

求解大型稀疏线性方程组的贪婪距离随机

Kaczmarz 方法

杜亦疏¹, 殷俊锋¹, 张科²

(1. 同济大学 数学科学学院, 上海 200092; 2. 上海海事大学 文理学院, 上海 201306)

摘要: 基于一种从系数矩阵中选取工作行的新概率准则提出一类求解大型稀疏线性方程组的贪婪距离随机 Kaczmarz 方法. 理论表明该方法收敛到相容线性方程组的最小范数解, 而且该方法的理论收敛因子小于经典随机 Kaczmarz 方法的收敛因子. 数值实验表明该方法比传统的随机 Kaczmarz 方法收敛更快.

关键词: Kaczmarz 方法; 稀疏线性方程组; 收敛性; 随机迭代
中图分类号: O241.6 **文献标志码:** A

Greedy Randomized-Distance Kaczmarz Method for Solving Large Sparse Linear Systems

DU Yishu¹, YIN Junfeng¹, ZHANG Ke²

(1. School of Mathematical Sciences, Tongji University, Shanghai 200092, China; 2. College of Arts and Sciences, Shanghai Maritime University, Shanghai 201306, China)

Abstract: Based on a new probability criterion to select the working rows from the coefficient matrix, a greedy-distance randomized Kaczmarz method was proposed to solve large sparse linear systems. The theoretical analysis demonstrates that this method converges to the least-norm solution when the linear system is consistent, and the convergence factor of the greedy-distance randomized Kaczmarz method is smaller than that of the randomized Kaczmarz method. Moreover, the numerical results have verified its effectiveness.

Key words: Kaczmarz method; sparse linear systems; convergence property; randomized iteration

考虑求解具有如下形式的大规模稀疏线性方程组

$$Ax = b \quad (1)$$

其中系数矩阵 $A \in \mathbf{R}^{m \times n}$ 可为满秩或秩亏矩阵, 且 $b \in \mathbf{R}^m$. 当线性方程组(1)不相容时, 通常考虑求其最小二乘解

$$x_{LS} := \arg \min_x \|b - Ax\|_2$$

当线性方程组(1)相容时, 通常考虑求其最小欧氏范数解

$$x_{LN} := \arg \min_x \|x\|_2, \text{ s.t. } Ax = b \quad (2)$$

问题(2)等价于求解等价的正规方程组

$$x = A^T u \quad \text{s.t.} \quad AA^T u = b \quad (3)$$

为了求解大型稀疏线性方程组(1), 许多经典的迭代方法陆续被提出来并加以深入研究, 例如, Kaczmarz 迭代方法^[1]、超松弛迭代方法(SOR)^[2-3]、共轭梯度法(CG)^[4]、广义极小残量法(GMRES)^[5]和稳定化的双共轭梯度法(BiCGSTAB)^[6]等. 关于这些迭代法理论及其应用的综述, 参见文献[7-13].

自从 20 世纪 30 年代波兰数学家 Stefan Kaczmarz 提出 Kaczmarz 方法后, 该方法迅速得到数值计算专家和学者的广泛关注, 其迭代方法的各种变体和收敛理论获得了大量的研究和发展^[14-15]. 由于该方法是一种具有代表性的行处理迭代方法, 其行投影方法很容易在计算机上实现和并行计算, 因此被广泛应用在分布式计算、电子计算机断层扫描、数字信号处理、人工智能和图像恢复等科学与工程计算领域^[16-20].

Strohmer 和 Vershynin^[21]在 2009 年首次提出采用随机的思想来选取工作行, 并证明了这种随机

收稿日期: 2020-02-17

基金项目: 国家自然科学基金面上项目(11971354); 国家自然科学基金(11601323)

第一作者: 杜亦疏(1995—), 男, 博士生, 主要研究方向为数值分析与科学计算. E-mail: duyishu@tongji.edu.cn

通信作者: 殷俊锋(1979—), 男, 教授, 博士生导师, 理学博士, 主要研究方向为数值分析与科学计算.

E-mail: yinjf@tongji.edu.cn



论文
拓展
介绍

Kaczmarz方法具有线性收敛速率,这再度使得Kaczmarz方法成为数值代数领域的一个研究热点. Bai等^[22]结合贪婪和随机的数学思想,提出了一种新的且更加有效的概率准则来选取工作行,即贪婪随机Kaczmarz方法.此后,松弛贪婪随机Kaczmarz方法^[23]和部分随机拓展的Kaczmarz方法^[24]也被陆续提出并加以深入研究. Popa^[25]总结了各类Kaczmarz方法的收敛速率.更多的随机Kaczmarz方法及其理论可以参见文献[26].另一方面, Bai等^[27]利用同样的数学思想,提出了一类贪婪随机坐标下降方法,用以求解列满秩超定线性代数方程组的最小二乘问题,可以证明新方法较原有的随机坐标下降方法^[28]具有更快的收敛速率.

在研究中发现,提高随机Kaczmarz方法收敛速率的重点在于能否提出一类从系数矩阵中选取工作行的有效概率准则.在原始的Kaczmarz方法中,工作行被循环选取,然后将当前点投影到工作行所形成的超平面上.在文献[29]中,贪婪Kaczmarz方法的工作行选取办法被分为两类,第一类是选取上一次迭代后各残差分量中模长最大的行作为本次迭代的工作行,第二类是选取当前迭代解离系数矩阵各行所形成的超平面的距离最大的行作为本次迭代的工作行.受该思想启发,笔者提出一类基于距离的贪婪随机Kaczmarz方法(GDRK).

