DOI:10. 19431/j. cnki. 1673-0062. 2023. 05. 012

求解最小二乘问题的带动量的 Gauss-Seidel 方法

尹素素,欧阳自根*

(南华大学 数理学院,湖南 衡阳 421001)

摘　要:最小二乘问题是重要的数学与统计模型,广泛用于回归分析、参数估计、最优控制和数据拟合等领域。基于古典的 Gauss-Seidel 方法,推导了求解最小二乘问题的迭代格式。结合 Gauss-Seidel 方法和 Polyak's Heavy-Ball 技术,提出了动量型 Gauss-Seidel 方法的算法框架。根据贪婪的策略选择指标,建立了贪婪的动量型 Gauss-Seidel 方法的线性收敛性。最后,数值实验表明贪婪的动量型 Gauss-Seidel 方法在迭代步数和计算时间方面均优于贪婪的 Gauss-Seidel 方法。

关键词:最小二乘问题;Gauss-Seidel 方法;动量

中图分类号:O241.6　**文献标志码**:A

文章编号:1673-0062(2023)05-0081-07

Gauss-Seidel Method with Momentum for Solving Least-Squares Problems

YIN Susu, OUYANG Zigen*

(School of Mathmatics and Physics, University of South China, Hengyang, Hunan 421001, China)

Abstract:The least-squares problem is an important mathematical and statistical model, which is widely used in regression analysis, parameter estimation, optimal control and data fitting. Based on the classical Gauss-Seidel method, the iterative scheme for solving the least-squares problem is deduced. Combining Gauss-Seidel method and Polyak's Heavy-Ball technique, an algorithm framework of Gauss-Seidel method with momentum is proposed. The linear convergence of the greedy Gauss-Seidel method with momentum is established by selecting the column index according to the greedy strategy. Finally, numerical experiments show that the greedy Gauss-Seidel method with momentum outperforms the greedy Gauss-Seidel method in terms of iteration steps and computation time.

key words:least squares problem;Gauss-Seidel method;momentum

收稿日期:2023-06-27

基金项目:湖南省自然科学基金项目(2019JJ40240)

作者简介:尹素素(1997—),女,硕士研究生,主要从事数值线性代数及其应用方面的研究。E-mail:yinsusu3072@163. com。*通信作者:欧阳自根(1965—),男,教授,博士,主要从事微分方程及动力学系统方面的研究。E-mail:zigenouyang@163. com

0 引　言

给定线性最小二乘问题

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} \|\boldsymbol{Ax}-\boldsymbol{b}\|_2^2, \tag{1}$$

其中 $\boldsymbol{A}=(\boldsymbol{A}_1,\boldsymbol{A}_2,\cdots,\boldsymbol{A}_n)$ 是 $m\times n$ 阶的列满秩矩阵,$\boldsymbol{b}$ 是 n 维列向量。最小二乘问题(1)与其正规方程 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}$ 是同解的,其极小范数最小二乘解为 $\boldsymbol{x}_*=\boldsymbol{A}^{\dagger}\boldsymbol{b}=(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A})^{-1}\boldsymbol{A}b$,其中 $\boldsymbol{A}^{\dagger}$ 是 $\boldsymbol{A}$ 的广义逆[1]。

最小二乘问题是重要的数学与统计模型,广泛用于回归分析、参数估计、最优控制和数据拟合等领域。随着大数据的发展,最小二乘问题是大规模的,如果运用直接方法求解此类问题,运算量和储存量都巨大,而迭代法由于运算速度快、储存量少等优势广受到人们的欢迎。Gauss-Seidel 方法是求解最小二乘问题的一类重要方法,对于 Gauss-Seidel 方法的已经有很深入的研究[2-5]。在 2010 年,受 T. Strohmer 和 R. Vershynin[6]的工作启发,D. Leventhal 和 A. S. Lewis[7]提出了随机的 Gauss-Seidel 方法。最近,随机的 Gauss-Seidel 方法进一步推广或拓展[8-17]。Heavy-Ball 技术是 B. T. Polyak 在 1964 年首次提出的[18],它是梯度型方法中经典的加速技术[19]。本文结合 Gauss-Seidel 方法和 Heavy-Ball 技术,构造了带动量的 Gauss-Seidel 方法(命名为 mG-S)。根据贪婪规则选择指标 i,建立了贪婪的 mG-S 方法的线性收敛性。数值实验进一步表明贪婪的 mG-S 方法求解大型最小二乘问题(1)时比贪婪的 G-S 方法收敛得更快,且更有效。

以下是本文中常用的符号列表。

$\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}},\boldsymbol{A}^{\dagger}$:矩阵 A 的转置和广义逆;

$\boldsymbol{e}_i$:n 维标准基向量,第 i 个分量处为 1,其余分量为 0;

$\boldsymbol{A}_i$:矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的第 i 列;

$\sigma_{\min}(\boldsymbol{A})$:矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的最小非零奇异值;

$\|\cdot\|_2$:Euclidean 范数;

$\|\cdot\|_{\mathrm{F}}$:Frobenius 范数;

$\|\boldsymbol{x}\|_{A^{\mathrm{T}}A}^2=\|\boldsymbol{Ax}\|_2^2$:加权范数;

