ПРЕДОБУСЛАВЛИВАНИЕ В МЕТОДЕ СОПРЯЖЁННЫХ ГРАДИЕНТОВ*

В. Н. Малозёмов

v.malozemov@spbu.ru

3 декабря 2015 г.

1°. Пусть D — симметричная положительно определённая матрица порядка n и c — n-мерный вектор. Рассмотрим экстремальную задачу

$$Q(x) := \tfrac{1}{2}\langle Dx, x\rangle + \langle c, x\rangle \to \min_{x\in\mathbb{R}^n}. \tag{1}$$

Её единственное решение x_* определяется из уравнения

$$Dx = -c.$$

Возьмём произвольную симметричную положительно определённую матрицу B порядка n. Как известно, существует единственная симметричная положительно определённая матрица $B^{1/2}$ со свойством $B^{1/2}B^{1/2} = B$. Обозначим

$$A = B^{1/2}DB^{1/2}, \quad b = -B^{1/2}c.$$

Очевидно, что матрица A является симметричной и положительно определённой.

Наряду с задачей (1) рассмотрим ещё одну экстремальную задачу

$$F(y) := \tfrac{1}{2}\langle Ay, y\rangle - \langle b, y\rangle \to \min_{y\in\mathbb{R}^n}. \tag{2}$$

Её единственное решение y_* определяется из уравнения

$$Ay = b$$

или, в развёрнутой записи,

$$B^{1/2}DB^{1/2}y = -B^{1/2}c.$$

Ясно, что решения x_*, y_* задач (1) и (2) связаны соотношением

$$x_* = B^{1/2}y_*.$$

*Семинар по конструктивному негладкому анализу и недифференцируемой оптимизации «CNSA & NDO»: `http://www.apmath.spbu.ru/cnsa/`

2°. Опишем общий шаг метода сопряжённых градиентов для решение задачи (2) (см., например, [1]).

k**-й шаг.** К этому моменту уже имеются

$$y_{k-1},\ \tilde g_{k-1} := Ay_{k-1} - b \neq \mathbb{O},\ \tilde s_k.$$

Вычисляем

$$\tilde t_k = \frac{\langle \tilde g_{k-1}, \tilde g_{k-1}\rangle}{\langle A\tilde s_k, \tilde s_k\rangle}, \tag{3}$$

$$y_k = y_{k-1} + \tilde t_k \tilde s_k, \tag{4}$$

$$\tilde g_k = \tilde g_{k-1} + \tilde t_k A\tilde s_k. \tag{5}$$

Если $\tilde g_k = \mathbb{O}$, то y_k — точка минимума функции $F(y)$ на $\mathbb{R}^n$. Процесс завершён. Иначе вычисляем

$$\tilde b_k = \frac{\langle \tilde g_k, \tilde g_k\rangle}{\langle \tilde g_{k-1}, \tilde g_{k-1}\rangle}, \tag{6}$$

$$\tilde s_{k+1} = -\tilde g_k + \tilde b_k \tilde s_k. \tag{7}$$

Методом сопряжённых градиентов строится последовательность $y_0, y_1, \ldots, y_k, \ldots$, которая сходится к решению задачи (2) не более, чем за n шагов.

3°. Имея в виду решение задачи (1), перейдём от последовательности $\{y_k\}$ к последовательности $\{x_k\}$, где $x_k = B^{1/2}y_k$.

Если x_0 — произвольное начальное приближение для решения задачи (1), то в качестве согласованного начального приближения для решения задачи (2) следует взять $y_0 = B^{-1/2}x_0$, где $B^{-1/2} = (B^{1/2})^{-1}$. При этом

$$\tilde g_0 = Ay_0 - b = B^{1/2}Dx_0 + B^{1/2}c = B^{1/2}(Dx_0 + c) = B^{1/2}g_0.$$

Отметим, что и в общем случае

$$\tilde g_k = Ay_k - b = B^{1/2}(Dx_k + c) = B^{1/2}g_k. \tag{8}$$

Умножим равенство (4) слева на матрицу $B^{1/2}$. Получим

$$x_k = x_{k-1} + \tilde t_k s_k,$$

где $s_k = B^{1/2}\tilde s_k$. Формула (3) согласно (8) принимает вид

$$\tilde t_k = \frac{\langle g_{k-1}, Bg_{k-1}\rangle}{\langle Ds_k, s_k\rangle}.$$

Из (5) и (8) следует, что
$$g_k = g_{k-1} + \tilde{t}_k D s_k.$$

В силу (8) условия $\tilde{g}_k = \mathbb{O}$ и $g_k = \mathbb{O}$ равносильны. Если $g_k = \mathbb{O}$, то и $\tilde{g}_k = \mathbb{O}$. В этом случае $y_k = y_*$ и

$$x_k = B^{1/2} y_k = B^{1/2} y_* = x_*.$$

Значит, x_k является решением задачи (1).

Пусть $g_k \neq \mathbb{O}$. На основании (8) формулу (6) можно переписать так:

$$\tilde{b}_k = \frac{\langle g_k, B g_k \rangle}{\langle g_{k-1}, B g_{k-1} \rangle}.$$

Умножим равенство (7) слева на матрицу $B^{1/2}$. Придём к формуле

$$s_{k+1} = -B g_k + \tilde{b}_k s_k.$$

Объединив полученные результаты, получим параметрический вариант метода сопряжённых градиентов для решения задачи (1). Параметром является симметричная положительно определённая матрица B.

