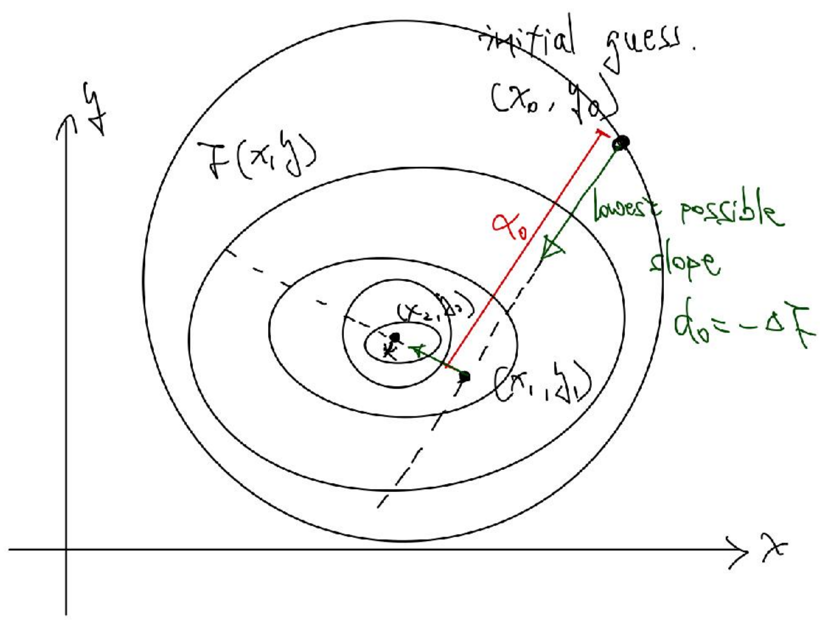
What is Steepest Gradient Method?

Introduction

因為機器學習是當今非常熱門的學習領域，而在機器學習中，通常有個損失函數(cost function 或 loss funthion，對應優化理論中的目標函數)，我們希望損失函數能夠達到最小值，這時候就需要用到梯度下降法來尋找函數最小值的解。

Mathematical Analysis

首先確立問題與目標：假設現在有一個已知函數$F : R^n \longrightarrow R$，我們想知道其最小值的解。假設 F 的等高線圖(Contour Plots)如下，則第一步：先選定第一個點 $\vec{V_0}$，這個點需要盡量選在解的附近，以加快速度。之後，我們需要選出下一步的方向(direction)與下一步的大小(size)。



選擇方向的方面，我們希望下一步的方向能夠使數值下降的最快，也就是說$\vec{V_0}$在這個方向的方向導數最小。因為$F\left(\vec{V_0}\right)$在$\vec{d_0}$方向的方向導數為

$$D_{\vec{d_0}} F\left(\vec{V_0}\right) = \nabla F\left(\vec{V_0}\right) \cdot \vec{d_0}$$

由柯西不等式，我們知道當$\vec{d_0}$與$\nabla F\left(\vec{V_0}\right)$為反方向時，方向導數會有最小值，也就是說

$$\vec{d_0} = \nabla F\left(\vec{V_0}\right)$$

接下來要決定大小。既然已經選出了最陡方向，我們就想選出這個方向上的最小值，以接近最佳解，也就是說要找到$g(\alpha) = F\left(\overrightarrow{V_0} + \alpha\overrightarrow{d_0}\right)$的最小值解。首先將$g(\alpha)$對$\alpha$微分

$$\frac{d}{d\alpha}g(\alpha) = \nabla F\left(\overrightarrow{V_0} + \alpha\overrightarrow{d_0}\right) \cdot \overrightarrow{d_0}$$

，然後用解$\frac{d}{d\alpha}g(\alpha_0) = 0$，我們找到大小囉！

最後就是無止盡的重複上述步驟，使$\overrightarrow{V_{k+1}} = \overrightarrow{V_k} + \alpha_k\overrightarrow{d_k}$，直到$\overrightarrow{V_{k+1}}$和$\overrightarrow{V_k}$之間的距離小於我們設計的容許誤差(error tolerance)。

SDM for Ax=b

假設 A 為正定對稱矩陣，讓$\mathrm{F}: \mathrm{R}^2 \longrightarrow \mathrm{R}$定義成

$$\mathrm{F}(\mathbf{v}) = \frac{1}{2}\mathbf{v}^\mathbf{T}\mathbf{A}\mathbf{v} - \mathbf{b}^\mathbf{T}\mathbf{v}$$

則$\nabla F(v) = \mathrm{Av} - b \equiv -r$

SDM :