$\boldsymbol{x}^{(k)}$:第 k 次迭代产生的向量。

1 Gauss-Seidel 方法

将 Gauss-Seidel 方法的迭代格式应用到正规方程 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}$ 上可以得到 Gauss-Seidel 方法求解最小二乘问题(1)的迭代格式如下:

$$\boldsymbol{x}_i^{(k+1)}=\frac{\boldsymbol{A}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}}{\boldsymbol{A}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_i}-\frac{\sum_{j=1}^{i-1}\boldsymbol{A}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_j\boldsymbol{x}_j^{(k+1)}}{\boldsymbol{A}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_i}-\frac{\sum_{j=i+1}^{n}\boldsymbol{A}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_j\boldsymbol{x}_j^{(k)}}{\boldsymbol{A}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_i}, \tag{2}$$

其中指标 i 的选取有很多方式,常见的有如下两种:

随机规则[7]:$P(\mathrm{index}=i)=\dfrac{\|\boldsymbol{A}_i\|_2^2}{\|\boldsymbol{A}\|_{\mathrm{F}}^2}$。

贪婪规则[9]:

$$i=\arg\max_{j\in\{1,2,\cdots,n\}}\left\{\frac{|A_j^T(b-Ax^{(k)})|^2}{\|A_j\|_2^2}\right\}。\tag{3}$$

在很多情况下,它比简单迭代法收敛快,它和简单迭代法的不同点在于计算 $\boldsymbol{x}_i^{(k+1)}$ 时,利用了刚刚迭代出的 $\boldsymbol{x}_1^{(k+1)},\boldsymbol{x}_2^{(k+1)},\cdots,\boldsymbol{x}_{i-1}^{(k+1)}$。由于系数矩阵 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}$ 是对称正定的,所以 Gauss-Seidel 方法必收敛。

从当前迭代 $\boldsymbol{x}^{(k)}$ 到下一步迭代 $\boldsymbol{x}^{(k+1)}$ 只改变了第 i 个分量的值,因此

$$\boldsymbol{x}_j^{(k+1)}=\boldsymbol{x}_j^{(k)},j=1,\cdots,i-1,i+1,\cdots,n。$$

进一步

$$\begin{aligned}&\sum_{j=1}^{i-1}\boldsymbol{A}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_j\boldsymbol{x}_j^{(k+1)}+\sum_{j=i+1}^{n}\boldsymbol{A}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_j\boldsymbol{x}_j^{(k)}=\\&\sum_{j=1}^{i-1}\boldsymbol{A}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_j(\boldsymbol{x}_j^{(k+1)}-\boldsymbol{x}_j^{(k)})+\\&\sum_{j=1}^{n}\boldsymbol{A}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_j\boldsymbol{x}_j^{(k)}-(\boldsymbol{A}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_i)\boldsymbol{x}_i^{(k)}=\\&\boldsymbol{A}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Ax}^{(k)}-(\boldsymbol{A}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_i)\boldsymbol{x}_i^{(k)}。\end{aligned}$$

因此迭代格式(2)化简为

$$\boldsymbol{x}_i^{(k+1)}=\frac{\boldsymbol{A}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}-\boldsymbol{A}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Ax}^{(k)}+(\boldsymbol{A}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_i)\boldsymbol{x}_i^{(k)}}{A_i^{\mathrm{T}}A_i}=\boldsymbol{x}_i^{(k)}+\frac{\boldsymbol{A}_i^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{b}-\boldsymbol{Ax}^{(k)})}{\|\boldsymbol{A}_i\|_2^2}。\tag{4}$$

本节利用优化理论和 Kaczmarz 的有关理论,分别解释了 Gauss-Seidel 方法求解最小二乘问题的迭代原理。

1.1　利用优化理论

最小二乘问题可以看成是无约束优化的最小值问题,即 $\min_{x\in\mathbb{R}^n}f(x)$,其中 $f(x)=\|\boldsymbol{Ax}-\boldsymbol{b}\|_2^2$。在第 k 步迭代,可以给定一个坐标分量 e_i 作为精确的搜索方向,求解优化问题(1),可以得到下一步迭代

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)}=\boldsymbol{x}^{(k)}+\alpha_k\boldsymbol{e}_i,$$

其中 $\boldsymbol{e}_i$ 是搜索方向($\mathbb{R}^n$ 中的标准基向量,即第 i 个分量为 1,其余分量为 0),α_k 是搜索步长。步长 α_k 的选择使得 $f(\boldsymbol{x}^{(k)}+\alpha_k\boldsymbol{e}_i)$ 达到最小值,即 $\min\limits_{\alpha\in\mathbb{R}} f(\boldsymbol{x}^{(k)}+\alpha_k\boldsymbol{e}_i)$。

因此

$$\frac{\partial f(\boldsymbol{x}^{(k)}+\alpha_k e_i)}{\partial\alpha}=2\boldsymbol{e}_i^{\mathrm{T}}[\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}^{(k)}+\alpha_k\boldsymbol{e}_i)-\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}b]=0,$$

解得

$$\alpha_k=\frac{\boldsymbol{e}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}-\boldsymbol{e}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^{(k)}}{\boldsymbol{e}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{e}_i}=\frac{\boldsymbol{A}_i^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{b}-\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^{(k)})}{\|\boldsymbol{A}_i\|_2^2}。$$

