ЦЕНТРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

Метод сопряжённых градиентов

МЕТОДЫ ВЫПУКЛОЙ ОПТИМИЗАЦИИ

НЕДЕЛЯ 9

Даня Меркулов

Метод сопряженных градиентов

Семинар

Оптимизация для всех! ЦУ

Повторение лекции

Сильно выпуклые квадратичные функции

Рассмотрим следующую квадратичную задачу оптимизации:

$$\min_{x \in \mathbb{R}^d} f(x) = \min_{x \in \mathbb{R}^d} \frac{1}{2} x^\top A x - b^\top x + c, \text{ где } A \in \mathbb{S}^d_{++}.$$

Условия оптимальности:

$$\nabla f(x^*) = Ax^* - b = 0 \iff Ax^* = b$$

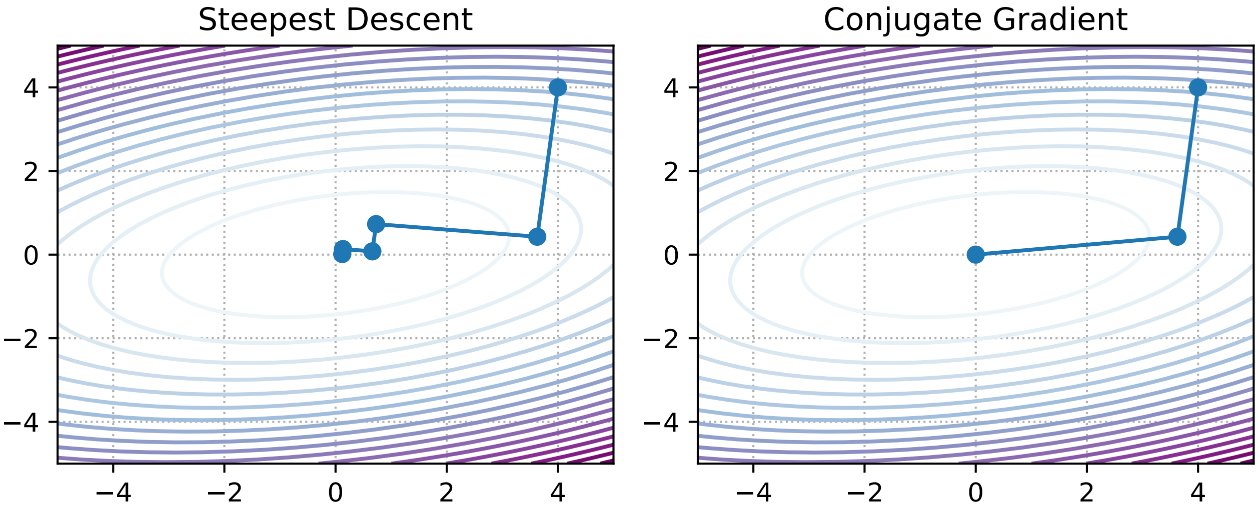
Сильно выпуклые квадратичные функции

Рассмотрим следующую квадратичную задачу оптимизации:

$$\min_{x\in\mathbb{R}^d} f(x) = \min_{x\in\mathbb{R}^d} \frac{1}{2}x^\top Ax - b^\top x + c, \text{ где } A \in \mathbb{S}^d_{++}.$$

Условия оптимальности:

$$\nabla f(x^*) = Ax^* - b = 0 \iff Ax^* = b$$



Обзор метода сопряжённых градиентов для квадратичной задачи

1) **Инициализация.** $k = 0$ и $x_k = x_0$, $d_k = d_0 = -\nabla f(x_0)$.

Обзор метода сопряжённых градиентов для квадратичной задачи

1) **Инициализация.** $k = 0$ и $x_k = x_0$, $d_k = d_0 = -\nabla f(x_0)$.

Обзор метода сопряжённых градиентов для квадратичной задачи

1) **Инициализация.** $k = 0$ и $x_k = x_0$, $d_k = d_0 = -\nabla f(x_0)$.

