Методы оптимизации
Лекция 8: Метод сопряжённых градиентов, метод тяжёлого шарика и ускоренный градиентный метод Нестерова

Александр Катруца

Физтех-школа прикладной математики и информатики
Московский физико-технический институт

7 ноября 2022 г.

На прошлой лекции

- Введение в численные методы оптимизации
- Скорости сходимости методов
- Градиентный спуск
- Понятие о нижних оценках сходимости

Получение нижних оценок: выпуклый случай

- Построим выпуклую L-гладкую функцию f, такую что за k итераций любой метод вида

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_0 + \mathtt{span}(f'(\mathbf{x}_0), \ldots, f'(\mathbf{x}_k))$$

сходится НЕ быстрее чем

$$f(\mathbf{x}_{k+1}) - f^* \geq \frac{3L\|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}^*\|_2^2}{32(k+1)^2}$$

Получение нижних оценок: выпуклый случай

- Построим выпуклую L-гладкую функцию f, такую что за k итераций любой метод вида

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_0 + \mathtt{span}(f'(\mathbf{x}_0), \ldots, f'(\mathbf{x}_k))$$

  сходится НЕ быстрее чем

$$f(\mathbf{x}_{k+1}) - f^* \geq \frac{3L\|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}^*\|_2^2}{32(k+1)^2}$$

- Рассмотрим квадратную матрицу вида

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & \ldots & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & \ldots & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & \ldots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \\ 0 & 0 & 0 & \ldots & 2 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & \ldots & -1 & 2 \end{bmatrix}$$

  размерности $n = 2k + 1$

- Для неё выполнено, что

$$\mathbf{x}^\top \mathbf{A} \mathbf{x} = x_1^2 + \sum_{i=1}^{n-1} (x_i - x_{i+1})^2 + x_n^2$$

Упражнение: проверьте это равенство!

- Для неё выполнено, что

$$\mathbf{x}^\top \mathbf{A}\mathbf{x} = x_1^2 + \sum_{i=1}^{n-1}(x_i - x_{i+1})^2 + x_n^2$$

  Упражнение: проверьте это равенство!
- Это значит что $\mathbf{A} \succeq 0$

- Для неё выполнено, что

$$\mathbf{x}^\top \mathbf{A}\mathbf{x} = x_1^2 + \sum_{i=1}^{n-1} (x_i - x_{i+1})^2 + x_n^2$$

  Упражнение: проверьте это равенство!
- Это значит что $\mathbf{A} \succeq 0$
- Более того $\mathbf{A} \preceq 4\mathbf{I}$, так как
  $\mathbf{x}^\top(\mathbf{A} - 4\mathbf{I})\mathbf{x} = -x_1^2 - \sum_{i=1}^{n-1}(x_i + x_{i+1})^2 - x_n^2$

- Для неё выполнено, что

$$\mathbf{x}^\top \mathbf{A} \mathbf{x} = x_1^2 + \sum_{i=1}^{n-1} (x_i - x_{i+1})^2 + x_n^2$$

  Упражнение: проверьте это равенство!

- Это значит что $\mathbf{A} \succeq 0$
- Более того $\mathbf{A} \preceq 4\mathbf{I}$, так как $\mathbf{x}^\top (\mathbf{A} - 4\mathbf{I}) \mathbf{x} = -x_1^2 - \sum_{i=1}^{n-1} (x_i + x_{i+1})^2 - x_n^2$
- Итак, определим L-гладкую выпуклую функцию

$$f(\mathbf{x}) = \frac{L}{8} \mathbf{x}^\top \mathbf{A} \mathbf{x} - \frac{L}{4} \mathbf{e}_1^\top \mathbf{x}$$

- Для неё выполнено, что

$$\mathbf{x}^\top \mathbf{A}\mathbf{x} = x_1^2 + \sum_{i=1}^{n-1} (x_i - x_{i+1})^2 + x_n^2$$

  Упражнение: проверьте это равенство!
- Это значит что $\mathbf{A} \succeq 0$
- Более того $\mathbf{A} \preceq 4\mathbf{I}$, так как $\mathbf{x}^\top (\mathbf{A} - 4\mathbf{I})\mathbf{x} = -x_1^2 - \sum_{i=1}^{n-1} (x_i + x_{i+1})^2 - x_n^2$
- Итак, определим L-гладкую выпуклую функцию

$$f(\mathbf{x}) = \frac{L}{8} \mathbf{x}^\top \mathbf{A}\mathbf{x} - \frac{L}{4} \mathbf{e}_1^\top \mathbf{x}$$