从而

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)}=\boldsymbol{x}^{(k)}+\frac{\boldsymbol{A}_i^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{b}-\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^{(k)})}{\|\boldsymbol{A}_i\|_2^2}\boldsymbol{e}_i,\tag{5}$$

由标准基向量的性质 $\boldsymbol{e}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{e}_i=1$ 可得 Gauss-Seidel 方法的迭代格式(4)。

1.2　利用 Kaczmarz 算法

Kaczmarz 算法是求解线性系统 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{y}=\boldsymbol{b}$ 的一类重要方法[19-21]其第 k 步迭代格式为

$$\boldsymbol{y}^{(k+1)}=\boldsymbol{y}^{(k)}+\frac{\boldsymbol{b}_i-\boldsymbol{A}^{(i)}\boldsymbol{y}^{(k)}}{\|\boldsymbol{A}^{(i)}\|_2^2}(\boldsymbol{A}^{(i)})^{\mathrm{T}}。$$

对于最小二乘问题的正规方程 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}$,令 $\boldsymbol{r}=\boldsymbol{b}-\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$,正规方程变为 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}r=0$。将 Kaczmarz 迭代格式应用到上述方程,可以得到

$$\boldsymbol{r}^{(k+1)}=\boldsymbol{r}^{(k)}-\frac{\boldsymbol{A}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{r}^{(k)}}{\|\boldsymbol{A}_i\|_2^2}\boldsymbol{A}_i。$$

由于 $\boldsymbol{r}^{(k)}=\boldsymbol{b}-\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^{(k)}$,且 $\boldsymbol{A}_i=\boldsymbol{A}\boldsymbol{e}_i$。所以

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^{(k+1)}=\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^{(k)}+\frac{\boldsymbol{A}_i^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{b}-\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^{(k)})}{\|\boldsymbol{A}_i\|_2^2}\boldsymbol{A}\boldsymbol{e}_i,$$

即

$$\boldsymbol{A}\left(\boldsymbol{x}^{(k+1)}-\boldsymbol{x}^{(k)}-\frac{\boldsymbol{A}_i^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{b}-\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^{(k)})}{\|\boldsymbol{A}_i\|_2^2}\boldsymbol{e}_i\right)=0,$$

由于 $\boldsymbol{A}$ 是列满秩的,所以齐次线性方程组 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{z}=0$ 只有零解,从而

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)}-\boldsymbol{x}^{(k)}-\frac{\boldsymbol{A}_i^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{b}-\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^{(k)})}{\|\boldsymbol{A}_i\|_2^2}\boldsymbol{e}_i=0。$$

显然,得到了与式(5)相同的表达式。

2　带动量贪婪的 Gauss-Seidel 方法

本节结合 Gauss-Seidel 方法和 Heavy-Ball 得到如下迭代:

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)}=\boldsymbol{x}^{(k)}+\alpha_k\frac{\boldsymbol{A}_i^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{b}-\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^{(k)})}{\|\boldsymbol{A}_i\|_2^2}\boldsymbol{e}_i+\beta_k(\boldsymbol{x}^{(k)}-\boldsymbol{x}^{(k-1)})。\tag{6}$$

当 $\alpha_k=1,\beta_k=0$,迭代格式(6)退化为式(5)。动量型 Gauss-Seidel 方法的算法框架如下:

算法 1:带动量的 Gauss-Seidel 方法(mG-S)。

输入:$\boldsymbol{A},\boldsymbol{b},\alpha_k,\beta_k$,和 N,选择初始值 $\boldsymbol{x}^{(0)}=\boldsymbol{x}^{(1)}$;

输出:$\boldsymbol{x}^{(N)}$。

for $k=1,2,\cdots,N$ do

　根据某一规则选择指标 $i\in\{1,2,\cdots,n\}$;

计算迭代格式

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)}=\boldsymbol{x}^{(k)}+\alpha_k\frac{\boldsymbol{A}_i^{\mathrm{T}}(b-\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^{(k)})}{\|\boldsymbol{A}_i\|_2^2}\boldsymbol{e}_i+\beta_k(\boldsymbol{x}^{(k)}-\boldsymbol{x}^{(k-1)});$$

endfor

根据贪婪规则(3)选择指标 $i\in\{1,2,\cdots,n\}$,算法 1 为贪婪的带动量的 Gauss-Seidel。下面给出贪婪的 mG-S 方法的全局线性收敛性理论。

定理 1　假设 $0<\alpha_k<2,\beta_k>0$。令

$$\gamma_1:=1+3\beta_k+2\beta_k^2-\alpha_k(2-\alpha_k+\beta_k)\frac{\sigma_{\min}^2(A)}{\|\boldsymbol{A}\|_F^2},$$

$$\gamma_2:=\beta_k+2\beta_k^2+\alpha_k\beta_k,$$

且满足 $\gamma_1+\gamma_2<1$。则算法 1 生成的迭代序列 $\{\boldsymbol{x}^{(k)}\}_{k=0}^{\infty}$ 收敛到最小二乘解 $\boldsymbol{x}_*=\boldsymbol{A}^{\dagger}\boldsymbol{b}$。此外,取 $\delta=\dfrac{-\gamma_1+\sqrt{\gamma_1^2+4\gamma_2}}{2}$,序列 $\{\boldsymbol{x}^{(k)}\}_{k=0}^{\infty}$ 满足

$$\|x^{(k+1)}-x_*\|_{A^{\mathrm{T}}A}^2\leqslant\rho^k(1+\delta)\|x^{(0)}-x_*\|_{A^{\mathrm{T}}A}^2,$$