2) **Оптимальная длина шага.** С помощью процедуры одномерного поиска (*line search*) находим оптимальную длину шага. Это означает вычислить α_k, минимизирующий $f(x_k + \alpha_k d_k)$:

$$\alpha_k = -\frac{d_k^\top (Ax_k - b)}{d_k^\top A d_k}$$

Обзор метода сопряжённых градиентов для квадратичной задачи

1) **Инициализация.** $k = 0$ и $x_k = x_0$, $d_k = d_0 = -\nabla f(x_0)$.

2) **Оптимальная длина шага.** С помощью процедуры одномерного поиска (*line search*) находим оптимальную длину шага. Это означает вычислить α_k, минимизирующий $f(x_k + \alpha_k d_k)$:

$$\alpha_k = -\frac{d_k^\top (A x_k - b)}{d_k^\top A d_k}$$

Обзор метода сопряжённых градиентов для квадратичной задачи

1) **Инициализация.** $k = 0$ и $x_k = x_0$, $d_k = d_0 = -\nabla f(x_0)$.

2) **Оптимальная длина шага.** С помощью процедуры одномерного поиска (*line search*) находим оптимальную длину шага. Это означает вычислить α_k, минимизирующий $f(x_k + \alpha_k d_k)$:

$$\alpha_k = -\frac{d_k^\top (Ax_k - b)}{d_k^\top A d_k}$$

3) **Итерация алгоритма.** Обновляем положение x_k, двигаясь в направлении d_k с длиной шага α_k:

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

Обзор метода сопряжённых градиентов для квадратичной задачи

1) **Инициализация.** $k = 0$ и $x_k = x_0$, $d_k = d_0 = -\nabla f(x_0)$.

2) **Оптимальная длина шага.** С помощью процедуры одномерного поиска (*line search*) находим оптимальную длину шага. Это означает вычислить α_k, минимизирующий $f(x_k + \alpha_k d_k)$:

$$\alpha_k = -\frac{d_k^\top (Ax_k - b)}{d_k^\top A d_k}$$

3) **Итерация алгоритма.** Обновляем положение x_k, двигаясь в направлении d_k с длиной шага α_k:

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

Обзор метода сопряжённых градиентов для квадратичной задачи

1) **Инициализация.** $k = 0$ и $x_k = x_0$, $d_k = d_0 = -\nabla f(x_0)$.

2) **Оптимальная длина шага.** С помощью процедуры одномерного поиска (*line search*) находим оптимальную длину шага. Это означает вычислить α_k, минимизирующий $f(x_k + \alpha_k d_k)$:

$$\alpha_k = -\frac{d_k^\top (Ax_k - b)}{d_k^\top A d_k}$$

3) **Итерация алгоритма.** Обновляем положение x_k, двигаясь в направлении d_k с длиной шага α_k:

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

4) **Обновление направления.** Обновляем $d_{k+1} = -\nabla f(x_{k+1}) + \beta_k d_k$, где β_k вычисляется по формуле:

$$\beta_k = \frac{\nabla f(x_{k+1})^\top A d_k}{d_k^\top A d_k}.$$

Обзор метода сопряжённых градиентов для квадратичной задачи

1) **Инициализация.** $k = 0$ и $x_k = x_0$, $d_k = d_0 = -\nabla f(x_0)$.

2) **Оптимальная длина шага.** С помощью процедуры одномерного поиска (*line search*) находим оптимальную длину шага. Это означает вычислить α_k, минимизирующий $f(x_k + \alpha_k d_k)$:

$$\alpha_k = -\frac{d_k^\top (Ax_k - b)}{d_k^\top A d_k}$$

3) **Итерация алгоритма.** Обновляем положение x_k, двигаясь в направлении d_k с длиной шага α_k:

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

4) **Обновление направления.** Обновляем $d_{k+1} = -\nabla f(x_{k+1}) + \beta_k d_k$, где β_k вычисляется по формуле:

$$\beta_k = \frac{\nabla f(x_{k+1})^\top A d_k}{d_k^\top A d_k}.$$

Обзор метода сопряжённых градиентов для квадратичной задачи

1) **Инициализация.** $k = 0$ и $x_k = x_0$, $d_k = d_0 = -\nabla f(x_0)$.