$\mathbf{v_{k+1}} = \mathbf{v_k} + \alpha_k\mathbf{d_k}$
$\mathbf{d_k}$: direction
α_k : step size
$\mathbf{d_k} = -\nabla\mathrm{F}(\mathbf{v}) = \mathbf{r_k} = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{v_k}$

Find α_k:

$g(\alpha) = \mathrm{F}(v_k + \alpha\mathbf{d_k})$

$$\begin{aligned}
&\Rightarrow \mathrm{g}'(\alpha) = \nabla F(v_k + \alpha d_k) \cdot d_k \\
&\text{set } \mathrm{g}'(\alpha_k) = 0 \\
&\text{LHS} = \nabla F(v_k + \alpha_k d_k) \cdot d_k \\
&\qquad = \nabla F(v_{k+1}) \cdot d_k \\
&\qquad = -r_{k+1} \cdot d_k \\
&\qquad = (A\mathbf{v_{k+1}} - b) \cdot d_k \\
&\qquad = (A(v_k + \alpha_k d_k) - b) \cdot d_k \\
&\qquad = (A\mathbf{v_k} - b + \alpha_k A d_k) \cdot d_k \\
&\qquad = (-r_k + \alpha_k A d_k) \cdot d_k \\
&\qquad = \text{RHS} = 0 \\
&\Longrightarrow \alpha_k = \frac{r_k \cdot d_k}{Ad_k \cdot d_k} = \frac{r_k \cdot d_k}{q_k \cdot d_k} \text{ , where } q_k = Ad_k = Ar_k
\end{aligned}$$

Algorithm

Pick $\vec{V}_0$

For k$\geq$0

$r_k = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{v_k}$

$q_k = Ar_k$

$\alpha_k = \dfrac{r_k \cdot r_k}{q_k \cdot r_k}$

$\mathbf{v_{k+1}} = \mathbf{v_k} + \alpha_k r_\mathbf{k}$

End

Programming

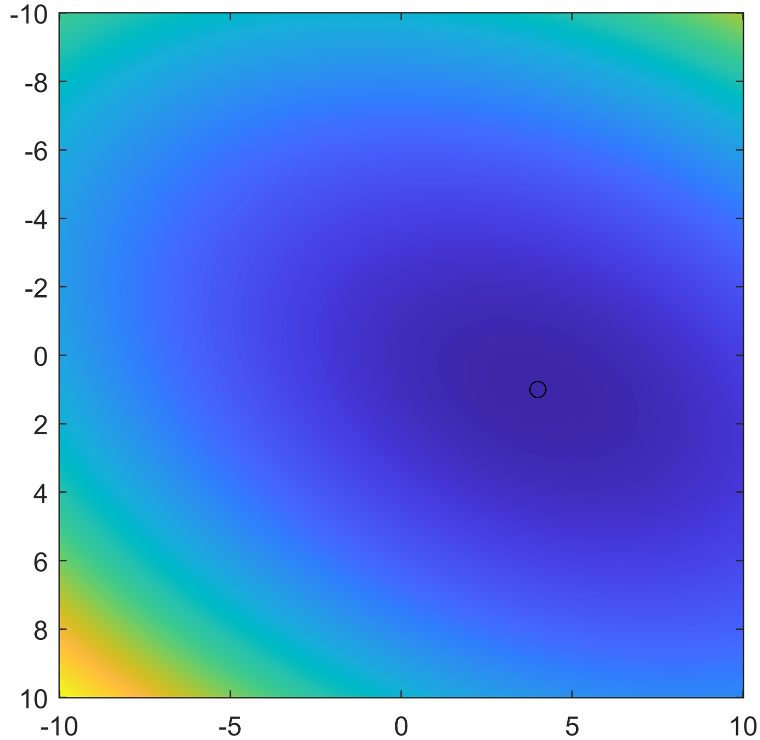
```
% Define A, b
A=[2 -1;-1 4];
b = [7 0]';
% Initial guess
v0 = [-10 -10]';
% The target function
Func = @(x,y) (1/2).*(A(1).*x.^2+(A(2)+A(3)).*x.*y+A(4).*y.^2)-(b(1).*x+b(2).*y);

x = linspace(-10,10,1000);
y = linspace(-10,10,1000);
[Y,X] = meshgrid(y,x);
F = Func(X,Y);

% Perform algorithm
v = inf;
tol = 1e-3;
r = inf;
k = 0;
alpha = inf;
while norm(alpha*r)>tol
    % Visualize
    imagesc(x,y,F');
    axis equal tight;
    hold on;
    plot(v0(1),v0(2),'ok')
    hold off;
    drawnow;
    pause(0.5)

    % Agorithm
    r = b - A*v0;
    q = A*r;
    alpha = dot(r,r)/dot(q,r);
    v0 = v0 + alpha*r;
```

```
    % iteration
    k = k + 1;
end
```



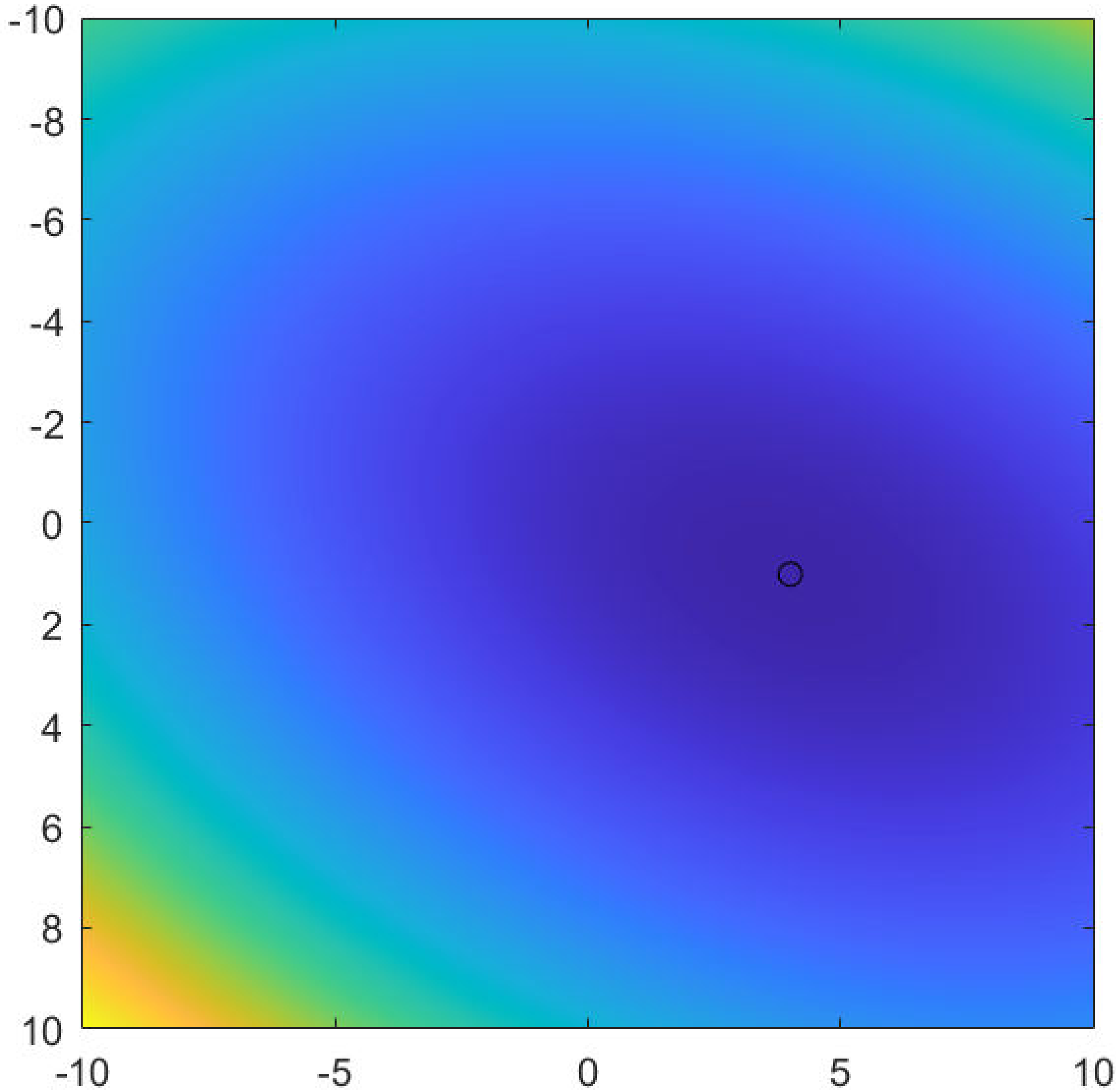

```
% iteration and result
k
```

```
k = 14
```

```
v0
```

```
v0 = 2×1
    3.9997
    0.9998
```

Numerical Results



迭代次數：k = 14

最佳解：v = 2×1

3.9997

0.9998