其中 $0\leqslant\rho=\delta+\gamma_1<1$。

证明:令 $z_k=\boldsymbol{x}^{(k)}-\boldsymbol{x}_*$,使用算法 1 中的符号可以得到

$$z_{k+1}=(\boldsymbol{x}^{(k)}-\boldsymbol{x}_*)-\alpha_k\frac{\boldsymbol{A}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}^{(k)}-\boldsymbol{x}_*)}{\|\boldsymbol{A}_i\|_2^2}\boldsymbol{e}_i+\beta_k(\boldsymbol{x}^{(k-1)}-\boldsymbol{x}^{(k)})=z_k-\alpha_k\frac{\boldsymbol{A}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}z_k}{\|\boldsymbol{A}_i\|_2^2}\boldsymbol{e}_i+\beta_k(\boldsymbol{x}^{(k)}-\boldsymbol{x}^{(k-1)})。$$

则

$$\|z_{k+1}\|_{A^{\mathrm{T}}A}^2=\left\|z_k-\alpha_k\frac{\boldsymbol{A}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}z_k}{\|\boldsymbol{A}_i\|_2^2}\boldsymbol{e}_i+\beta_k(\boldsymbol{x}^{(k)}-\boldsymbol{x}^{(k-1)})\right\|_{A^{\mathrm{T}}A}^2=\left\|\boldsymbol{A}z_k-\alpha_k\frac{\boldsymbol{A}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}z_k}{\|\boldsymbol{A}_i\|_2^2}\boldsymbol{A}_i+\beta_k\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}^{(k)}-\boldsymbol{x}^{(k-1)})\right\|_2^2=\|(\boldsymbol{I}-\alpha_k\boldsymbol{P}_i)\boldsymbol{A}z_k+\beta_k\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}^{(k)}-\boldsymbol{x}^{(k-1)})\|_2^2,\tag{7}$$

其中 $\boldsymbol{P}_i=\dfrac{\boldsymbol{A}_i\boldsymbol{A}_i^{\mathrm{T}}}{\|\boldsymbol{A}_i\|_2^2}$是正交投影。将式(7)展开得到

$$\begin{aligned}\|\boldsymbol{z}_{k+1}\|_{\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}}^2 = &\|(\boldsymbol{I}-\alpha_k\boldsymbol{P}_i)\boldsymbol{A}\boldsymbol{z}_k\|_2^2+\\ &\beta_k^2\|\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}^{(k)}-\boldsymbol{x}^{(k-1)})\|_2^2+\\ &2\beta_k\langle\boldsymbol{A}\boldsymbol{z}_k,\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}^{(k)}-\boldsymbol{x}^{(k-1)})\rangle-\\ &2\alpha_k\beta_k\langle\boldsymbol{P}_i\boldsymbol{A}\boldsymbol{z}_k,\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}^{(k)}-\boldsymbol{x}^{(k-1)})\rangle。\end{aligned}\tag{8}$$

将式(8)的第一项化简为

$$\begin{aligned}\|(\boldsymbol{I}-\alpha_k\boldsymbol{P}_i)\boldsymbol{A}\boldsymbol{z}_k\|_2^2 = &\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{z}_k\|_2^2-\\ &\alpha_k(2-\alpha_k)\|\boldsymbol{P}_i\boldsymbol{A}\boldsymbol{z}_k\|_2^2。\end{aligned}\tag{9}$$

将式(8)的第二项化简为

$$\begin{aligned}\|\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}^{(k)}-\boldsymbol{x}^{(k-1)})\|_2^2=&\|\boldsymbol{A}(\boldsymbol{z}_k-\boldsymbol{z}_{k-1})\|_2^2\leqslant\\ &(\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{z}_k\|_2+\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{z}_{k-1}\|_2)^2\leqslant\\ &2\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{z}_k\|_2^2+2\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{z}_{k-1}\|_2^2。\end{aligned}\tag{10}$$

将式(8)的第三项化简为

$$\begin{aligned}&2\langle\boldsymbol{A}\boldsymbol{z}_k,\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}_k-\boldsymbol{x}_{k-1})\rangle=\\ &\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{z}_k\|_2^2-\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{z}_{k-1}\|_2^2+\|\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}_k-\boldsymbol{x}_{k-1})\|_2^2\leqslant\\ &3\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{z}_k\|_2^2+\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{z}_{k-1}\|_2^2,\end{aligned}\tag{11}$$

其中第一个不等式用的是平行四边形恒等式

$$2\langle\boldsymbol{u},\boldsymbol{v}\rangle=\|\boldsymbol{u}\|_2^2-\|\boldsymbol{u}-\boldsymbol{v}\|_2^2+\|\boldsymbol{v}\|_2^2。$$