- Её градиент $f'(\mathbf{x}) = \frac{L}{4} \mathbf{A}\mathbf{x} - \frac{L}{4} \mathbf{e}_1$

- Для неё выполнено, что

$$\mathbf{x}^\top \mathbf{A}\mathbf{x} = x_1^2 + \sum_{i=1}^{n-1} (x_i - x_{i+1})^2 + x_n^2$$

  Упражнение: проверьте это равенство!
- Это значит что $\mathbf{A} \succeq 0$
- Более того $\mathbf{A} \preceq 4\mathbf{I}$, так как $\mathbf{x}^\top (\mathbf{A} - 4\mathbf{I})\mathbf{x} = -x_1^2 - \sum_{i=1}^{n-1} (x_i + x_{i+1})^2 - x_n^2$
- Итак, определим L-гладкую выпуклую функцию

$$f(\mathbf{x}) = \frac{L}{8}\mathbf{x}^\top \mathbf{A}\mathbf{x} - \frac{L}{4}\mathbf{e}_1^\top \mathbf{x}$$

- Её градиент $f'(\mathbf{x}) = \frac{L}{4}\mathbf{A}\mathbf{x} - \frac{L}{4}\mathbf{e}_1$
- Условие первого порядка даёт $\mathbf{A}\mathbf{x}^* = \mathbf{e}_1$

- Для неё выполнено, что

$$\mathbf{x}^\top \mathbf{A}\mathbf{x} = x_1^2 + \sum_{i=1}^{n-1}(x_i - x_{i+1})^2 + x_n^2$$

  Упражнение: проверьте это равенство!
- Это значит что $\mathbf{A} \succeq 0$
- Более того $\mathbf{A} \preceq 4\mathbf{I}$, так как $\mathbf{x}^\top(\mathbf{A} - 4\mathbf{I})\mathbf{x} = -x_1^2 - \sum_{i=1}^{n-1}(x_i + x_{i+1})^2 - x_n^2$
- Итак, определим L-гладкую выпуклую функцию

$$f(\mathbf{x}) = \frac{L}{8}\mathbf{x}^\top \mathbf{A}\mathbf{x} - \frac{L}{4}\mathbf{e}_1^\top \mathbf{x}$$

- Её градиент $f'(\mathbf{x}) = \frac{L}{4}\mathbf{A}\mathbf{x} - \frac{L}{4}\mathbf{e}_1$
- Условие первого порядка даёт $\mathbf{A}\mathbf{x}^* = \mathbf{e}_1$
- Из рекурсии можно показать, что $x_i^* = 1 - \frac{i}{n+1}$

- Тогда оптимальное значение функции

$$
\begin{aligned}
f^* &= -\frac{L}{4}\left(1-\frac{1}{n+1}\right)+\frac{L}{8}\left(\left(1-\frac{1}{n+1}\right)^2+\frac{n}{(n+1)^2}\right)= \\
&= -\frac{L}{4}\left(1-\frac{1}{n+1}\right)+\frac{L}{8}\left(1-\frac{1}{n+1}\right) \\
&= -\frac{L}{8}\left(1-\frac{1}{n+1}\right)
\end{aligned}
$$

- Тогда оптимальное значение функции

$$f^* = -\frac{L}{4}\left(1 - \frac{1}{n+1}\right) + \frac{L}{8}\left(\left(1 - \frac{1}{n+1}\right)^2 + \frac{n}{(n+1)^2}\right) =$$
$$= -\frac{L}{4}\left(1 - \frac{1}{n+1}\right) + \frac{L}{8}\left(1 - \frac{1}{n+1}\right)$$
$$= -\frac{L}{8}\left(1 - \frac{1}{n+1}\right)$$

- Пусть $\mathbf{x}_0 = 0$, тогда $\mathbf{x}_1 = \alpha \mathbf{e}_1$, далее $\mathbf{x}_2 = \mathbf{x}_1 - \alpha(\mathbf{A}\mathbf{x}_1 - \mathbf{e}_1)$ и тд

- Тогда оптимальное значение функции

$$
\begin{aligned}
f^* = -\frac{L}{4}\left(1 - \frac{1}{n+1}\right) + \frac{L}{8}\left(\left(1 - \frac{1}{n+1}\right)^2 + \frac{n}{(n+1)^2}\right) = \\
= -\frac{L}{4}\left(1 - \frac{1}{n+1}\right) + \frac{L}{8}\left(1 - \frac{1}{n+1}\right) \\
= -\frac{L}{8}\left(1 - \frac{1}{n+1}\right)
\end{aligned}
$$