1 贪婪距离随机Kaczmarz方法

在原始的Kaczmarz方法中,工作行被循环选取,然后将当前点投影到工作行所形成的超平面上,更具体地说,如果定义 $A^{(i)}$ 代表系数矩阵 A 的第 i 行, $b^{(i)}$ 代表向量 b 的第 i 个分量,初始向量为 x_0 ,则Kaczmarz方法如算法1所示.

算法1^[1] Kaczmarz方法. ①置 $k:=0$. 计算 $i_k=(k \bmod m)+1$. ②计算 $x_{k+1}=x_k+\frac{b^{(i_k)}-A^{(i_k)}x_k}{\|A^{(i_k)}\|_2}(A^{(i_k)})^T$. ③置 $k=k+1$,转步骤①. 其中, $(\cdot)^T$ 代表矩阵或向量的转置.在Kaczmarz方法中,通过按顺序选取工作行,然后将当前点 x_k 正交投影到超平面 $A^{(i_k)}x_k=b^{(i_k)}$ 上.

在文献[14]中, Ansorge首次采用贪婪的思想来选取工作行,即选取上一次迭代后各残差分量中模长最大的行作为本次迭代的工作行,提出贪婪残差Kaczmarz方法,并将Cimmino方法与Kaczmarz

方法的联系做了详尽的分析,具体过程见算法2.

算法2^[14] 贪婪残差Kaczmarz方法. ①置 $k:=0$. 计算 $i_k=\arg \max_i |b^{(i)}-A^{(i)}x_k|^2$. ②计算 $x_{k+1}=x_k+\frac{b^{(i_k)}-A^{(i_k)}x_k}{\|A^{(i_k)}\|_2}(A^{(i_k)})^T$. ③置 $k=k+1$,转步骤①.

Nutini等^[29]采用另一类贪婪选取工作行的办法,即选取当前迭代解离系数矩阵各行所形成的超平面的距离最大的行作为本次迭代的工作行,提出贪婪距离Kaczmarz方法.论文分析收敛性并尝试利用正交图提出快速的随机Kaczmarz方法,具体过程见算法3.

算法3^[29] 贪婪距离Kaczmarz方法. ①置 $k:=0$. 计算 $i_k=\arg \max_i \frac{|b^{(i)}-A^{(i)}x_k|}{\|A^{(i)}\|_2}$. ②计算 $x_{k+1}=x_k+\frac{b^{(i_k)}-A^{(i_k)}x_k}{\|A^{(i_k)}\|_2}(A^{(i_k)})^T$. ③置 $k=k+1$,转步骤①.

在文献[21]中, Strohmer和Vershynin将各行2-范数与 $\|A\|_F$ 比值的平方作为概率,然后根据此概率随机选取本次迭代的工作行,提出随机Kaczmarz方法,具体过程见算法4.

算法4^[21] 随机Kaczmarz方法. ①置 $k:=0$. 根据概率 $\Pr(\text{row}=i_k)=\frac{\|A^{(i_k)}\|_2^2}{\|A\|_F^2}$ 选取指标 $i_k \in \{1, 2, \dots, m\}$. ②计算 $x_{k+1}=x_k+\frac{b^{(i_k)}-A^{(i_k)}x_k}{\|A^{(i_k)}\|_2}(A^{(i_k)})^T$. ③置 $k=k+1$,转步骤①.

在算法4中, $\Pr(\cdot)$ 代表选取系数矩阵第 i_k 行作为本次迭代工作行的概率.

关于随机Kaczmarz方法,有如下的收敛性定理.

定理1^[21-22] 线性方程组(1)相容,其中系数矩阵 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ 且右端项 $b \in \mathbb{R}^m$.初始向量 $x_0 \in \mathbb{R}^n$ 在 A^T 的列空间中,则通过随机Kaczmarz方法生成的迭代序列 $\{x_k\}_{k=0}^\infty$ 在期望上收敛到其最小范数解 $x_* = A^\dagger b$,且迭代解序列 $\{x_k\}_{k=0}^\infty$ 的误差的数学期望满足

$$\mathbb{E}\|x_k - x_\star\|_2^2 \leq \left(1 - \frac{\lambda_{\min}(\mathbf{A}^T \mathbf{A})}{\|\mathbf{A}\|_F^2}\right)^k \|x_0 - x_\star\|_2^2$$

Bai等^[22]提出了一种新的概率准则,即先选取当前点 x_k 离系数矩阵各行所形成的超平面的距离较大的行所对应的指标 i_k ,将其放入集合 U 中,然后定义集合 U 中每行被选取的概率为各残差分量模长的平方除以残差欧式范数的平方,具体过程见算法5.

算法5^[22] 贪婪随机Kaczmarz方法. ①置 $k:=0$.

计算 $\epsilon_k = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\|b - \mathbf{A}x_k\|_2^2} \max_{1 \leq i_k \leq m} \left\{ \frac{|b^{(i_k)} - \mathbf{A}^{(i_k)}x_k|^2}{\|\mathbf{A}^{(i_k)}\|_2^2} \right\} + \frac{1}{\|\mathbf{A}\|_F^2} \right)$. ②定义正整数指标集 $U_k = \{i_k | |b^{(i_k)} - \mathbf{A}^{(i_k)}x_k|^2 \geq \epsilon_k \|b - \mathbf{A}x_k\|_2^2 \|\mathbf{A}^{(i_k)}\|_2^2\}$.