将式(8)的第四项化简为

$$\begin{aligned}&2\langle\boldsymbol{P}_i\boldsymbol{A}\boldsymbol{z}_k,\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}^{(k)}-\boldsymbol{x}^{(k-1)})\rangle=\\ &\frac{2}{\|\boldsymbol{A}_i\|_2^2}\langle\boldsymbol{A}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{z}_k,\boldsymbol{A}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}^{(k)}-\boldsymbol{x}^{(k-1)})\rangle=\\ &\frac{1}{\|\boldsymbol{A}_i\|_2^2}(|\boldsymbol{A}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{z}_k|^2+|\boldsymbol{A}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}^{(k)}-\boldsymbol{x}^{(k-1)})|^2-\\ &|\boldsymbol{A}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{z}|^2)\geqslant\frac{|\boldsymbol{A}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{z}_k|^2}{\|\boldsymbol{A}_i\|_2^2}-\frac{|\boldsymbol{A}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{z}_{k-1}|^2}{\|\boldsymbol{A}_i\|_2^2}。\end{aligned}\tag{12}$$

根据贪婪规则(3)选择的指标 i 使下面式子成立:

$$\begin{aligned}\|\boldsymbol{P}_i\boldsymbol{A}\boldsymbol{z}_k\|_2^2=&\frac{|\boldsymbol{A}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{z}_k|^2}{\|\boldsymbol{A}_i\|_2^2}\geqslant\sum_{i=1}^{m}\frac{|\boldsymbol{A}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{z}_k|^2}{\|\boldsymbol{A}_i\|_2^2}\frac{\|\boldsymbol{A}_i\|_2^2}{\|\boldsymbol{A}\|_F^2}=\\ &\frac{\|\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{z}_k\|_2^2}{\|\boldsymbol{A}\|_F^2}\geqslant\frac{\sigma_{\min}^2(\boldsymbol{A})}{\|\boldsymbol{A}\|_F^2}\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{z}_k\|_2^2,\end{aligned}\tag{13}$$

且

$$\begin{aligned}&\frac{|\boldsymbol{A}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{z}_{k-1}|^2}{\|\boldsymbol{A}_i\|_2^2}\leqslant\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{z}_{k-1}\|_2^2,\\ &\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{z}_k\|_2^2=\|\boldsymbol{z}_k\|_{\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}}^2。\end{aligned}\tag{14}$$

将式(9)~(14)带入式(8)得到

$$\begin{aligned}\|\boldsymbol{z}_{k+1}\|_{\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}}^2\leqslant&\Big(1+3\beta_k+2\beta_k^2-\\ &\alpha_k(2-\alpha_k+\beta_k)\frac{\sigma_{\min}^2(\boldsymbol{A})}{\|\boldsymbol{A}\|_F^2}\Big)\|\boldsymbol{z}_k\|_{\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}}^2+\\ &(\beta_k+2\beta_k^2+\alpha_k\beta_k)\|\boldsymbol{z}_{k-1}\|_{\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}}^2=\\ &\gamma_1\|\boldsymbol{z}_k\|_{\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}}^2+\gamma_2\|\boldsymbol{z}_{k-1}\|_{\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}}^2。\end{aligned}\tag{15}$$

因为参数 δ 满足以下关系:

$$\delta\geqslant0,\gamma_2=\delta(\delta+\gamma_1)。$$

从式(15)得到以下式子:

$$\begin{aligned}\|\boldsymbol{z}_{k+1}\|_{\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}}^2+\delta\|\boldsymbol{z}_k\|_{\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}}^2\leqslant&(\delta+\gamma_1)\|\boldsymbol{z}_k\|_{\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}}^2+\\ &\delta(\delta+\gamma_1)\|\boldsymbol{z}_{k-1}\|_{\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}}^2=\\ &\rho(\|\boldsymbol{z}_k\|_{\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}}^2+\delta\|\boldsymbol{z}_{k-1}\|_{\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}}^2)。\end{aligned}$$

通过递归上式得到

$$\begin{aligned}\|\boldsymbol{z}_{k+1}\|_{\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}}^2+\delta\|\boldsymbol{z}_k\|_{\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}}^2\leqslant&\rho^k(\|\boldsymbol{z}_1\|_{\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}}^2+\\ &\delta\|\boldsymbol{z}_0\|_{\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}}^2)=\\ &\rho^k(1+\delta)\|\boldsymbol{z}_0\|_{\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}}^2。\end{aligned}$$

接下来,证明 $\rho<1$。使用假设 $\gamma_1+\gamma_2<1$ 和 $\gamma_2>0$ 有

$$\begin{aligned}\rho=\delta+\gamma_1=&\frac{\gamma_1+\sqrt{\gamma_1^2+4\gamma_2}}{2}<\\ &\frac{\gamma_1+\sqrt{\gamma_1^2+4(1-\gamma_1)}}{2}=1。\end{aligned}$$

进一步,序列满足关系

$$\begin{aligned}\|\boldsymbol{z}_{k+1}\|_{\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}}^2\leqslant&\|\boldsymbol{z}_{k+1}\|_{\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}}^2+\delta\|\boldsymbol{z}_k\|_{\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}}^2\leqslant\\ &\rho^k(1+\delta)\|\boldsymbol{z}_0\|_{\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}}^2。\end{aligned}$$

因此 $\lim\limits_{k\to+\infty}\|\boldsymbol{z}_{k+1}\|_{\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}}^2=0$,由于 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}$ 是正定矩阵,这意味着当 $k\to\infty$ 时,序列 $\boldsymbol{x}^{(k)}$ 收敛于 $\boldsymbol{x}_*$。