- Пусть $\mathbf{x}_0 = 0$, тогда $\mathbf{x}_1 = \alpha \mathbf{e}_1$, далее $\mathbf{x}_2 = \mathbf{x}_1 - \alpha(\mathbf{A}\mathbf{x}_1 - \mathbf{e}_1)$ и тд
- Заметим, что спустя k итераций в векторе $\mathbf{x}_k$ первые k элементов ненули, то есть $[\mathbf{x}_k]_i = 0$ при $i > k$

- Тогда оптимальное значение функции

$$f^* = -\frac{L}{4}\left(1 - \frac{1}{n+1}\right) + \frac{L}{8}\left(\left(1 - \frac{1}{n+1}\right)^2 + \frac{n}{(n+1)^2}\right) =$$
$$= -\frac{L}{4}\left(1 - \frac{1}{n+1}\right) + \frac{L}{8}\left(1 - \frac{1}{n+1}\right)$$
$$= -\frac{L}{8}\left(1 - \frac{1}{n+1}\right)$$

- Пусть $\mathbf{x}_0 = 0$, тогда $\mathbf{x}_1 = \alpha \mathbf{e}_1$, далее $\mathbf{x}_2 = \mathbf{x}_1 - \alpha(\mathbf{A}\mathbf{x}_1 - \mathbf{e}_1)$ и тд
- Заметим, что спустя k итераций в векторе $\mathbf{x}_k$ первые k элементов ненули, то есть $[\mathbf{x}_k]_i = 0$ при $i > k$
- Рассмотрим задачу

$$\mathbf{x}_k^* = \arg\min_{x_i = 0, i > k} f(\mathbf{x})$$

- Тогда оптимальное значение функции

$$f^* = -\frac{L}{4}\left(1 - \frac{1}{n+1}\right) + \frac{L}{8}\left(\left(1 - \frac{1}{n+1}\right)^2 + \frac{n}{(n+1)^2}\right) =$$
$$= -\frac{L}{4}\left(1 - \frac{1}{n+1}\right) + \frac{L}{8}\left(1 - \frac{1}{n+1}\right)$$
$$= -\frac{L}{8}\left(1 - \frac{1}{n+1}\right)$$

- Пусть $\mathbf{x}_0 = 0$, тогда $\mathbf{x}_1 = \alpha \mathbf{e}_1$, далее $\mathbf{x}_2 = \mathbf{x}_1 - \alpha(\mathbf{A}\mathbf{x}_1 - \mathbf{e}_1)$ и тд
- Заметим, что спустя k итераций в векторе $\mathbf{x}_k$ первые k элементов ненули, то есть $[\mathbf{x}_k]_i = 0$ при $i > k$
- Рассмотрим задачу

$$\mathbf{x}_k^* = \arg\min_{x_i = 0, i > k} f(\mathbf{x})$$

- Соответственно её решение $[\mathbf{x}_k^*]_i = \begin{cases} 1 - \frac{i}{k+1}, & i \leq k \\ 0, & \text{иначе.} \end{cases}$ [1]

- Тогда $f(\mathbf{x}_k^*) = -\frac{L}{8}\left(1 - \frac{1}{k+1}\right)$

- Тогда $f(\mathbf{x}_k^*) = -\frac{L}{8}\left(1 - \frac{1}{k+1}\right)$
- В итоге получим следующую цепочку неравенств

$$f(\mathbf{x}_k) - f(\mathbf{x}^*) \geq f(\mathbf{x}_k^*) - f(\mathbf{x}^*) =$$
$$-\frac{L}{8}\left(1 - \frac{1}{k+1}\right) + \frac{L}{8}\left(1 - \frac{1}{n+1}\right) = \frac{L}{8}\left(\frac{1}{k+1} - \frac{1}{n+1}\right) =$$
$$\frac{L}{8}\left(\frac{1}{k+1} - \frac{1}{2k+1+1}\right) = \frac{L}{8}\frac{1}{2(k+1)}$$