③计算 $\tilde{r}_k^{(i)}$ 的第 i 个分量 $\tilde{r}_k^{(i)} = \begin{cases} b^{(i)} - \mathbf{A}^{(i)}x_k, & i \in U_k, \\ 0, & i \notin U_k. \end{cases}$ ④根据概率

$\Pr(\text{row} = i_k) = \frac{|\tilde{r}_k^{(i_k)}|^2}{\|\tilde{r}_k\|_2^2}$ 选取指标 $i_k \in U_k$. ⑤计算

$x_{k+1} = x_k + \frac{b^{(i_k)} - \mathbf{A}^{(i_k)}x_k}{\|\mathbf{A}^{(i_k)}\|_2^2} (\mathbf{A}^{(i_k)})^T$. ⑥置 $k = k + 1$, 转步骤①.

关于贪婪随机Kaczmarz方法,有如下的收敛性定理.

定理2^[22] 若线性方程组(1)相容,其中系数矩阵 $\mathbf{A} \in \mathbf{R}^{m \times n}$ 且右端项 $b \in \mathbf{R}^m$.初始向量 $x_0 \in \mathbf{R}^n$ 在 \mathbf{A}^T 的列空间中,则通过贪婪随机Kaczmarz方法生成的迭代序列 $\{x_k\}_{k=0}^\infty$ 在期望上收敛到其最小范数解 $x_\star = \mathbf{A}^\dagger b$,且迭代解序列 $\{x_k\}_{k=0}^\infty$ 的误差的数学期望满足

$$\mathbb{E}\|x_1 - x_\star\|_2^2 \leq \left[1 - \frac{\lambda_{\min}(\mathbf{A}^T \mathbf{A})}{\|\mathbf{A}\|_F^2}\right] \|x_0 - x_\star\|_2^2, \quad k=0$$

和

$$\mathbb{E}_k \|x_{k+1} - x_\star\|_2^2 \leq \left[1 - \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\gamma} \|\mathbf{A}\|_F^2 + 1\right) \times \frac{\lambda_{\min}(\mathbf{A}^T \mathbf{A})}{\|\mathbf{A}\|_F^2}\right] \|x_k - x_\star\|_2^2, \quad k=1, 2, \dots$$

其中 $\gamma = \max_{1 \leq i \leq m} \sum_{j=1, j \neq i}^m \|\mathbf{A}^{(j)}\|_2^2$. 更一般地有

$$\mathbb{E}\|x_k - x_\star\|_2^2 \leq \left[1 - \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\gamma} \|\mathbf{A}\|_F^2 + 1\right) \frac{\lambda_{\min}(\mathbf{A}^T \mathbf{A})}{\|\mathbf{A}\|_F^2}\right]^{k-1} \times \left[1 - \frac{\lambda_{\min}(\mathbf{A}^T \mathbf{A})}{\|\mathbf{A}\|_F^2}\right] \|x_0 - x_\star\|_2^2$$

注意到,在算法5的第②步,将满足不等式

$$\frac{|b^{(i_k)} - \mathbf{A}^{(i_k)}x_k|^2}{\|\mathbf{A}^{(i_k)}\|_2^2} \geq \epsilon_k \|b - \mathbf{A}x_k\|_2^2$$

的指标 i_k 放入集合 U_k 中.事实上 $d_k^{(i_k)} = \frac{|b^{(i_k)} - \mathbf{A}^{(i_k)}x_k|}{\|\mathbf{A}^{(i_k)}\|_2}$ 表示当前点 x_k 到

系数矩阵第 i_k 行所形成的超平面的距离,即集合 U_k 中包含了当前点 x_k 到各个超平面具有较大距离的指标 i_k .

在算法5中,希望指标集 U_k 中对应较大距离 $d_k^{(i_k)}$ 的指标 i_k 可以以较大概率被取到.然而在算法5的第④步,选取指标 i_k 的概率定义为正比于各残差分量模长的平方.假设集合中指标 i_k 所对应的行具有较大残量,则它有较大概率被取为工作行;若同时该指标对应的行范数 $\|\mathbf{A}^{(i_k)}\|_2$ 很大,则当前点投影到此工作行所形成的超平面的距离较小,这与算法5第②步中指标集 U_k 的定义相矛盾,此时需要对这2个条件进行平衡.在该想法的启发下,提出基于距离的贪婪随机Kaczmarz方法,具体过程见算法6.

算法6 贪婪距离随机Kaczmarz方法. ①置 $k:=0$. 计算

$$\epsilon_k = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\|b - \mathbf{A}x_k\|_2^2} \max_{1 \leq i_k \leq m} \left\{ \frac{|b^{(i_k)} - \mathbf{A}^{(i_k)}x_k|^2}{\|\mathbf{A}^{(i_k)}\|_2^2} \right\} + \frac{1}{\|\mathbf{A}\|_F^2} \right)$$

②定义正整数指标集

$$U_k = \left\{ i_k \mid \frac{|b^{(i_k)} - \mathbf{A}^{(i_k)}x_k|^2}{\|\mathbf{A}^{(i_k)}\|_2^2} \geq \epsilon_k \|b - \mathbf{A}x_k\|_2^2 \right\}$$

③计算 d_k 的第 i 个分量

$$d_k^{(i)} = \begin{cases} \frac{|b^{(i)} - \mathbf{A}^{(i)}x_k|}{\|\mathbf{A}^{(i)}\|_2}, & i \in U_k \\ 0, & i \notin U_k. \end{cases}$$

④ 根据概率 $\Pr(\text{row} = i_k) = \frac{(d_k^{(i_k)})^2}{\|d_k\|_2^2}$ 选取指标 $i_k \in U_k$. ⑤ 计算 $x_{k+1} = x_k + \frac{b^{(i_k)} - \mathbf{A}^{(i_k)} x_k}{\|\mathbf{A}^{(i_k)}\|_2} (\mathbf{A}^{(i_k)})^\top$. ⑥ 置 $k = k + 1$, 转步骤①.

