ЦЕНТРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

Метод сопряжённых градиентов

Методы выпуклой оптимизации

НЕДЕЛЯ 10

Даня Меркулов
Пётр Остроухов

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:

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

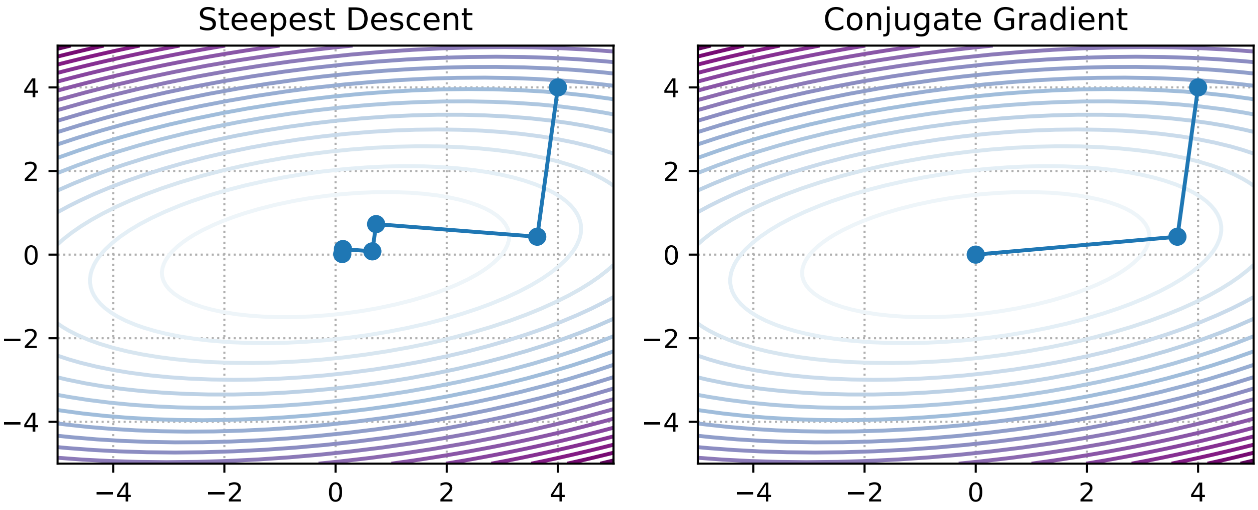
Сильно выпуклые квадратичные функции

Рассмотрим следующую квадратичную задачу оптимизации:

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

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 $x_k = x_0$, $d_k = d_0 = -\nabla f(x_0)$.

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 $f(x_k + \alpha_k d_k)$:

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

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 $f(x_k + \alpha_k d_k)$:

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

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:

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

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

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

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:

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

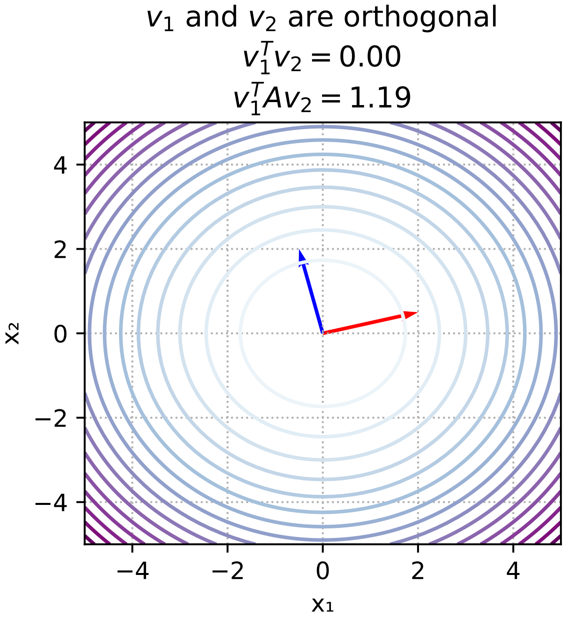
Лемма 1

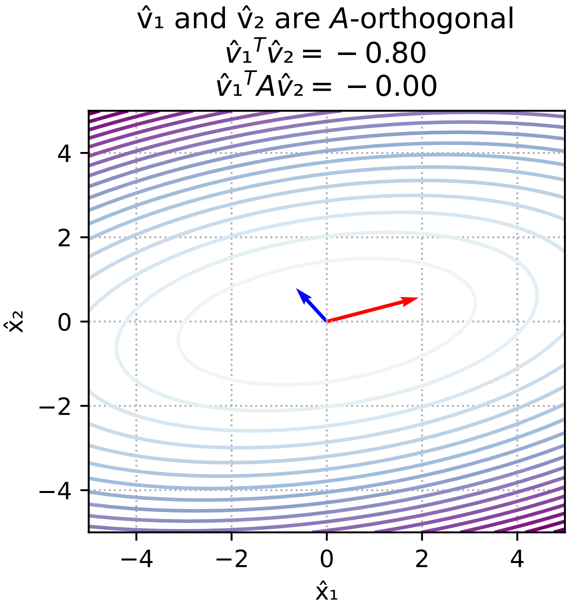
Все направления, строящиеся по описанной выше процедуре, A-ортогональны друг другу:

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

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

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 $Ad_k = \frac{1}{c}\left(\nabla f(x_{k+1}) - \nabla f(x_k)\right)$, 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 .