- Тогда $f(\mathbf{x}_k^*) = -\frac{L}{8}\left(1 - \frac{1}{k+1}\right)$
- В итоге получим следующую цепочку неравенств

$$
f(\mathbf{x}_k) - f(\mathbf{x}^*) \geq f(\mathbf{x}_k^*) - f(\mathbf{x}^*) =
$$
$$
-\frac{L}{8}\left(1 - \frac{1}{k+1}\right) + \frac{L}{8}\left(1 - \frac{1}{n+1}\right) = \frac{L}{8}\left(\frac{1}{k+1} - \frac{1}{n+1}\right) =
$$
$$
\frac{L}{8}\left(\frac{1}{k+1} - \frac{1}{2k+1+1}\right) = \frac{L}{8}\frac{1}{2(k+1)}
$$

- Далее оценим $\|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}^*\|_2^2 = \|\mathbf{x}^*\|_2^2 = \sum_{i=1}^{n}\left(1 - \frac{i}{n+1}\right)^2$

- Тогда $f(\mathbf{x}_k^*) = -\frac{L}{8}\left(1 - \frac{1}{k+1}\right)$
- В итоге получим следующую цепочку неравенств

$$
\begin{aligned}
&f(\mathbf{x}_k) - f(\mathbf{x}^*) \geq f(\mathbf{x}_k^*) - f(\mathbf{x}^*) = \\
&-\frac{L}{8}\left(1 - \frac{1}{k+1}\right) + \frac{L}{8}\left(1 - \frac{1}{n+1}\right) = \frac{L}{8}\left(\frac{1}{k+1} - \frac{1}{n+1}\right) = \\
&\frac{L}{8}\left(\frac{1}{k+1} - \frac{1}{2k+1+1}\right) = \frac{L}{8}\frac{1}{2(k+1)}
\end{aligned}
$$

- Далее оценим $\|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}^*\|_2^2 = \|\mathbf{x}^*\|_2^2 = \sum_{i=1}^n \left(1 - \frac{i}{n+1}\right)^2$
- $\sum_{i=1}^n \left(1 - \frac{i}{n+1}\right)^2 = n - \frac{2}{n+1}\sum_{i=1}^n i + \frac{1}{(n+1)^2}\sum_{i=1}^n i^2$

- Тогда $f(\mathbf{x}_k^*) = -\frac{L}{8}\left(1 - \frac{1}{k+1}\right)$
- В итоге получим следующую цепочку неравенств

$$f(\mathbf{x}_k) - f(\mathbf{x}^*) \geq f(\mathbf{x}_k^*) - f(\mathbf{x}^*) =$$
$$-\frac{L}{8}\left(1 - \frac{1}{k+1}\right) + \frac{L}{8}\left(1 - \frac{1}{n+1}\right) = \frac{L}{8}\left(\frac{1}{k+1} - \frac{1}{n+1}\right) =$$
$$\frac{L}{8}\left(\frac{1}{k+1} - \frac{1}{2k+1+1}\right) = \frac{L}{8}\frac{1}{2(k+1)}$$

- Далее оценим $\|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}^*\|_2^2 = \|\mathbf{x}^*\|_2^2 = \sum_{i=1}^n \left(1 - \frac{i}{n+1}\right)^2$
- $\sum_{i=1}^n \left(1 - \frac{i}{n+1}\right)^2 = n - \frac{2}{n+1}\sum_{i=1}^n i + \frac{1}{(n+1)^2}\sum_{i=1}^n i^2$
- Вспомним, что $\sum_{i=1}^n i^2 = \frac{n(n+1)(2n+1)}{6}$ и $\sum_{i=1}^n i = \frac{n(n+1)}{2}$

- Тогда $f(\mathbf{x}_k^*) = -\frac{L}{8}\left(1 - \frac{1}{k+1}\right)$
- В итоге получим следующую цепочку неравенств

$$f(\mathbf{x}_k) - f(\mathbf{x}^*) \geq f(\mathbf{x}_k^*) - f(\mathbf{x}^*) =$$
$$-\frac{L}{8}\left(1 - \frac{1}{k+1}\right) + \frac{L}{8}\left(1 - \frac{1}{n+1}\right) = \frac{L}{8}\left(\frac{1}{k+1} - \frac{1}{n+1}\right) =$$
$$\frac{L}{8}\left(\frac{1}{k+1} - \frac{1}{2k+1+1}\right) = \frac{L}{8}\frac{1}{2(k+1)}$$