由于当前点 x_k 到所有系数矩阵行所形成的超平面的最大距离平方满足下式:

$$\begin{aligned} & \max_{1 \leq i_k \leq m} \left(\frac{|b^{(i_k)} - \mathbf{A}^{(i_k)} x_k|^2}{\|\mathbf{A}^{(i_k)}\|_2^2} \right) \geq \\ & \frac{1}{2} \max_{1 \leq i_k \leq m} \left(\frac{|b^{(i_k)} - \mathbf{A}^{(i_k)} x_k|^2}{\|\mathbf{A}^{(i_k)}\|_2^2} \right) + \\ & \frac{1}{2} \sum_{i_k=1}^m \frac{\|\mathbf{A}^{(i_k)}\|_2^2 \cdot |b^{(i_k)} - \mathbf{A}^{(i_k)} x_k|^2}{\|\mathbf{A}\|_F^2 \cdot \|\mathbf{A}^{(i_k)}\|_2^2} = \\ & \frac{1}{2} \max_{1 \leq i_k \leq m} \left(\frac{|b^{(i_k)} - \mathbf{A}^{(i_k)} x_k|^2}{\|\mathbf{A}^{(i_k)}\|_2^2} \right) + \\ & \frac{1}{2} \frac{\|b - \mathbf{A} x_k\|_2^2}{\|\mathbf{A}\|_F^2} = \epsilon_k \|b - \mathbf{A} x_k\|_2^2 \end{aligned}$$

可知算法 6 中步骤②指标集 U_k 非空, 具体参见文献[22].

由于计算残量具有如下递推式:

$$\begin{aligned} r_{k+1} &= b - \mathbf{A} x_{k+1} = \\ & b - \mathbf{A} \left(x_k + \frac{b^{(i_k)} - \mathbf{A}^{(i_k)} x_k}{\|\mathbf{A}^{(i_k)}\|_2} (\mathbf{A}^{(i_k)})^\top \right) = \\ & b - \mathbf{A} x_k - \frac{b^{(i_k)} - \mathbf{A}^{(i_k)} x_k}{\|\mathbf{A}^{(i_k)}\|_2} \mathbf{A} (\mathbf{A}^{(i_k)})^\top = \\ & r_k - \frac{r_k^{(i_k)}}{\|\mathbf{A}^{(i_k)}\|_2} \mathbf{A} (\mathbf{A}^{(i_k)})^\top = r_k - \frac{r_k^{(i_k)}}{\|\mathbf{A}^{(i_k)}\|_2} \mathbf{B}_{(i_k)} \end{aligned}$$

其中 $B = \mathbf{A} \mathbf{A}^\top$ 且 $B_{(i_k)}$ 表示矩阵 B 的第 i_k 列. 也就是说, 如果在迭代之前已知 $\mathbf{A} \mathbf{A}^\top$, 可以进一步提高贪婪距离随机 Kaczmarz 方法的运行效率, 参见文献[22]. 关于采用随机策略近似计算矩阵 $\mathbf{A} \mathbf{A}^\top$, 参见文献[30].

2 贪婪距离随机 Kaczmarz 方法的收敛性分析

首先说明若贪婪距离随机 Kaczmarz 方法收敛, 则其一定可以收敛到最小范数解. 假设 x_* 为满足相容系统 (1) 的最小范数解, 由 (2) 可知, $x_* \triangleq \mathbf{A}^\dagger b \in \mathbb{R}(\mathbf{A}^\top)$, 其中, $\mathbb{R}(\mathbf{A}^\top)$ 表示 \mathbf{A}^\top 列空间. 另一方面, 若初始向量 x_0 在 \mathbf{A}^\top 列空间中, 由算法 6 中步骤⑤可知, 算法 6 生成的迭代序列 $\{x_k\}_{k=0}^\infty$ 一定在 \mathbf{A}^\top 列空间中, 故若算法收敛, 则一定收敛到相容系统 (1) 的最小范数解.

关于贪婪距离随机 Kaczmarz 方法, 有如下的收敛性定理.

定理 3 若线性方程组 (1) 相容, 其中系数矩阵 $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ 且右端项 $b \in \mathbb{R}^m$. 初始向量 $x_0 \in \mathbb{R}^n$ 在 \mathbf{A}^\top 的列空间中, 则通过贪婪随机 Kaczmarz 方法生成的迭代序列 $\{x_k\}_{k=0}^\infty$ 在期望上收敛到其最小范数解 $x_* = \mathbf{A}^\dagger b$, 且迭代解序列 $\{x_k\}_{k=0}^\infty$ 的误差的数学期望满足

$$\begin{aligned} \mathbb{E} \|x_1 - x_*\|_2^2 &\leq \left[1 - \frac{\lambda_{\min}(\mathbf{A}^\top \mathbf{A})}{\|\mathbf{A}\|_F^2} \right] \cdot \\ &\|x_0 - x_*\|_2^2, \quad k=0 \end{aligned}$$

和

$$\begin{aligned} \mathbb{E}_k \|x_{k+1} - x_*\|_2^2 &\leq \\ &\left[1 - \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\gamma} \|\mathbf{A}\|_F^2 + 1 \right) \frac{\lambda_{\min}(\mathbf{A}^\top \mathbf{A})}{\|\mathbf{A}\|_F^2} \right] \cdot \\ &\|x_k - x_*\|_2^2, \quad k=1, 2, \dots \end{aligned}$$

其中 $\gamma = \max_{1 \leq i \leq m} \sum_{j=1, j \neq i}^m \|A^{(j)}\|_2^2$. 更一般地有

$$\begin{aligned} \mathbb{E} \|x_k - x_*\|_2^2 &\leq \\ &\left[1 - \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\gamma} \|\mathbf{A}\|_F^2 + 1 \right) \frac{\lambda_{\min}(\mathbf{A}^\top \mathbf{A})}{\|\mathbf{A}\|_F^2} \right]^{k-1} \cdot \\ &\left(1 - \frac{\lambda_{\min}(\mathbf{A}^\top \mathbf{A})}{\|\mathbf{A}\|_F^2} \right) \|x_0 - x_*\|_2^2 \end{aligned}$$

证明: 由算法 6 步骤⑤, 可得

$$x_{k+1} - x_k = \frac{b^{(i_k)} - \mathbf{A}^{(i_k)} x_k}{\|\mathbf{A}^{(i_k)}\|_2} (\mathbf{A}^{(i_k)})^\top$$

即向量 $x_{k+1} - x_k$ 平行于向量 $(\mathbf{A}^{(i_k)})^\top$. 又由

$$\begin{aligned}
 & A^{(i_k)}(x_{k+1} - x_\star) = \\
 & A^{(i_k)} \left(x_k - x_\star + \frac{(b^{(i_k)} - A^{(i_k)}x_k)}{\|A^{(i_k)}\|_2} (A^{(i_k)})^T \right) = \\
 & A^{(i_k)}(x_k - x_\star) + (b^{(i_k)} - A^{(i_k)}x_k) = \\
 & b^{(i_k)} - A^{(i_k)}x_\star = 0
 \end{aligned}$$

可得向量 $x_{k+1} - x_\star$ 正交于向量 $(A^{(i_k)})^T$, 即正交于向量 $x_{k+1} - x_k$, 故有下式成立

$$\|x_{k+1} - x_\star\|_2^2 = \|x_k - x_\star\|_2^2 - \|x_{k+1} - x_k\|_2^2 \quad (4)$$

对等式(4)两侧取期望, 有

$$\begin{aligned}
 & \mathbb{E}_k \|x_{k+1} - x_\star\|_2^2 = \\
 & \|x_k - x_\star\|_2^2 - \mathbb{E}_k \|x_{k+1} - x_k\|_2^2 = \\
 & \quad \frac{|b^{(i_k)} - A^{(i_k)}x_k|^2}{\|A^{(i_k)}\|_2^2} \\
 & \|x_k - x_\star\|_2^2 - \sum_{i_k \in U_k} \frac{\|A^{(i_k)}\|_2^2}{\sum_{i \in U_k} |b^{(i)} - A^{(i)}x_k|^2} \cdot
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \frac{|A^{(i_k)}(x_k - x_\star)|^2}{\|A^{(i_k)}\|_2^2} \leq \\
 & \|x_k - x_\star\|_2^2 - \epsilon_k \|b - Ax_k\|_2^2 = \\
 & \|x_k - x_\star\|_2^2 - \epsilon_k \|A(x_k - x_\star)\|_2^2 \leq \\
 & (1 - \epsilon_k \lambda_{\min}(A^T A)) \|x_k - x_\star\|_2^2
 \end{aligned}$$

其中, 式(5)最后一个不等式需要用到不等式(6), 即对于在 A^T 列空间中任意 $u \in \mathbb{R}^n$, 有

$$\|Au\|_2^2 \geq \lambda_{\min}(A^T A) \|u\|_2^2 \quad (6)$$

另一方面, 有

$$\begin{aligned}
 & r_k^{(i_{k-1})} = b^{(i_{k-1})} - A^{(i_{k-1})}x_k = \\
 & b^{(i_{k-1})} - A^{(i_{k-1})} \cdot \\
 & \left(x_{k-1} + \frac{(b^{(i_{k-1})} - A^{(i_{k-1})}x_{k-1})}{\|A^{(i_{k-1})}\|_2} (A^{(i_{k-1})})^T \right) = \\
 & b^{(i_{k-1})} - A^{(i_{k-1})}x_{k-1} - b^{(i_{k-1})} + A^{(i_{k-1})}x_{k-1} = 0
 \end{aligned}$$

由算法6中 ϵ_k 定义, 对于 $k=1, 2, \dots$, 有

$$\begin{aligned}
 \epsilon_k &= \frac{1}{2\|A\|_F^2} \left(\frac{\max_{1 \leq i_k \leq m} \left(\frac{|b^{(i_k)} - A^{(i_k)}x_k|^2}{\|A^{(i_k)}\|_2^2} \right)}{\frac{\|b - Ax_k\|_2^2}{\|A\|_F^2}} + 1 \right) = \\
 & \frac{1}{2\|A\|_F^2} \cdot \\
 & \left(\frac{\max_{1 \leq i_k \leq m} \left(\frac{|b^{(i_k)} - A^{(i_k)}x_k|^2}{\|A^{(i_k)}\|_2^2} \right)}{\sum_{i_k=1, i_k \neq i_{k-1}}^m \frac{\|A^{(i_k)}\|_2^2}{\|A\|_F^2} \frac{|b^{(i_k)} - A^{(i_k)}x_k|^2}{\|A^{(i_k)}\|_2^2}} + 1 \right) \geq \\
 & \frac{1}{2\|A\|_F^2} \left(\frac{\|A\|_F^2}{\sum_{i_k=1, i_k \neq i_{k-1}}^m \|A^{(i_k)}\|_2^2} + 1 \right) \geq \\
 & \frac{1}{2\|A\|_F^2} \left(\frac{\|A\|_F^2}{\gamma} + 1 \right)
 \end{aligned} \quad (7)$$

(5) 对于 $k=0$, 有

$$\begin{aligned}
 \epsilon_0 &= \frac{1}{2\|A\|_F^2} \cdot \\
 & \left(\frac{\max_{1 \leq i_0 \leq m} \left(\frac{|b^{(i_0)} - A^{(i_0)}x_0|^2}{\|A^{(i_0)}\|_2^2} \right)}{\sum_{i_0=1}^m \frac{\|A^{(i_0)}\|_2^2}{\|A\|_F^2} \frac{|b^{(i_0)} - A^{(i_0)}x_0|^2}{\|A^{(i_0)}\|_2^2}} + 1 \right) \geq \\
 & \frac{1}{\|A\|_F^2}
 \end{aligned} \quad (8)$$

将不等式(7)和(8)代入不等式(5)中, 通过归纳法, 有

$$\begin{aligned}
 & \mathbb{E} \|x_k - x_\star\|_2^2 \leq \\
 & \left[1 - \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\gamma} \|A\|_F^2 + 1 \right) \frac{\lambda_{\min}(A^T A)}{\|A\|_F^2} \right]^{k-1} \cdot \\
 & \left(1 - \frac{\lambda_{\min}(A^T A)}{\|A\|_F^2} \right) \|x_0 - x_\star\|_2^2
 \end{aligned}$$

记定理1中随机Kaczmarz方法的收敛因子为

$$\rho_{\text{RK}} = \left[1 - \frac{\lambda_{\min}(A^T A)}{\|A\|_F^2} \right]$$

定理 2 中贪婪随机 Kaczmarz 方法的收敛因子为

$$\rho_{\text{GRK}} = \left[1 - \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\gamma} \|A\|_F^2 + 1 \right) \frac{\lambda_{\min}(A^T A)}{\|A\|_F^2} \right]$$

定理 3 中贪婪距离随机 Kaczmarz 方法的收敛因子为

$$\rho_{\text{GDRK}} = \left[1 - \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\gamma} \|A\|_F^2 + 1 \right) \frac{\lambda_{\min}(A^T A)}{\|A\|_F^2} \right]$$

因 $\frac{1}{2} \left(\frac{1}{\gamma} \|A\|_F^2 + 1 \right) > 1$, 故对于这三类随机算法的收敛因子有

$$\rho_{\text{GDRK}} = \rho_{\text{GRK}} < \rho_{\text{RK}}$$

一般而言, 收敛因子越小, 收敛越快. 这里需要特别指出的是, 贪婪距离随机 Kaczmarz 方法和贪婪随机 Kaczmarz 方法在理论上具有相同的收敛因子, 但是对于实际问题, 由于贪婪距离随机 Kaczmarz 方法选取工作行的概率更加符合指标集 U_k 定义, 故实际计算时新方法有可能收敛更快.

在浮点运算量方面, 随机 Kaczmarz 方法每次迭代需要 $4n + 1$ 个浮点运算量. 若残差由递推公式计算, 贪婪随机 Kaczmarz 方法以及贪婪距离随机 Kaczmarz 方法每次迭代需要 $7m + 2n + 2$ 个浮点运算量^[22]. 因此, 当 $m > \frac{2n - 1}{7}$ 时, 贪婪距离随机 Kaczmarz 方法计算量小于随机 Kaczmarz 方法.

3 数值实验

通过数值实验比较随机 Kaczmarz 方法(RK)、贪婪随机 Kaczmarz 方法(GRK)、贪婪距离随机 Kaczmarz 方法(GDRK)的计算效率. 这里, 迭代步数(IT)和计算时间(CPU)取 50 次计算结果的中位数.

表 2 方阵数值结果

Tab. 2 Numerical results of square matrices for Example 1

算法	Trefethen_150		cage5		Trefethen_300		Sandi_authors		Stranke94	
	IT	CPU	IT	CPU	IT	CPU	IT	CPU	IT	CPU
RK	--	--	8 983	0.452 6	--	--	--	--	13 943	0.532 8
GRK	867	0.040 6	406	0.020 7	924	0.049 5	12 906	0.550 1	3 828	0.360 3
GDRK	760.5	0.021 7	223	0.012 3	887	0.033 6	12 756	0.425 8	3 376	0.242 4

从表 2 可以看出, GDRK 与 GRK 方法总能计算出符合精度的解, 而 RK 方法有时在迭代步数达到 20 万步后仍不能计算出符合精度的解. 而且即便

实验中, 通过 MATLAB 函数 `randn` 随机生成解 $x \in \mathbb{R}^n$, 右端项 $b \in \mathbb{R}^m$ 由 A 给出, 通过 MATLAB 函数 `pinv` 计算最小范数解 $x_* = A^\dagger b$. 此外, 需要指出 GRK 方法与 GDRK 方法按照算法 5 和 6 中定义的过程精确执行, 并没有显式地计算矩阵 $B = AA^T$ 来计算残量. 在本节的所有数值实验中, 均取初始向量为 $x_0 = 0$, 停机准则为近似解的相对误差

$$\frac{\|x_k - x_*\|_2^2}{\|x_*\|_2^2} < 10^{-6}$$

或者迭代步数超过 20 万步. 在实验表格中, 若在 20 万步内未达到指定精度, 即用 '—' 表示.

相关信息见表 1~4. 表 1 和表 3 给出了测试矩阵的阶数、稠密度、秩和条件数, 其中稠密度定义为矩阵非零元个数除以矩阵元素个数. 关于 GDRK 方法对于 RK 方法的加速比, 其定义为 RK 方法所需的计算时间除以 GDRK 方法所需的计算时间. 所有测试矩阵都来自于佛罗里达稀疏矩阵集, 见参考文献[31].

