - b^T = \delta^T \neq 0$. Нека изберем $\Delta x = -\epsilon\delta$, където

$$0 < \epsilon < \frac{2\delta^T\delta}{\delta^T H\delta}.$$

Тогава

$$-\epsilon\delta^T\delta + \frac{1}{2}\epsilon^2\delta^T H\delta < 0$$

и следователно

$$f(x - \epsilon\delta) < f(x),$$

което противоречи на условието. ∎

При вариационните методи, итерационните приближения се получават, като решения на оптимизационна задача върху последователност от вложени крайномерни пространства.

Приближението x^{k+1} търсим във вида

$$x^{k+1} = x^k + \tau_k d^k, \tag{7.2}$$

където с d^k е означено k-тото направление на търсене. Параметърът τ_k ще определим така, че да минимизира функционала $f(x^k + \tau_k d^k)$. От изведеното при доказателството на лемата представяне на функционала от аргумент с нарастване получаваме равенството

$$f(x^k + \tau_k d^k) = f(x^k) + \tau_k ({x^k}^T H - b^T) d^k + \frac{1}{2}\tau_k^2 {d^k}^T H d^k$$

и следователно

$$\frac{\partial f(x^k + \tau_k d^k)}{\partial \tau_k} = {g^k}^T d^k + \tau_k {d^k}^T H d^k,$$

където с

$$g^k = Hx^k - b \tag{7.3}$$

сме означили k-тия резидуал. Функционалът е квадратичен относно τ_k. Тъй като коефициентът пред члена от втора степен е положителен, минимумът се достига, когато

$$\frac{\partial f(x^k + \tau_k d^k)}{\partial \tau_k} = 0$$

и следователно

$$\tau_k = -\frac{{d^k}^T g^k}{{d^k}^T H d^k}. \tag{7.4}$$

Лема 7.2 *Резидуалът g^{k+1} е ортогонален на k-тото направление на търсене d^k.*

Д о к а з а т е л с т в о. Умножаваме отляво (7.2) с H

$$Hx^{k+1} = Hx^k + \tau_k H d^k,$$

след което изваждаме b от двете страни на равенството и получаваме

$$g^{k+1} = g^k + \tau_k H d^k. \tag{7.5}$$

Умножаваме (7.5) с ${d^k}^T$, след което прилагаме (7.4) и получаваме

$${d^k}^T g^{k+1} = {d^k}^T g^k + \tau_k {d^k}^T H d^k = 0, \tag{7.6}$$

с което ортогоналността е доказана. ■

Следващата стъпка в конструкцията на метода на спрегнатия градиент е определянето на направленията на търсене d^k. За целта използваме следната рекурсивна дефиниция:

$$d^{k+1} = -g^{k+1} + \beta_k d^k, \qquad k = 0, 1, 2, \ldots, \tag{7.7}$$

където $d^0 = -g^0$, а $\beta_0, \beta_1, \ldots$ са свободни параметри, които ще бъдат определени допълнително. Случаят $\beta_r = 0$ съответства на метода на най-бързото спускане.

Следващата лема е важна за коректната формулировка на метода. В частност тя показва, че при $d_k = 0$ итерационният процес е приключил и е намерено точното решение. Това е съществено, защото в противен случай, параметърът τ_k е неопределен.

Лема 7.3 *В сила са твърденията:*

а) Ако $d^k = 0$, то $x^k = \hat{x}$.
б) Ако $x^k \neq \hat{x}$, то $\tau_k \neq 0$.

Доказателство. а) Умножаваме (7.7) с ${g^k}^T$ и получаваме

$${g^k}^T d^k = -||g^k||^2 + \beta_{k-1} {g^k}^T d^{k-1}. \tag{7.8}$$

Тук от условието на лемата следва, че лявата част на равенството е равна на нула. Така, от ортогоналността на резидуала с предходното направление на търсене (виж (7.6)) следва търсеното твърдение

$$||g^k|| = 0 \Longleftrightarrow Hx^k = b \Longleftrightarrow x^k = \hat{x}.$$

б) От (7.8) получаваме

$$x^k \neq \hat{x} \Longrightarrow g^k \neq 0 \Longrightarrow g^{k^T} d^k \neq 0, \Longrightarrow \tau_k \neq 0$$

с което лемата е доказана. ∎

Стратегията, която се прилага при определяне на коефициентите $\beta_0, \beta_1, \ldots$ се основава на минимизиране на грешката $||x - \hat{x}||_H$ върху текущото крайномерно пространство на Стеклов, породено от матрицата H. Нека припомним дефинициите:

$$(x, y)_H = x^T H y, \qquad ||x||_H^2 = x^T H x$$

$$(x, y)_{H^{-1}} = x^T H^{-1} y, \qquad ||x||_{H^{-1}}^2 = x^T H^{-1} x.$$

Означаваме с $g = Hx - b$. Следователно

$$g = Hx - H\hat{x} = H(x - \hat{x}) \Longrightarrow x - \hat{x} = H^{-1} g.$$

Така получаваме

$$||x - \hat{x}||_H^2 = (x - \hat{x})^T H (x - \hat{x}) = g^T H^{-1} H H^{-1} g = ||g||_{H^{-1}}^2,$$

т.е.

$$||x - \hat{x}||_H = ||g||_{H^{-1}}. \tag{7.9}$$

От (7.5) и (7.7) получаваме представянето

$$\begin{aligned} g^k &= g^{k-1} + \tau_{k-1} H d^{k-1} \\ &= g^{k-1} + \tau_{k-1} H(-g^{k-1} + \beta_{k-2} d^{k-2}) \\ &= g^0 + \textstyle\sum_{l=1}^{k} \alpha_l^k H^l g^0, \end{aligned}$$

т.е.

$$g^k = g^0 + \sum_{l=1}^{k} \alpha_l^k H^l g^0, \tag{7.10}$$

където

$$\alpha_k^k = (-1)^k \prod_{i=0}^{k-1} \tau_i \neq 0.$$

Нека означим

$$S_k = SPAN\{Hg^0, H^2g^0, \dots, H^kg^0\},$$

$$T_k = \{g \in \mathbf{R}^N : g = g^0 + h, \quad h \in S_k\}.$$

Очевидно S_k е подпространство на $\mathbf{R}^N$ с размерност равна на броя на линейно независимите вектори измежду $Hg^0, H^2g^0, \dots, H^kg^0$.

Теорема 7.1 *Параметърът β_k се определя по формулата*

$$\beta_k = \frac{{g^{k+1}}^T H d^k}{{d^k}^T H d^k}, \tag{7.11}$$

при предположение, че

$$||g^k||_{H^{-1}} = \min_{g \in T_k} ||g||_{H^{-1}}. \tag{7.12}$$

От (7.12) следват също така равенствата

$${g^k}^T g^l = 0, \qquad \forall l \neq k, \tag{7.13}$$

$${d^k}^T H d^l = 0, \qquad \forall l \neq k. \tag{7.14}$$

Доказателство. Условие (7.12) е еквивалентно на

$$||g^0 + h^k||_{H^{-1}} = \min_{h \in S_k} ||g^0 + h||_{H^{-1}}, \tag{7.15}$$

където $h^k = g^k - g^0$ и съответно $h = g - g^0$. Това означава, че h^k е елемент на най-добро приближение на $-g^0$ в S_k и следователно $g^0 + h^k$ е H^{-1} ортогонален вектор на h за всяко $h \in S_k$, т.е.

$$(g^0 + h^k)^T H^{-1} h = 0 \qquad \forall h \in S_k.$$

Следователно k-тият резидуал е ортогонален на S_k, т.е.

$${g^k}^T H^{-1} h = 0 \qquad \forall h \in S_k.$$

Очевидно, за всяко $g \in T_{k-1}$, векторът $h := Hg \in S_k$ и следователно

$${g^k}^T g = 0 \qquad \forall g \in T_{k-1}, \tag{7.16}$$

от където директно следва (7.13).
Нека $l < k$. За да докажем (7.14) прилагаме (7.5) и (7.7) и получаваме

$$d^{k^T} H d^l = (Hd^k)^T d^l =$$

$$\frac{1}{\tau_k}(g^{k+1} - g^k)^T(-g^l + \beta_{l-1} d^{l-1}) =$$

$$= \frac{\beta_{l-1}}{\tau_k}(g^{k+1} - g^k)^T d^{l-1} = 0.$$

За последното равенство сме използвали, че $d^{l-1} \in T_{l-1}$, което се получава аналогично на (7.10) и строго може да се докаже по индукция.

Забележка: От равенства (7.13) и (7.14) следва, че в метода на спрегнатия градиент резидуалите са ортогонални, а направленията на търсене са H-ортогонални.

От (7.14) получаваме и формулата за пресмятане на β_k (7.11), т.е.

$$0 = d^{k+1^T} H d^k = (-g^{k+1} + \beta_k d^k)^T H d^k$$

и следователно

$$\beta_k = \frac{g^{k+1^T} H d^k}{d^{k^T} H d^k},$$

с което теоремата е доказана. ∎

Така полученият алгоритъм е предложен от *Hestenes* и *Stiefel* през 1952г. Тук ще разгледаме една модификация на (7.11), която се оказва важна за реализацията на метода на спрегнатия градиент. Прилагаме (7.5) и от ортогоналността на резидуалите за числителя получаваме

$$g^{k+1^T} H d^k = \frac{1}{\tau_k} g^{k+1^T}(g^{k+1} - g^k) = \frac{1}{\tau_k} g^{k+1^T} g^{k+1}.$$

За преобразуване на знаменателя прилагаме (7.7) и (7.5), както и използваното в доказателството на теоремата свойство $d^{k-1} \in T_{k-1}$. Така получаваме

$$d^{k^T} H d^k = (-g^k + \beta_{k-1} d^{k-1})^T \frac{1}{\tau_k}(g^{k+1} - g^k) = \frac{1}{\tau_k} g^{k^T} g^k,$$

и следователно

$$\beta_k = \frac{g^{k+1^T} g^{k+1}}{g^{k^T} g^k} \tag{7.17}$$

По аналогичен начин модифицираме и формулата за τ_k:

$$d^{k^T} g^k = (-g^k + \beta_{k-1} d^{k-1})^T g^k = -g^{k^T} g^k$$

и следователно

$$\tau_k = \frac{g^{k^T} g^k}{d^{k^T} H d^k}.$$

7.3 Алгоритмична реализация

Алгоритъмът за реализацията на метода на спрегнатия градиент може да се запише във вида:

$$x^0, \quad g^0 = Hx^0 - b, \quad d^0 = -g^0,$$

$$k = 0, 1, 2, \ldots$$

$$\tau_k = \frac{g^{k^T} g^k}{d^{k^T} H d^k}$$

$$x^{k+1} = x^k + \tau_k d^k$$

$$g^{k+1} = g^k + \tau_k H d^k$$

$$\beta_k = \frac{g^{k+1^T} g^{k+1}}{g^{k^T} g^k}$$

$$d^{k+1} = -g^{k+1} + \beta_k d^k$$

Важно е да отбележим, че така описаният алгоритъм, на всяка стъпка от итерационния процес включва само едно умножение на матрицата H по вектор плюс две скаларни произведения и три векторни операции от типа умножение на скалар по вектор плюс вектор. Така за изчислителната сложност на една итерация получаваме оценката

$$\mathcal{N}_{it}^{CG}(H^{-1}b) \approx \mathcal{N}(Hd) + 2\mathcal{N}(\cdot,\cdot) + 3\mathcal{N}(v := v + \alpha w) \approx \mathcal{N}(Hd) + 10N.$$

Забележка. От получената обща оценка за изчислителната сложност следва, че броят на аритметичните операции за една итерация в метода на спрегнатия градиент при решаване на линейни системи получени след дискретизация на елиптични гранични задачи в двумерни области има асимптотика $\mathcal{N}_{it}^{CG}(A^{-1}b) = O(N)$. В частност, за моделната задача, където $A = blocktridiag(A_{i,i-1}, A_{i,i}, A_{i,i+1})$, където $A_{i,i-1} = A_{i,i+1} = -I$ и $A_{i,i} = tridiag(-1, 4, -1)$ е в сила оценката

$$\mathcal{N}_{it}^{CG}(A^{-1}b) \approx \mathcal{N}(Ad) + 10N \approx 19N.$$