- Далее оценим $\|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}^*\|_2^2 = \|\mathbf{x}^*\|_2^2 = \sum_{i=1}^n \left(1 - \frac{i}{n+1}\right)^2$
- $\sum_{i=1}^n \left(1 - \frac{i}{n+1}\right)^2 = n - \frac{2}{n+1}\sum_{i=1}^n i + \frac{1}{(n+1)^2}\sum_{i=1}^n i^2$
- Вспомним, что $\sum_{i=1}^n i^2 = \frac{n(n+1)(2n+1)}{6}$ и $\sum_{i=1}^n i = \frac{n(n+1)}{2}$
- Тогда $\|\mathbf{x}^*\|_2^2 = \frac{n(2n+1)}{6(n+1)} \leq \frac{n+1}{3} = \frac{2(k+1)}{3}$

- Тогда $f(\mathbf{x}_k^*) = -\frac{L}{8}\left(1 - \frac{1}{k+1}\right)$
- В итоге получим следующую цепочку неравенств

$$
\begin{aligned}
&f(\mathbf{x}_k) - f(\mathbf{x}^*) \geq f(\mathbf{x}_k^*) - f(\mathbf{x}^*) = \\
&-\frac{L}{8}\left(1 - \frac{1}{k+1}\right) + \frac{L}{8}\left(1 - \frac{1}{n+1}\right) = \frac{L}{8}\left(\frac{1}{k+1} - \frac{1}{n+1}\right) = \\
&\frac{L}{8}\left(\frac{1}{k+1} - \frac{1}{2k+1+1}\right) = \frac{L}{8}\frac{1}{2(k+1)}
\end{aligned}
$$

- Далее оценим $\|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}^*\|_2^2 = \|\mathbf{x}^*\|_2^2 = \sum_{i=1}^n \left(1 - \frac{i}{n+1}\right)^2$
- $\sum_{i=1}^n \left(1 - \frac{i}{n+1}\right)^2 = n - \frac{2}{n+1}\sum_{i=1}^n i + \frac{1}{(n+1)^2}\sum_{i=1}^n i^2$
- Вспомним, что $\sum_{i=1}^n i^2 = \frac{n(n+1)(2n+1)}{6}$ и $\sum_{i=1}^n i = \frac{n(n+1)}{2}$
- Тогда $\|\mathbf{x}^*\|_2^2 = \frac{n(2n+1)}{6(n+1)} \leq \frac{n+1}{3} = \frac{2(k+1)}{3}$
- И наконец $k + 1 \geq \frac{3}{2}\|\mathbf{x}^* - \mathbf{x}_0\|_2^2$

Итоговая оценка снизу

$$f(\mathbf{x}_k) - f(\mathbf{x}^*) \geq \frac{L}{8}\frac{1}{2(k+1)} = \frac{L}{8}\frac{k+1}{2(k+1)^2} \geq \frac{L}{8}\frac{3}{2}\frac{\|\mathbf{x}^* - \mathbf{x}_0\|_2^2}{2(k+1)^2}$$

Итоговая оценка снизу

$$f(\mathbf{x}_k) - f(\mathbf{x}^*) \geq \frac{L}{8}\frac{1}{2(k+1)} = \frac{L}{8}\frac{k+1}{2(k+1)^2} \geq \frac{L}{8}\frac{3}{2}\frac{\|\mathbf{x}^* - \mathbf{x}_0\|_2^2}{2(k+1)^2}$$

Случай сильно выпуклой функции

Итоговая оценка снизу

$$f(\mathbf{x}_k) - f(\mathbf{x}^*) \geq \frac{L}{8}\frac{1}{2(k+1)} = \frac{L}{8}\frac{k+1}{2(k+1)^2} \geq \frac{L}{8}\frac{3}{2}\frac{\|\mathbf{x}^* - \mathbf{x}_0\|_2^2}{2(k+1)^2}$$

Случай сильно выпуклой функции

- "Плохая" функция $g(\mathbf{x}) = \frac{\mu(\kappa-1)}{8}\left(\mathbf{x}^\top \mathbf{A}\mathbf{x} - 2\mathbf{e}_1^\top \mathbf{x}\right) + \frac{\mu}{2}\|\mathbf{x}\|_2^2$

Итоговая оценка снизу

$$f(\mathbf{x}_k) - f(\mathbf{x}^*) \geq \frac{L}{8}\frac{1}{2(k+1)} = \frac{L}{8}\frac{k+1}{2(k+1)^2} \geq \frac{L}{8}\frac{3}{2}\frac{\|\mathbf{x}^* - \mathbf{x}_0\|_2^2}{2(k+1)^2}$$

Случай сильно выпуклой функции

- "Плохая" функция $g(\mathbf{x}) = \frac{\mu(\kappa-1)}{8}\left(\mathbf{x}^\top \mathbf{A}\mathbf{x} - 2\mathbf{e}_1^\top \mathbf{x}\right) + \frac{\mu}{2}\|\mathbf{x}\|_2^2$
- Аналогичная техника позволяет получить оценку снизу для класса сильно выпуклых функций

Что нам известно?

