# Метод сопряженных градиентов

Семинар

Оптимизация для всех! ЦУ

# 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:

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

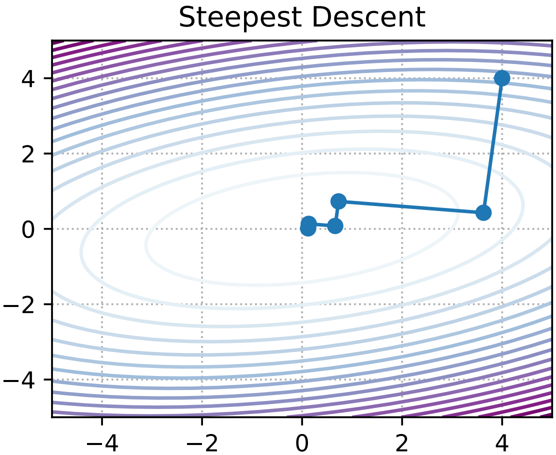
# Сильно выпуклые квадратичные функции

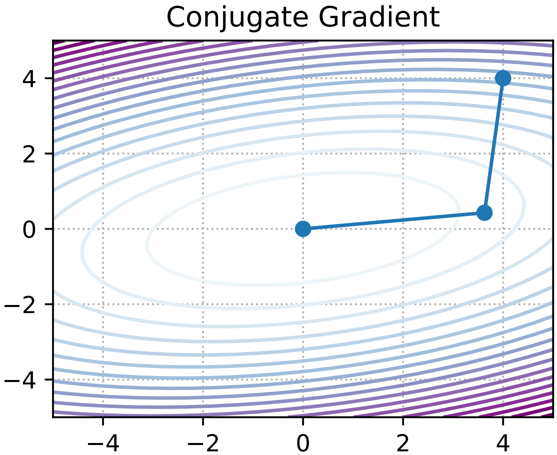
Рассмотрим следующую квадратичную задачу оптимизации:

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

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 $x_k = x_0$, $d_k = d_0 = -\nabla f(x_0)$.
2) **Оптимальная длина шага.** С помощью процедуры одномерного поиска (*line search*) находим оптимальную длину шага. Это означает вычислить $\alpha_k$, 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 $\alpha_k$, 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 $\alpha_k$:

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

# 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 $\alpha_k$, 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 $\alpha_k$:

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

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

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

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

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

# Оптимальная длина шага

Точный одномерный поиск:

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

Найдём аналитическое выражение для шага $\alpha_k$:

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

# Оптимальная длина шага

Точный одномерный поиск:

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

Найдём аналитическое выражение для шага $\alpha_k$:

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

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 $\beta_k$ 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 $\beta_k$ так, чтобы выполнялась $A$-ортогональность:

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

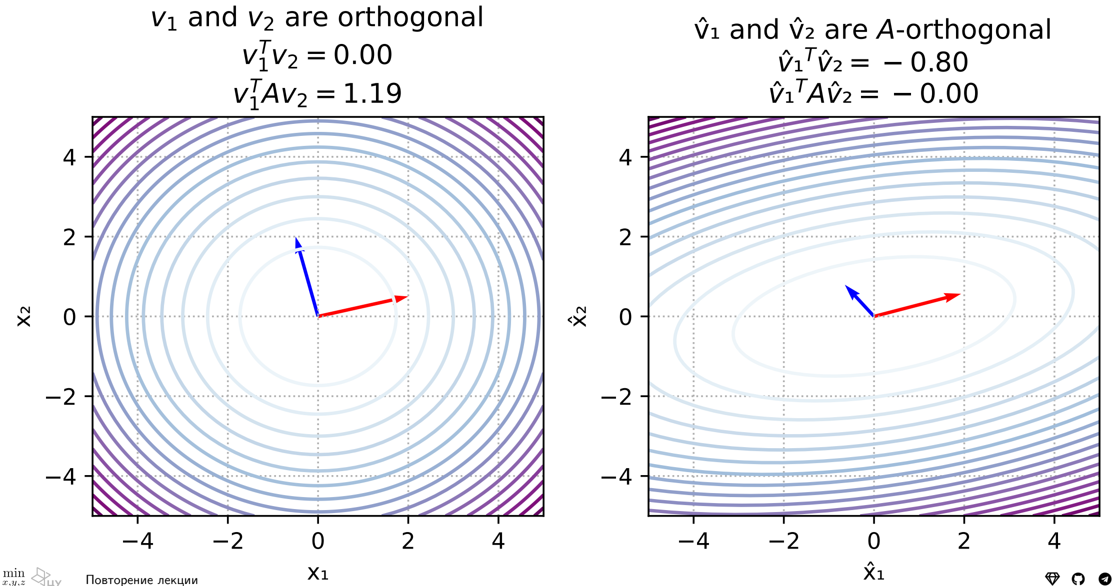
**Лемма 1**

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 $\alpha_k$ и коэффициента $\beta_k$ 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 $\alpha_k$ и коэффициента $\beta_k$ 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 $\beta_k$:

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

# Метод сопряжённых градиентов на практике

На практике для шага $\alpha_k$ и коэффициента $\beta_k$ 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 $\beta_k$:

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

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 $\alpha_k$ и коэффициента $\beta_k$ 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 $\beta_k$:

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

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 $\alpha_k$ подбирается обычной процедурой одномерного поиска. Но для выбора $\beta_k$ 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 $\beta_k$, 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 $\mu$ 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 .

# 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 .