3　数值实验

本节通过数值实验来比较贪婪的 G-S(greedy Gauss-Seidel,gG-S)方法和贪婪的 mG-S(greedy Gauss-Seidel method with momentum,gmG-S)方法求解大规模最小二乘问题(1)的有效性。为了构造一个最小二乘问题,设 $\boldsymbol{b}=\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}+\boldsymbol{r}$,其中 $\boldsymbol{x}$ 是一个向量,用 MATLAB 函数 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{randn}(n,1)$ 生成的,残差 $\boldsymbol{r}$ 在矩阵 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$ 的零空间里面,其中 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$ 的零空间是利用 MATLAB 函数 null($\boldsymbol{A}'$)生成的。测试矩阵为由 MATLAB 函数 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{randn}(m,n)$ 生成的高斯矩阵或从 Florida 稀疏矩阵集[22] 选择的实矩阵。在贪婪的 mG-S 方法中,参数 $\alpha_k=1,\beta_k=\left(\dfrac{\sigma_{\max}(\boldsymbol{A})-\sigma_{\min}(\boldsymbol{A})}{\sigma_{\max}(\boldsymbol{A})+\sigma_{\min}(\boldsymbol{A})}\right)^2$。迭代步数(IT)和计算时间(CPU)是 50 次独立重复实验所需迭代步数和 CPU 时间的平均数。贪婪的 G-S 方法相对贪婪的 mG-S 方法的加速度定义为:

$$\text{speed-up}=\frac{\text{gG-S 的 CPU 时间}}{\text{gmG-S 的 CPU 时间}}。$$

所有实验都是用个人电脑计算机上的 MATLAB(R2017b)实现。所有的计算都是从初始向量 $\boldsymbol{x}^{(0)}=\boldsymbol{zeros}(n,1)$ 开始的,一旦解的相对误差(relative error,RE)小于 10^{-6},迭代终止,其中相对误差定义为:

$$\mathrm{RE}=\frac{\|\boldsymbol{x}^{(k)}-\boldsymbol{x}_*\|_2^2}{\|\boldsymbol{x}_*\|_2^2}。$$

对于随机生成的矩阵,将 gG-S 和 gmG-S 方法的迭代步数(IT)和计算时间(CPU)列在表 1 ~ 表 3 中。从 Florida 稀疏矩阵集[22] 选择 4 个具有代表性的系数矩阵,其矩阵性质见表 4,相应数值结果也列在表 4 中。从这些表中,可以看到 gmG-S 方法在迭代次数和计算时间方面优于 gG-S 方法,并有显著的加速。

表 1　对于稠密矩阵,当 m=2 000 时,gG-S 和 gmG-S 的实验结果

Table 1　Results of gG-S and gmG-S methods for dense matrices with m=2 000

n		100	200	300	400	500
gG-S	IT	254.8	642.9	1 181.0	1 905.5	2 864.3
	CPU	1.3×10^{-3}	3.0×10^{-3}	5.9×10^{-3}	1.1×10^{-2}	2.2×10^{-2}
gmG-S	IT	237.8	551.6	925.7	1 359.3	1 875.4
	CPU	1.3×10^{-3}	2.9×10^{-3}	5.4×10^{-3}	1.0×10^{-2}	1.8×10^{-2}
speed-up		1.012	1.049	1.083	1.130	1.260

表 2　对于稠密矩阵,当 m=5 000 时,gG-S 和 gmG-S 的实验结果

Table 2　Results of gG-S and gmG-S methods for dense matrices with m=5 000

n		100	200	300	400	500
gG-S	IT	208.6	480.0	800.6	1 175.6	1 599.0
	CPU	1.2×10^{-3}	3.7×10^{-3}	6.5×10^{-3}	9.5×10^{-3}	1.4×10^{-2}
gmG-S	IT	205.6	455.9	740.5	1 048.0	1 380.1
	CPU	1.1×10^{-3}	3.3×10^{-3}	6.1×10^{-3}	9.0×10^{-3}	1.4×10^{-2}
speed-up		1.062	1.107	1.063	1.051	1.039

表 3　对于稠密矩阵,当 m=5 000 时,gG-S 和 gmG-S 的实验结果

Table 3　Results of gG-S and gmG-S methods for dense matrices with m=5 000

n		600	700	800	900	1 000
gG-S	IT	2 088.2	2 639.6	3 247.1	3 946.3	4 775.1
	CPU	1.5×10^{-2}	2.5×10^{-2}	3.3×10^{-2}	4.3×10^{-2}	5.0×10^{-2}
gmG-S	IT	1 731.2	2 108.0	2 518.3	2 941.5	3 407.0
	CPU	1.5×10^{-2}	2.4×10^{-2}	2.8×10^{-2}	3.5×10^{-2}	4.3×10^{-2}
speed-up		1.008	1.048	1.201	1.240	1.161

图 1 绘制了贪婪的 G-S 和贪婪的 mG-S 方法的以 10 为基数的对数相对误差(RE)与 IT(每组的左边)和 CPU 时间(每组的右边)的曲线。从图 1 可以看到贪婪的 G-S 方法所需的 IT 大约是贪婪的 mG-S 方法的 1.5 倍。更好的是,贪婪的 mG-S 方法比贪婪的 G-S 方法快 1 到 2 倍。