例 1. 表 1 列出了测试的方阵的相关信息. 包含满秩矩阵 Trefethen_150、cage5、Trefethen_300、Stranke94 和秩亏矩阵 Sandi_authors. 其中, 矩阵 Trefethen_150、Trefethen_300、Stranke94、Sandi_authors 为对称矩阵, 矩阵 cage5 为非对称矩阵.

表 1 方阵信息

Tab. 1 Information of square matrices for Example 1

矩阵名称	阶数	稠密度/%	秩	条件数
Trefethen_150	150 × 150	9.07	150	769.92
cage5	37 × 37	17.02	37	15.42
Trefethen_300	300 × 300	5.20	300	1 772.69
Sandi_authors	86 × 86	3.35	72	Inf
Stranke94	10 × 10	90.00	10	51.73

对于测试的方阵, 表 2 给出了 RK、GRK、GDRK 三种方法的迭代步数(IT)与计算时间(CPU).

RK 方法收敛, GDRK 与 GRK 方法在迭代步数与计算时间上也均少于 RK 方法. 此外, GDRK 方法进一步优化了 GRK 方法, 其关于 RK 方法迭代时间的

表 3 长方形矩阵信息

Tab. 3 Information of rectangular matrices for Example 2

矩阵名称	阶数	稠密度/%	秩	条件数
WorldCities	315 × 100	23.87	100	66.00
refine	29 × 62	8.51	29	66.67
bibd_13_6	78 × 1 716	19.23	78	6.27
GL7d26	305 × 2 798	0.87	273	Inf
Trec8	23 × 84	28.42	23	26.89

加速比最大可以达到 36.80(矩阵 cage5), 最小可以达到 2.20(矩阵 Stranke94). 因此, 无论对于满秩还是秩亏的方阵, GDRK 方法均收敛, 且其迭代步数与计算时间均优于传统的 RK 方法与 GRK 方法.

表 4 长方形矩阵数值结果

Tab. 4 Numerical results of rectangular matrices for Example 2

算法	WorldCities		refine		bibd_13_6		GL7d26		Trec8	
	IT	CPU	IT	CPU	IT	CPU	IT	CPU	IT	CPU
RK	37 713	1.767 9	31 859	0.732 5	1 794	0.154 2	—	—	14 728	0.494 8
GRK	5 307	0.387 2	435.5	0.019 2	534.5	0.049 6	708.5	0.080 6	1 644	0.070 2
GDRK	4 770	0.269 7	425.5	0.012 8	526.5	0.037 4	691	0.062 4	1 340	0.051 7

从表 4 可以得出和例 1 类似结论, 即 GDRK 与 GRK 方法总能计算出符合精度的解, 而 RK 方法有时在迭代步数达到 20 万步后仍不能计算出符合精

图 1 和图 2 是近似解的相对误差与迭代步数的关系.

图 1 描绘了矩阵 cage5(左)和 Stranke94(右)的近似解的相对误差随着迭代步数变化的曲线, 进一步验证了 GDRK 方法比经典的 RK 方法收敛更快.

例 2. 表 3 列出了测试的长方形矩阵的相关信息. 包含行满秩矩阵 refine、bibd_13_6、Trec8、列满秩矩阵 WorldCities 和秩亏矩阵 GL7d26.

对于测试的长方形矩阵, 表 4 给出了 RK、GRK、GDRK 三种方法的迭代步数(IT)与计算时间(CPU).

度的解. 而且即使 RK 方法收敛, GDRK 与 GRK 方法在迭代步数与计算时间上也均少于 RK 方法. 此外, GDRK 方法进一步优化了 GRK 方法, 其关于

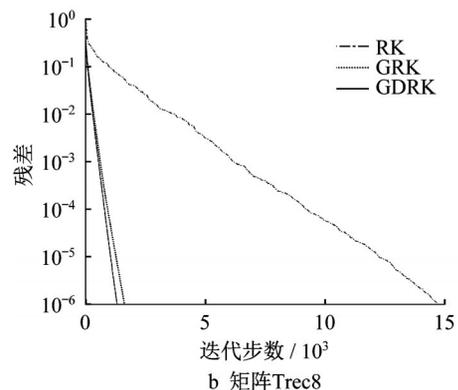
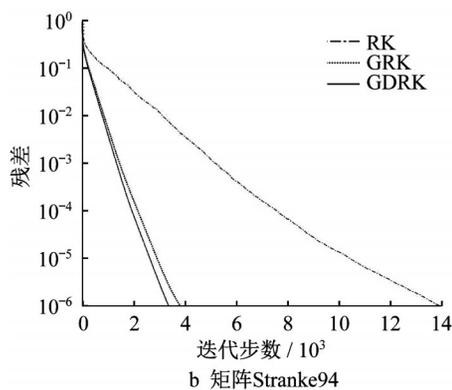
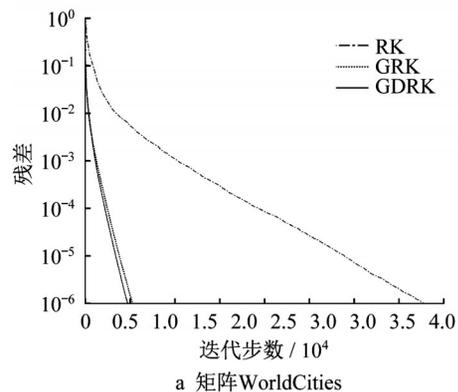
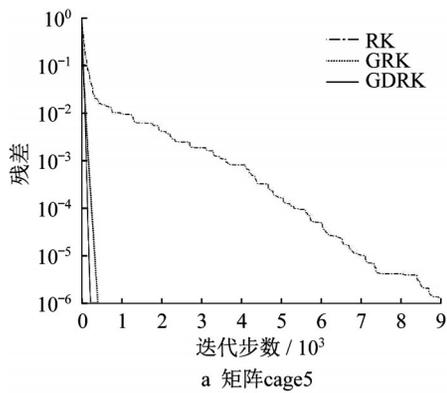


图 1 例 1 近似解的相对误差随着迭代步数的变化曲线

Fig.1 Relative solution error with the change of IT for Example 1

图 2 例 2 近似解的相对误差随着迭代步数变化的曲线

Fig.2 Relative solution error with the change of IT for Example 2

RK方法迭代时间的加速比最大可以达到57.23(矩阵refine),最小可以达到4.12(矩阵bibd_13_6).因此,无论对于满秩或秩亏的长方形矩阵,GDRK方法均收敛,且其迭代步数与计算时间均优于传统的RK方法与GRK方法.