Нулевой шаг. Берём произвольное начальное приближение $x_0 \in \mathbb{R}^n$ и вычисляем градиент $g_0 = D x_0 + c$. Если $g_0 = \mathbb{O}$, то $x_0 = x_*$. Вычисления прекращаются. Иначе полагаем

$$s_1 = B^{1/2} \tilde{s}_1 = -B^{1/2} \tilde{g}_0 = -B g_0.$$

k-й шаг. Имеются x_{k-1}, $g_{k-1} \neq \mathbb{O}$, s_k. Вычисляем

$$\begin{aligned} \tilde{t}_k &= \frac{\langle g_{k-1}, B g_{k-1} \rangle}{\langle D s_k, s_k \rangle}, \\ x_k &= x_{k-1} + \tilde{t}_k s_k, \\ g_k &= g_{k-1} + \tilde{t}_k D s_k. \end{aligned} \tag{9}$$

Если $g_k = \mathbb{O}$, то $x_k = x_*$. Вычисления прекращаются. Иначе находим

$$\begin{aligned} \tilde{b}_k &= \frac{\langle g_k, B g_k \rangle}{\langle g_{k-1}, B g_{k-1} \rangle}, \\ s_{k+1} &= -B g_k + \tilde{b}_k s_k. \end{aligned}$$

Описание метода завершено.

Отметим, что последовательность $x_0, x_1, \ldots, x_k, \ldots$ сходится к x_* не более чем за n шагов.

4°. Коэффициент $\tilde t_k$ вида (9) обладает экстремальным свойством.

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 1. *Минимум функции*

$$\varphi_k(t) = Q(x_{k-1} + ts_k)$$

на полуоси $(0, +\infty)$ *достигается при* $t = \tilde t_k$.

Доказательство. При $k = 1$ имеем

$$Q(x_0 + ts_1) = Q(x_0) + \langle g_0, s_1\rangle t + \tfrac{1}{2}t^2\langle Ds_1, s_1\rangle,$$

при этом $\langle g_0, s_1\rangle = -\langle g_0, Bg_0\rangle$. Ясно, что минимум квадратного трёхчлена $q_1(t)$ с положительным старшим коэффициентом достигается в единственной точке $t = \tilde t_1 > 0$.

Пусть $k \geqslant 2$. Запишем

$$Q(x_{k-1} + ts_k) = Q(x_{k-1}) + \langle g_{k-1}, s_k\rangle t + \tfrac{1}{2}t^2\langle Ds_k, s_k\rangle.$$

По свойству метода сопряжённых градиентов $\langle \tilde g_{k-1}, \tilde s_{k-1}\rangle = 0$, так что $\langle g_{k-1}, s_{k-1}\rangle = 0$. Как следствие,

$$\langle g_{k-1}, s_k\rangle = \langle g_{k-1}, -Bg_{k-1} + \tilde b_{k-1}s_{k-1}\rangle = -\langle g_{k-1}, Bg_{k-1}\rangle.$$

Теперь так же, как и в случае $k = 1$, заключаем, что минимум квадратного трёхчлена $q_k(t)$ с положительным старшим коэффициентом достигается в единственной точке $t = \tilde t_k > 0$. □

5°. Матрицу B обычно используют, когда в задаче (1) матрица D плохо обусловлена. Напомним, что числом обусловленности симметричной положительно определённой матрицы D называется отношение её наибольшего собственного числа к наименьшему, то есть величина

$$\varkappa(D) = \frac{\lambda_{\max}(D)}{\lambda_{\min}(D)}.$$

О плохой обусловленности матрицы D говорят, когда значение $\varkappa(D)$ велико.

Найдём число обусловленности матрицы $A = B^{1/2}DB^{1/2}$. По определению

$$\varkappa(A) = \frac{\lambda_{\max}(A)}{\lambda_{\min}(A)}.$$

Отметим, что матрица $B^{1/2}AB^{-1/2}$ имеет те же собственные числа, что и матрица A. Вместе с тем, $B^{1/2}AB^{-1/2} = BD$. Значит,

$$\varkappa(A) = \frac{\lambda_{\max}(BD)}{\lambda_{\min}(BD)}.$$

Число обусловленности матрицы A будет близко к единице, когда матрица B является хорошим приближением к D^{-1}. В этом случае имеет смысл перейти от решения задачи (1) к решению задачи (2).

Матрица B называется *предобуславливателем.*

6°. Для получения качественных предобуславливателей можно использовать метод Хотеллинга (см., например, [2, с. 193–194]).

Пусть B_0 — произвольная симметричная положительно определённая матрица порядка n и $R_0 = E - DB_0$. Построим рекуррентную последовательность матриц

$$B_k = B_{k-1}(E - R_{k-1}), \quad R_k = E - DB_k, \quad k = 1, 2, \ldots$$

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 2. *Если* $\|R_0\| \leqslant q < 1$, *то*

$$\|B_s - D^{-1}\| \leqslant \|B_0\| \frac{q^{2^s}}{1-q}, \quad s = 1, 2, \ldots$$

Здесь $\|\cdot\|$ — любая матричная норма.

7°. Простейшим предобуславливателем является предобуславливатель Якоби:

$$B = \operatorname{diag}(d_{11}^{-1}, \ldots, d_{nn}^{-1}).$$

ЛИТЕРАТУРА

1. Малозёмов В. Н. *О методе сопряжённых градиентов* / Семинар «DHA & CAGD». Избранные доклады. 28 апреля 2012 г. (`http://dha.spb.ru/reps12.shtml#0428`)

2. Фаддеев Д. К., Фаддеева В. Н. *Вычислительные методы линейной алгебры.* 4-е изд. стер. СПб.: «ЛАНЬ», 2009. 736 с.