总之,从数值结果可以看出,对于稠密和 Florida 稀疏线性最小二乘法,贪婪的 mG-S 方法不仅比贪婪的 G-S 方法需要更少的 IT,而且贪婪的 mG-S 方法比婪的 G-S 方法需要更少的 CPU 时间。

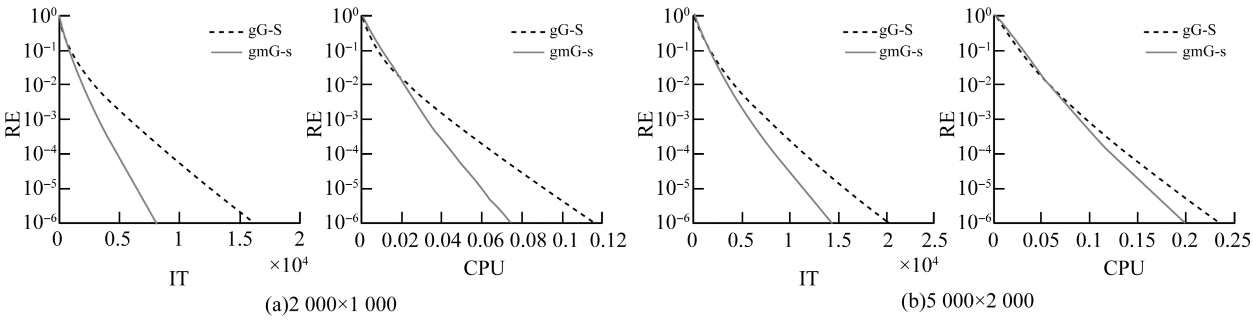

图 1 gG-S 和 gmG-S 方法的 RE vs IT 和 CPU

Fig. 1 RE vs IT and CPU times of gG-S and gmG-S methods

表 4 稀疏矩阵,gG-S 和 gmG-S 的实验结果

Table 4 Results of gG-S and gmG-S methods for Florida sparse matrices

名称		ash958	bibd_14_7	divorce	df2177
m		958	91	50	630
n		292	3 432	9	10 358
密度		0.68%	23.08%	50.00%	0.34%
条件数		3.2	8.12	19.39	2.01
gG-S	IT	935.9	801.6	418.1	1 599.0
	CPU	4.8×10^{-3}	3.1×10^{-3}	1.2×10^{-3}	1.2×10^{-2}
gmG-S	IT	831.0	347.7	234.2	1 547.0
	CPU	4.4×10^{-3}	1.7×10^{-3}	9.1×10^{-4}	1.0×10^{-2}
speed-up		1.089	1.821	1.366	1.202

4 结 论

本文提出了求解大规模最小二乘问题的带动量的 Gauss-Seidel 方法,并结合指标选择的贪婪规则证明研究了贪婪的 mG-S 方法的收敛性。通过数值实验表明,贪婪的 mG-S 方法求解最小二乘问题在迭代步数和 CPU 时间上都优于贪婪的 G-S 方法。

参考文献:

[1] 王国荣. 矩阵与算子广义逆[M]. 北京:科学出版社,1994:1-6.

[2] 赵丹. 雅可比迭代法与高斯-塞德尔迭代法研究[J]. 兴义民族师范学院学报,2012(2):108-112.

[3] HUANG Y H. The convergence analysis for the preconditioned Gauss-Seidel iterative method[J]. Journal of xichang college(natural science edition),2011,25(1):15-17.

[4] 李庆扬,王能超,易大义. 数值分析[M]. 5 版. 武汉:华中科技大学出版社,2018:205-207.

[5] 李庆扬,王能超,易大义. 数值分析[M]. 5 版. 北京:清华大学出版社,2008:188-190.

[6] STROHMER T,VERSHYNIN R. A randomized Kaczmarz algorithm with exponential convergence[J]. Journal of fourier analysis and applications,2009,15(2):262-278.

[7] LEVENTHAL D,LEWIS A S. Randomized methods for linear constraints:Convergence rates and conditioning[J]. Mathematics of operations research,2010,35(3):641-654.

[8] GOWER R M,RICHTÁRIK P. Randomized iterative methods for linear systems[J]. SIAM journal on matrix analysis and applications,2015,36(4):1660-1690.

[9] NUTINI J,SCHMIDT M,LARADJI I H,et al. Coordinate descent converges faster with the Gauss-Southwell rule than random selection[J]. International journal of technology management,2015,43(1):1632-1641.

[10] HEFNY A,NEEDELL D,RAMDAS A. Rows versus columns:Randomized Kaczmarz or Gauss-Seidel for ridge regression[J]. SIAM journal on scientific computing,2017,39(5):S528-S542.

[11] MA A,NEEDELL D,RAMDAS A. Convergence properties of the randomized extended Gauss-Seidel and Kaczmarz methods[J]. SIAM journal on matrix analysis and applications,2015,36(4):1590-1604.

[12] LIU Y,JIANG X L,GU C Q. On maximum residual block and two-step Gauss-Seidel algorithms for linear least-squares problems[J]. Calcolo,2021,58(2):13.

[13] DU K,SUN X H. A doubly stochastic block Gauss-Seidel algorithm for solving linear equations[J]. Applied mathematics and computation,2021,408(1):126373.