2) **Оптимальная длина шага.** С помощью процедуры одномерного поиска (*line search*) находим оптимальную длину шага. Это означает вычислить α_k, минимизирующий $f(x_k + \alpha_k d_k)$:

$$\alpha_k = -\frac{d_k^\top (Ax_k - b)}{d_k^\top A d_k}$$

3) **Итерация алгоритма.** Обновляем положение x_k, двигаясь в направлении d_k с длиной шага α_k:

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

4) **Обновление направления.** Обновляем $d_{k+1} = -\nabla f(x_{k+1}) + \beta_k d_k$, где β_k вычисляется по формуле:

$$\beta_k = \frac{\nabla f(x_{k+1})^\top A d_k}{d_k^\top A d_k}.$$

5) **Цикл до сходимости.** Повторяем шаги 2–4, пока не построено n направлений, где n — размерность пространства (размерность x).

Оптимальная длина шага

Точный одномерный поиск:

$$\alpha_k = \text{arg}\min_{\alpha \in \mathbb{R}^+} f\left(x_{k+1}\right) = \text{arg}\min_{\alpha \in \mathbb{R}^+} f\left(x_k + \alpha d_k\right)$$

Оптимальная длина шага

Точный одномерный поиск:

$$\alpha_k = \text{arg}\min_{\alpha \in \mathbb{R}^+} f\left(x_{k+1}\right) = \text{arg}\min_{\alpha \in \mathbb{R}^+} f\left(x_k + \alpha d_k\right)$$

Найдём аналитическое выражение для шага α_k:

$$\begin{aligned} f\left(x_k + \alpha d_k\right) &= \frac{1}{2}\left(x_k + \alpha d_k\right)^\top A\left(x_k + \alpha d_k\right) - b^\top\left(x_k + \alpha d_k\right) + c \\ &= \frac{1}{2}\alpha^2 d_k^\top A d_k + d_k^\top\left(Ax_k - b\right)\alpha + \left(\frac{1}{2}x_k^\top A x_k + x_k^\top d_k + c\right) \end{aligned}$$

Оптимальная длина шага

Точный одномерный поиск:

$$\alpha_k = \text{arg}\min_{\alpha \in \mathbb{R}^+} f\left(x_{k+1}\right) = \text{arg}\min_{\alpha \in \mathbb{R}^+} f\left(x_k + \alpha d_k\right)$$

Найдём аналитическое выражение для шага α_k:

$$\begin{aligned}
f\left(x_k + \alpha d_k\right) &= \frac{1}{2}\left(x_k + \alpha d_k\right)^\top A\left(x_k + \alpha d_k\right) - b^\top\left(x_k + \alpha d_k\right) + c \\
&= \frac{1}{2}\alpha^2 d_k^\top A d_k + d_k^\top\left(A x_k - b\right)\alpha + \left(\frac{1}{2}x_k^\top A x_k + x_k^\top d_k + c\right)
\end{aligned}$$

Поскольку $A \in \mathbb{S}^d_{++}$, точка с нулевой производной на этой параболе является минимумом:

$$\left(d_k^\top A d_k\right)\alpha_k + d_k^\top\left(A x_k - b\right) = 0 \iff \alpha_k = -\frac{d_k^\top\left(A x_k - b\right)}{d_k^\top A d_k}$$

Обновление направления

Обновляем направление так, чтобы следующее направление было A-ортогонально предыдущему:

$$d_{k+1} \perp_A d_k \iff d_{k+1}^\top A d_k = 0$$

Обновление направления

Обновляем направление так, чтобы следующее направление было A-ортогонально предыдущему:

$$d_{k+1} \perp_A d_k \iff d_{k+1}^\top A d_k = 0$$

Поскольку $d_{k+1} = -\nabla f(x_{k+1}) + \beta_k d_k$, выбираем β_k так, чтобы выполнялась A-ортогональность:

$$d_{k+1}^\top A d_k = -\nabla f\left(x_{k+1}\right)^\top A d_k + \beta_k d_k^\top A d_k = 0 \iff \beta_k = \frac{\nabla f\left(x_{k+1}\right)^\top A d_k}{d_k^\top A d_k}$$