图2描绘了矩阵WorldCities和Trec8的近似解的相对误差随着迭代步数变化的曲线,进一步验证了GDRK方法比经典的RK方法收敛更快.

4 结论

提出一类贪婪距离随机Kaczmarz方法,理论分析证明新方法的收敛性,且收敛因子小于传统的随机Kaczmarz方法的收敛因子.数值实验结果表明所提出的新方法在迭代步数和计算时间上均优于传统的随机Kaczmarz方法以及贪婪随机Kaczmarz方法.贪婪距离随机Kaczmarz方法能够快速求解大规模稀疏相容线性方程组,主要原因在于新方法定义的随机选取工作行的概率更符合指标集合的定义.如何随机选取工作行以加速随机Kaczmarz方法仍然是一个值得研究的问题.

参考文献:

- [1] KACZMARZ S. Angenäherte auflösung von systemen linearer gleichungen [J]. Bulletin International de l'Academie Polonaise des Sciences et des Lettres, 1937, 35: 355.
- [2] FRANKEL S P. Convergence rates of iterative treatments of partial differential equations [J]. Mathematical Tables and Other Aids to Computation, 1950, 4: 65.
- [3] YOUNG D. Iterative methods for solving partial difference equations of elliptic type [J]. Transactions of the American Mathematical Society, 1954, 76: 92.
- [4] HESTENES MR, STIEFEL E. Method of conjugate gradient for solving linear equations [J]. Journal of Research National Bureau of Standards, 1952, 49: 409.
- [5] SAAD Y, SCHULTZ M H. GMRES: A generalized minimal residual algorithm for solving nonsymmetric linear systems [J]. SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing, 1986, 7: 856.
- [6] GUTKNECHT M H. Variants of BICGSTAB for matrices with complex spectrum [J]. SIAM Journal on Scientific Computing, 1993, 14: 1020.
- [7] HAGEMAN L A, YOUNG D M. Applied iterative methods [M]. Mineola: Dover Publications, 2012.
- [8] GALÁNTAI A. Projectors and projection methods [M]. Boston: Kluwer Academic Publishers, 2003.
- [9] BJORCK A. Numerical methods for least squares problems [M]. Philadelphia: SIAM Publisher, 1996.
- [10] SAAD Y. Iterative methods for sparse linear systems [M]. Philadelphia: SIAM Publisher, 2003.
- [11] BAI Z Z, LIU X G. On the Meany inequality with applications to convergence analysis of several row-action iteration methods [J]. Numerische Mathematik, 2013, 124: 215.
- [12] BAI Z Z, ROZLOŽNÍK M. On the numerical behavior of matrix splitting iteration methods for solving linear systems [J]. SIAM Journal on Numerical Analysis, 2015, 53: 1716.
- [13] SAAD Y, VAN Der Vorst H A. Iterative solution of linear systems in the 20th century [J]. Journal of Computational and Applied Mathematics, 2000, 123: 1.
- [14] ANSORGE R. Connections between the Cimmino-method and the Kaczmarz-method for the solution of singular and regular systems of equations [J]. Computing, 1984, 33: 367.
- [15] CENSOR Y. Row-action methods for huge and sparse systems and their applications [J]. SIAM Review, 1981, 23: 444.
- [16] CENSOR Y. Parallel application of block-iterative methods in medical imaging and radiation therapy [J]. Mathematical Programming, 1988, 42: 307.
- [17] EGGERMONT P P B, HERMAN G T, LENT A. Iterative algorithms for large partitioned linear systems, with applications to image reconstruction [J]. Linear Algebra and its Applications, 1981, 40: 37.
- [18] BYRNE C. A unified treatment of some iterative algorithms in signal processing and image reconstruction [J]. Inverse Problems, 2003, 20: 103.
- [19] ELBLE J M, SAHINIDIS N V and VOUZIS P. GPU computing with Kaczmarz's and other iterative algorithms for linear systems [J]. Parallel Computing, 2010, 36: 215.
- [20] PASQUALETTI F, CARLI R, BULLO F. Distributed estimation via iterative projections with application to power network monitoring [J]. Automatica, 2012, 48: 747.
- [21] STROHMER T, VERSHYNIN R. A randomized Kaczmarz algorithm with exponential convergence [J]. Journal of Fourier Analysis and Applications, 2009, 15: 262.
- [22] BAI Z Z, WU W T. On greedy randomized Kaczmarz method for solving large sparse linear systems [J]. SIAM Journal on Scientific Computing, 2018, 40: A592.
- [23] BAI Z Z and WU W T. On relaxed greedy randomized Kaczmarz methods for solving large sparse linear systems [J]. Applied Mathematics Letters, 2018, 83: 21.
- [24] BAI Z Z, WU W T. On partially randomized extended Kaczmarz method for solving large sparse overdetermined inconsistent linear systems [J]. Linear Algebra and its Applications, 2019, 578: 225.