[14] RAZAVIYAYN M,HONG M Y,REYHANIAN N,et al. A linearly convergent doubly stochastic Gauss-Seidel algorithm for solving linear equations and a certain class of over-parameterized optimization problems[J]. Mathematical programming,2019,176(1):465-496.

(下转第 96 页)

3 结　论

通过过硫酸铵浸渍重铀酸铵的改性处理,可有效提升 UO_3 的表面酸性,显著提高其催化乙醇脱水制乙烯的性能。NH_3-TPD-MS 测定表面酸性的实验结果表明,$S_2O_8^{2-}$ 的引入能将 UO_3 的表面酸位密度提升 11 倍;经 550 ℃焙烧制得的固体酸,在 275 ℃、乙醇重时空速为 1.63 h^{-1} 的反应条件下,乙醇的转化率及乙烯收率均可达 100%。本研究对拓宽贫铀的应用领域,实现其高价值利用及醇脱水制乙烯的高效催化有重要意义。

参考文献:

[1] PHUNG T K,BUSCA G. Diethyl ether cracking and ethanol dehydration:Acid catalysis and reaction paths[J]. Chemical engineering journal,2015,272:92-101.

[2] CHEN Y,WU Y L,TAO L,et al. Dehydration reaction of bio-ethanol to ethylene over modified SAPO catalysts [J]. Journal of industrial and engineering chemistry, 2010,16(5):717-722.

[3] FROSI M,TRIPODI A,CONTE F,et al. Ethylene from renewable ethanol:Process optimization and economic feasibility assessment[J]. Journal of industrial and engineering chemistry,2021,104:272-285.

[4] MISHRA H K,DALAI A K,DAS D D,et al. Sulfated nanozirconia:An investigation on acid-base properties and n-butane isomerization activity[J]. Journal of colloid and interface science,2004,272(2):378-383.

[5] URZHUNTSEV G A,OVCHINNIKOVA E V,CHUMACHENKO V A,et al. Isomerization of n-butane over Pd-SO_4/ZrO_2 catalyst:Prospects for commercial application [J]. Chemical engineering journal,2014,238:148-156.

[6] LIU Y,WU G Q,PANG X Y,et al. Isobutane alkylation with 2-butene in novel ionic liquid/solid acid catalysts [J]. Fuel,2019,252:316-324.

[7] AHMED I,KHAN N A,MISHRA D K,et al. Liquid-phase dehydration of sorbitol to isosorbide using sulfated titania as a solid acid catalyst[J]. Chemical engineering science,2013,93:91-95.

[8] WANG J,WANG A,TIAN X,et al. Development of palygorskite-SO_4^{2-}/$ZnAl_2O_4$ composites as a novel solid acid catalyst for the esterification of acetic acid with n-butanol [J]. Applied clay science,2017,135:596-602.

[9] SPANO T L,SHIELDS A E,BARTH B,et al. Computationally guided investigation of the optical spectra of pure β-UO_3[J]. Inorganic chemistry,2020,59(16):11481-11492.

[10] DONG Y Y,LIAO W P,SUO Z H. Uranium oxide-supported gold catalyst for water-gas shift reaction[J]. Fuel processing technology,2015,137:164-169.

[11] SCHREINEMACHERS C,LEINDERS G,MODOLO G, et al. The conversion of ammonium uranate prepared via sol-gel synthesis into uranium oxides[J]. Nuclear engineering and technology,2020,52(5):1013-1021.

[12] BERTEAU P,DELMON B. Modified aluminas:Relationship between activity in 1-butanol dehydration and acidity measured by NH_3 TPD[J]. Catalysis today, 1989, 5 (2):121-137.

[13] 陆翠云,张叶龙,韩毓旺,等. Mo/HZSM-5 催化乙醇脱水制乙烯[J]. 石油化工,2011,40(12):1281-1286.

(上接第 86 页)

[15] EDALATPOUR V,HEZARI D,SALKUYEH D K. A generalization of the Gauss-Seidel iteration method for solving absolute value equations[J]. Computational and applied mathematics,2017,293(1):156-167.

[16] CHEN L,SUN D F,TOH K C. An efficient inexact symmetric Gauss-Seidel based majorized ADMM for high-dimensional convex composite conic programming[J]. Mathematical programming,2017,161(1):237-270.

[17] DU K. Tight upper bounds for the convergence of the randomized extended Kaczmarz and Gauss-Seidel algorithms[J]. Numerical linear algebra with applications, 2019,26(3):2233.

[18] POLYAK B T. Some methods of speeding up the convergence of iteration methods[J]. USSR computational mathematics and mathematical physics, 1964, 4 (5): 1-17.

[19] LOIZOU N,RICHTÁRIK P. Momentum and stochastic momentum for stochastic gradient,Newton,proximal point and subspace descent methods[J]. Computational optimization and applications,2020,77(3):653-710.

[20] KACZMARZ S. Angenäherte auflösung von systemen linearer gleichungen[J]. Bulletin international de l'académie polonaise des sciences et des lettres,1937,35(1):355-357.

[21] VAN LITH B,HANSEN P C,HOCHSTENBACH M E. A twin error gauge for Kaczmarz's iterations[J]. SIAM journal on scientific computing,2021,43(5):S173-S199.

[22] DAVIS T A,HU Y F. The university of florida sparse matrix collection[J]. ACM transactions on mathematical software,2011,38(1):1-25.