Обновление направления

Обновляем направление так, чтобы следующее направление было A-ортогонально предыдущему:

$$d_{k+1} \perp_A d_k \iff d_{k+1}^\top A d_k = 0$$

Поскольку $d_{k+1} = -\nabla f(x_{k+1}) + \beta_k d_k$, выбираем β_k так, чтобы выполнялась A-ортогональность:

$$d_{k+1}^\top A d_k = -\nabla f\left(x_{k+1}\right)^\top A d_k + \beta_k d_k^\top A d_k = 0 \iff \beta_k = \frac{\nabla f\left(x_{k+1}\right)^\top A d_k}{d_k^\top A d_k}$$

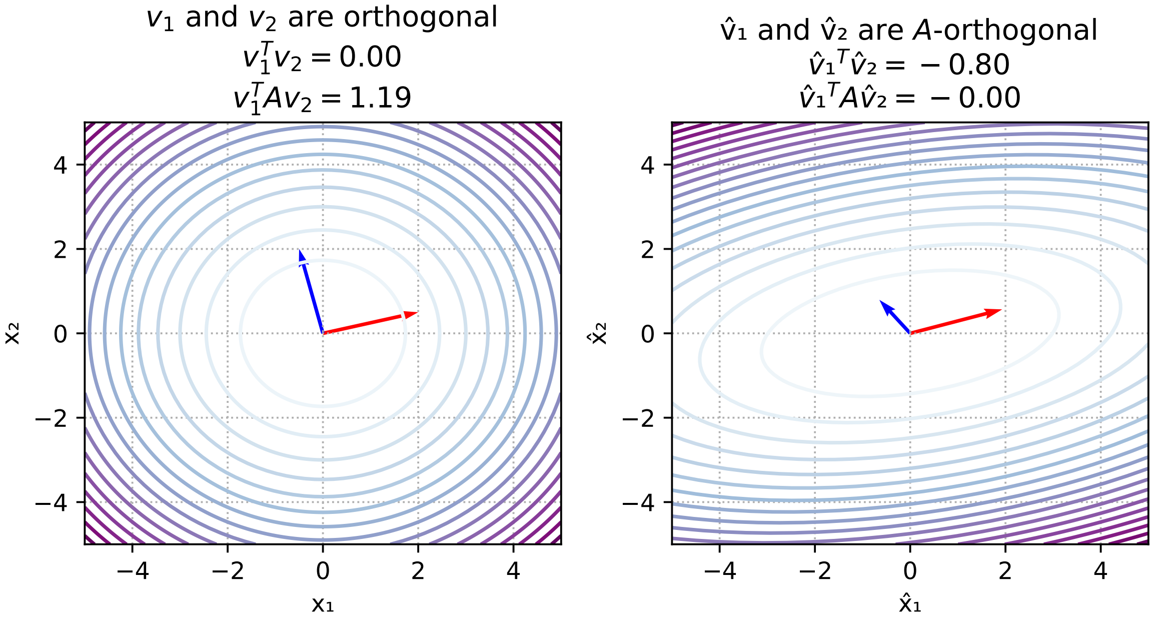
Лемма 1

Все направления, строящиеся по описанной выше процедуре, A-ортогональны друг другу:

$$d_i^\top A d_j = 0, \text{ if } i \neq j$$

$$d_i^\top A d_j > 0, \text{ if } i = j$$

A-ортогональность



Сходимость метода сопряжённых градиентов

Лемма 2

Пусть решается n-мерная квадратичная выпуклая задача оптимизации. Метод сопряжённых направлений:

$$x_{k+1} = x_0 + \sum_{i=0}^{k} \alpha_i d_i,$$

где $\alpha_i = -\dfrac{d_i^\top (Ax_i - b)}{d_i^\top A d_i}$, взятые из одномерного поиска, обеспечивают сходимость не более чем за n шагов алгоритма.

Метод сопряжённых градиентов на практике

На практике для шага α_k и коэффициента β_k обычно используют следующие формулы:

$$\alpha_k = \frac{r_k^\top r_k}{d_k^\top A d_k} \qquad \beta_k = \frac{r_{k+1}^\top r_{k+1}}{r_k^\top r_k},$$

где $r_k = b - Ax_k$, так как $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$, то $r_{k+1} = r_k - \alpha_k A d_k$. Также, $r_i^T r_k = 0, \forall i \neq k$ (**Лемма 5** из лекции).

Метод сопряжённых градиентов на практике

На практике для шага α_k и коэффициента β_k обычно используют следующие формулы:

$$\alpha_k = \frac{r_k^\top r_k}{d_k^\top A d_k} \qquad \beta_k = \frac{r_{k+1}^\top r_{k+1}}{r_k^\top r_k},$$

где $r_k = b - Ax_k$, так как $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$, то $r_{k+1} = r_k - \alpha_k A d_k$. Также, $r_i^T r_k = 0, \forall i \neq k$ (**Лемма 5** из лекции).

Выведем выражение для β_k:

$$\beta_k = \frac{\nabla f\left(x_{k+1}\right)^\top A d_k}{d_k^\top A d_k} = -\frac{r_{k+1}^\top A d_k}{d_k^\top A d_k}$$

Метод сопряжённых градиентов на практике

На практике для шага α_k и коэффициента β_k обычно используют следующие формулы:

$$
\alpha_k = \frac{r_k^\top r_k}{d_k^\top A d_k} \qquad \beta_k = \frac{r_{k+1}^\top r_{k+1}}{r_k^\top r_k},
$$

где $r_k = b - Ax_k$, так как $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$, то $r_{k+1} = r_k - \alpha_k A d_k$. Также, $r_i^T r_k = 0, \forall i \neq k$ (**Лемма 5** из лекции).

Выведем выражение для β_k:

$$
\beta_k = \frac{\nabla f\left(x_{k+1}\right)^\top A d_k}{d_k^\top A d_k} = -\frac{r_{k+1}^\top A d_k}{d_k^\top A d_k}
$$

Числитель: $r_{k+1}^\top A d_k = \frac{1}{\alpha_k} r_{k+1}^\top \left(r_k - r_{k+1}\right) = [r_{k+1}^\top r_k = 0] = -\frac{1}{\alpha_k} r_{k+1}^\top r_{k+1}$

Знаменатель: $d_k^\top A d_k = \left(r_k + \beta_{k-1} d_{k-1}\right)^\top A d_k = \frac{1}{\alpha_k} r_k^\top \left(r_k - r_{k+1}\right) = \frac{1}{\alpha_k} r_k^\top r_k$

Метод сопряжённых градиентов на практике

На практике для шага α_k и коэффициента β_k обычно используют следующие формулы:

$$\alpha_k = \frac{r_k^\top r_k}{d_k^\top A d_k} \qquad \beta_k = \frac{r_{k+1}^\top r_{k+1}}{r_k^\top r_k},$$

где $r_k = b - Ax_k$, так как $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$, то $r_{k+1} = r_k - \alpha_k A d_k$. Также, $r_i^T r_k = 0, \forall i \neq k$ (**Лемма 5** из лекции).