Что нам известно?

Нижние оценки сходимости линейных методов первого порядка:

- для выпуклых функций с Липшицевым градиентом

$$f(x_{k+1}) - f^* \geq \frac{3L\|x_0 - x^*\|_2^2}{32(k+1)^2}$$

- для сильно выпуклых функций с Липшицевым градиентом

$$f(x_{k+1}) - f^* \geq \frac{\mu}{2} \left(\frac{\sqrt{\kappa} - 1}{\sqrt{\kappa} + 1} \right)^{2k} \|x_0 - x^*\|_2^2$$

Что нам известно?

Нижние оценки сходимости линейных методов первого порядка:

- для выпуклых функций с Липшицевым градиентом

$$f(x_{k+1}) - f^* \geq \frac{3L\|x_0 - x^*\|_2^2}{32(k+1)^2}$$

- для сильно выпуклых функций с Липшицевым градиентом

$$f(x_{k+1}) - f^* \geq \frac{\mu}{2}\left(\frac{\sqrt{\kappa}-1}{\sqrt{\kappa}+1}\right)^{2k}\|x_0 - x^*\|_2^2$$

Сходимость градиентного спуска:

- для выпуклых функций с Липшицевым градиентом

$$f(x_{k+1}) - f^* \leq \frac{2L\|x - x_0\|_2^2}{k+4}$$

- для сильно выпуклых функций с Липшицевым градиентом

$$f(x_k) - f^* \leq \frac{L}{2}\left(\frac{\kappa-1}{\kappa+1}\right)^{2k}\|x_0 - x^*\|_2^2$$

Метод сопряжённых градиентов: постановка задачи

- Рассмотрим задачу
$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x),$$
где $f(x) = \frac{1}{2}x^\top Ax - b^\top x$ и $A \in \mathbb{S}^n_{++}$

Метод сопряжённых градиентов: постановка задачи

- Рассмотрим задачу
$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x),$$
где $f(x) = \frac{1}{2}x^\top Ax - b^\top x$ и $A \in \mathbb{S}^n_{++}$
- Из необходимого условия экстремума имеем
$$Ax^* = b$$

Метод сопряжённых градиентов: постановка задачи

- Рассмотрим задачу
$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x),$$
где $f(x) = \frac{1}{2}x^\top Ax - b^\top x$ и $A \in \mathbb{S}^n_{++}$
- Из необходимого условия экстремума имеем
$$Ax^* = b$$
- Также обозначим $f'(x_k) = Ax_k - b = r_k$

Метод сопряжённых градиентов: постановка задачи

- Рассмотрим задачу
$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x),$$
где $f(x) = \frac{1}{2}x^\top Ax - b^\top x$ и $A \in \mathbb{S}^n_{++}$
- Из необходимого условия экстремума имеем
$$Ax^* = b$$
- Также обозначим $f'(x_k) = Ax_k - b = r_k$
- Задача оптимизации сведена к задаче решения системы линейных уравнений

Немного истории

- M. Hestenes и E. Stiefel предложили метод сопряжённых градиентов в 1952 году как *прямой* метод

Немного истории

- M. Hestenes и E. Stiefel предложили метод сопряжённых градиентов в 1952 году как *прямой* метод
- Долгое время считалось, что метод представляет только теоретический интерес поскольку

Немного истории

- M. Hestenes и E. Stiefel предложили метод сопряжённых градиентов в 1952 году как *прямой* метод
- Долгое время считалось, что метод представляет только теоретический интерес поскольку
  - не работает на логарифмической линейке

Немного истории

- M. Hestenes и E. Stiefel предложили метод сопряжённых градиентов в 1952 году как *прямой* метод
- Долгое время считалось, что метод представляет только теоретический интерес поскольку
  - не работает на логарифмической линейке
  - имеет небольшое преимущество перед исключением Гаусса при вычислениях на калькуляторе

Немного истории

- M. Hestenes и E. Stiefel предложили метод сопряжённых градиентов в 1952 году как *прямой* метод
- