共轭梯度法解线性方程组的并行算法

李哲

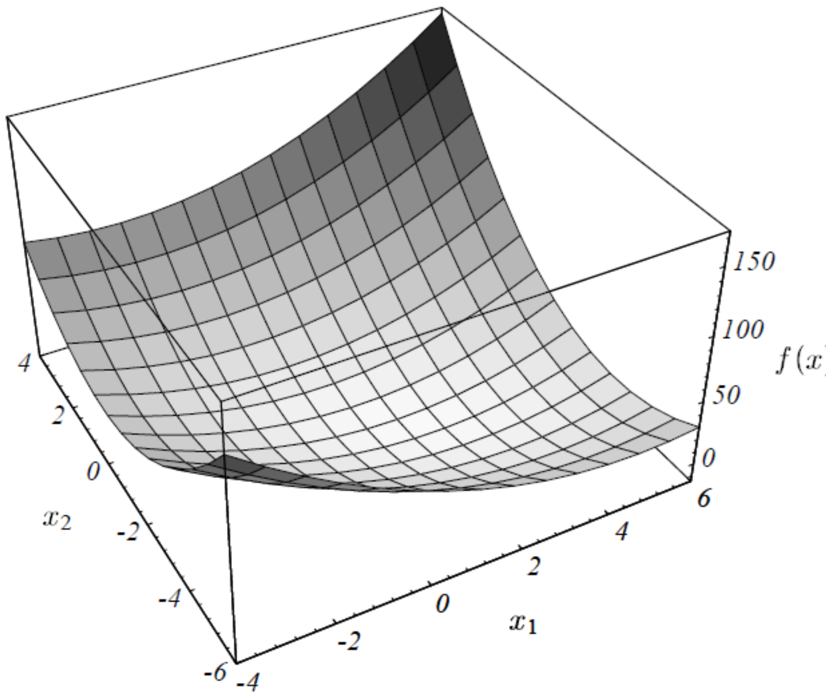
- 对于线性方程组 $Ax=b$ ，考虑函数

$$f=\frac{1}{2}x^{\mathrm{T}}Ax-b^{\mathrm{T}}x+c$$

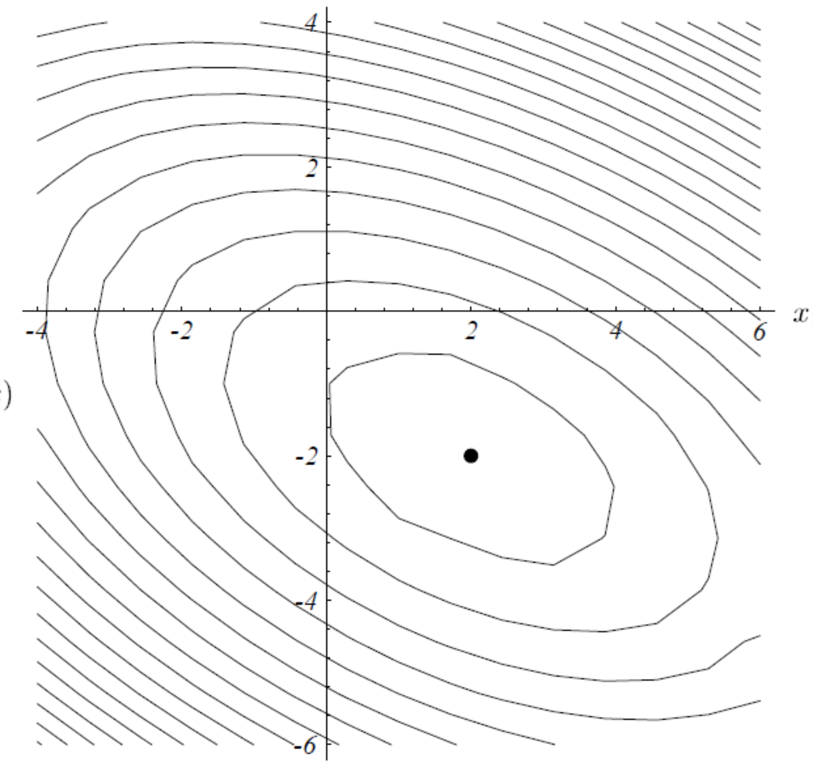
- 对于

$$A=\begin{bmatrix} 3 & 2 \\ 2 & 6 \end{bmatrix} \qquad b=\begin{bmatrix} 2 \\ -8 \end{bmatrix}$$

- 函数图像如：



150
100
50
0
$f(x)$
4
2
0
x_2
-2
-4
-6
-4
-2
0
2
4
6
x_1



4
2
-2
-4
-6
-4
-2
2
4
6
x_1

- 函数值最小的点即为 $Ax=b$ 的解。

$$f'(x)=\frac{1}{2}A^{\mathrm{T}}x+\frac{1}{2}Ax-b$$

- A为对称矩阵时，化为 $f'(x)=Ax-b$

- 假设x_0是一个初始点，从点x_0出发沿某一规定方向p_0，求函数$f(x)$在直线

$$x = x_0 + tp_0$$

上的极小点，假设求得的极小点为x_1，再从点x_1出发沿某一规定方向p_1求函数$f(x)$在直线$x = x_1 + tp_1$上的极小点，如此继续下去

- 记$\varphi_k(t)=f(x_k+tp_k)$，

$$\varphi_t(k)=\frac{1}{2}(x_k+tp_k)^{\mathrm{T}}A(x_k+tp_k)-b^{\mathrm{T}}(x_k+tp_k)$$

$$\varphi_k'(t)=tp_k^TAp_k+p_k^T(Ax_k-b)$$

- 令 $\varphi_k'(t)=0$ ，有

$$t=-\frac{p_k^{\mathrm{T}}(Ax_k-b)}{p_k^{\mathrm{T}}Ap_k}$$

$\varphi''(t)>0$， $\varphi(t)$ 为极小。

记 $r_k=Ax_k-b$，那么 $t=\alpha_k=-\dfrac{r_k^Tp_k}{p_k^{\mathrm{T}}Ap_k}$

共轭梯度法(CG)完整算法

- 给定初始近似 x_0 ，取

$$p_0 = -r_0 = b - Ax_0$$

- 对 $k = 0,1,\cdots$, 计算

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

$$r_{k+1} = Ax_{k+1} - b = r_k + \alpha_k A p_k,$$

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

条件预优算法(PCG)

- $r_0 = Ax_0 - b,\ z_0 = Q^{-1}r_0,\ p_0 = -z_0$

对于$k = 0,1,2,\cdots$

$$\alpha_k = \frac{r_k^T z_k}{p_k^T A p_k}$$

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k$$

$$r_{k+1} = r_k + \alpha_k A p_k$$

$$z_{k+1} = Q^{-1} r_{k+1}$$

$$\beta_k = \frac{r_{k+1}^{\mathrm{T}} z_{k+1}}{r_k^{\mathrm{T}} z_k}$$

$$p_{k+1} = -z_{k+1} + \beta_k p_k$$

块共轭梯度法(Block CG)

- 待求解的线性方程组为

$$AX = B$$

- 其中A为n阶对称正定矩阵，

$B = [b_1, b_2, \ldots, b_m]$为$n \times m$矩阵，

$X = [x_1, x_2, \ldots, x_m]$为待求的$n \times m$矩阵，其中

$$m \ll n$$

- 定义二次泛函

$$\varphi(X) = trace\left[(X - X_*)^{\mathrm{T}} A (X - X_*)\right]$$

进行与CG类似的推导，有

- $R_0 = B - AX_0$, $P_0 = R_0$

对于$k = 0,1,2,\cdots$，

$$\alpha_k = \left(P_k^{\mathrm{T}} A P_k\right)^{-1} R_k^T R_k$$

$$X_{k+1} = X_k + P_k \alpha_k$$

$$R_{k+1} = R_k - AP_k \alpha_k$$

$$\beta_k = \left(R_k^{\mathrm{T}} R_k\right)^{-1} R_{k+1}^{\mathrm{T}} R_{k+1}$$

$$P_{k+1} = R_{k+1} + P_k \beta_k$$

Block PCG

$$R_0 = B - AX_0, \hat{X}_0 = X_0, Z_0 = 0, Z_1 = R_0 v_1$$

$$Z_1^T M Z_1 = I. \rho_0 = 0, \rho_1 = Z_1 MAMZ_1, \bar{L}_{1,1} = \rho_1, V_1 = I_{2b\times 2b}$$

对于 $k = 0, 1, 2, \cdots$ ：

1. 形成$\tilde{Z}_{k+1}$ ：

$$\tilde{Z}_{k+1} = AMZ_k - Z_k \rho_k - Z_{k-1} v_k^{-\mathrm{T}}$$

$$Z_{k+1} = \tilde{Z}_{k+1} v_{k+1}$$

其中

$$Z_{k+1}^{\mathrm{T}} M Z_{k+1} = I$$

2. 计算AMZ_{k+1} 和 $\rho_{k+1}=Z_{k+1}^{\mathrm{T}}MAMZ_{k+1}$
3. 计算L新块的系数$\left[L_{k+1,k-1},\bar{L}_{k+1,k}\right]=\left[0,v_{k+1}^{-1}\right]V_k^{\mathrm{T}}$
4. 计算QR分解$\left[\bar{L}_{k,k},v_{k+1}^{-\mathrm{T}}\right]V_{k+1}^{\mathrm{T}}=\left[L_{k,k},0\right]$
5. 计算L新块的系数$\left[L_{k+1,k},\bar{L}_{k+1,k+1}\right]=\left[\bar{L}_{k+1,k},\rho_{k+1}\right]V_{k+1}^{\mathrm{T}}$
6. 计算 $\left[W_k,\bar{W}_k\right]=\left[\bar{W}_k,MZ_{k+1}\right]V_{k+1}^{T}$
7. 从$L_{k,k}\psi_k=-\left(L_{k,k-2}\psi_{k-2}+L_{k,k-1}\psi_{k-1}\right)$中计算 ψ_k
8. 计算新解 $\hat{X}_k=\hat{X}_{k-1}+W_k\psi_k$

- 结束时计算 $\bar{\psi}_{k+1}$ 和 X_{k+1}

$$\bar{L}_{k+1,k+1}\bar{\psi}_{k+1} = -\left(L_{k+1,k-1}\psi_{k-1} + L_{k+1,k}\psi_{k}\right)$$

$$X_{k+1} = \hat{X}_{k} + \bar{W}_{k+1}\bar{\psi}_{k+1}$$

- 块大小可变的Block CG 法
- 利用Block CG 法求解单个右端向量的方程组
- 适合并行计算的Variable Block PCG 法（VBPCG）