Выведем выражение для β_k:

$$\beta_k = \frac{\nabla f\left(x_{k+1}\right)^\top A d_k}{d_k^\top A d_k} = -\frac{r_{k+1}^\top A d_k}{d_k^\top A d_k}$$

Числитель: $r_{k+1}^\top A d_k = \frac{1}{\alpha_k} r_{k+1}^\top \left(r_k - r_{k+1}\right) = [r_{k+1}^\top r_k = 0] = -\frac{1}{\alpha_k} r_{k+1}^\top r_{k+1}$

Знаменатель: $d_k^\top A d_k = \left(r_k + \beta_{k-1} d_{k-1}\right)^\top A d_k = \frac{1}{\alpha_k} r_k^\top \left(r_k - r_{k+1}\right) = \frac{1}{\alpha_k} r_k^\top r_k$

> **Question**
>
> Почему эта модификация лучше стандартной версии?

Метод сопряжённых градиентов на практике. Псевдокод

$r_0 := b - Ax_0$

if r_0 is sufficiently small, then return x_0 as the result

$d_0 := r_0$

$k := 0$

repeat

$$\alpha_k := \frac{r_k^\top r_k}{d_k^\top A d_k}$$

$$x_{k+1} := x_k + \alpha_k d_k$$

$$r_{k+1} := r_k - \alpha_k A d_k$$

if r_{k+1} is sufficiently small, then exit loop

$$\beta_k := \frac{r_{k+1}^\top r_{k+1}}{r_k^\top r_k}$$

$$d_{k+1} := r_{k+1} + \beta_k d_k$$

$$k := k + 1$$

end repeat

return x_{k+1} as the result

Упражнение 1

Реализуйте итерации метода сопряжённых градиентов для квадратичной задачи

$$f(x) = \frac{1}{2}x^T A x - b^T x \longrightarrow \min_{x \in \mathbb{R}^n}$$

и запустите эксперименты для нескольких матриц A. Смотрите код здесь .

Нелинейный метод сопряжённых градиентов

Если у нас нет аналитического выражения для функции или её градиента, мы, скорее всего, не сможем аналитически решить одномерную задачу минимизации. Поэтому α_k подбирается обычной процедурой одномерного поиска. Но для выбора β_k есть следующий математический трюк:

Для двух последовательных итераций верно:

$$x_{k+1} - x_k = cd_k,$$

где c — некоторая константа. Тогда для квадратичного случая имеем:

$$\nabla f(x_{k+1}) - \nabla f(x_k) = (Ax_{k+1} - b) - (Ax_k - b) = A(x_{k+1} - x_k) = cAd_k$$

Выражая из этого равенства $Ad_k = \dfrac{1}{c}\left(\nabla f(x_{k+1}) - \nabla f(x_k)\right)$, избавляемся от «знания» функции в определении шага β_k, тогда пункт 4 переписывается так:

$$\beta_k = \frac{\nabla f(x_{k+1})^\top (\nabla f(x_{k+1}) - \nabla f(x_k))}{d_k^\top (\nabla f(x_{k+1}) - \nabla f(x_k))}.$$

Этот метод называется методом Полака—Рибьера.

Упражнение 2

Реализуйте итерации метода Полака—Рибьера и запустите эксперименты для нескольких μ в бинарной логистической регрессии:

$$f(x) = \frac{\mu}{2}\|x\|_2^2 + \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} log(1 + exp(-y_i\langle a_i, x\rangle)) \longrightarrow \min_{x\in\mathbb{R}^n}$$

Смотрите код здесь .

Численные эксперименты

Патологический пример

Пусть $t \in (0,1)$ и

$$W = \begin{bmatrix} t & \sqrt{t} & & & \\ \sqrt{t} & 1+t & \sqrt{t} & & \\ & \sqrt{t} & 1+t & \sqrt{t} & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & \sqrt{t} & 1+t \end{bmatrix}, \quad b = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}$$

Так как W невырожденна, существует единственное решение $Wx = b$. Решение методом сопряжённых градиентов даёт довольно плохую сходимость. Во время работы CG ошибка растёт экспоненциально (!), пока внезапно не становится нулевой, когда находится единственное решение. Невязка $\|Wx_k - b\|^2$ растёт экспоненциально как $(1/t)^k$ до n-й итерации, после чего резко падает к нулю. См. эксперимент здесь . ## Другие численные эксперименты Посмотрим другие примеры здесь . Код взят из .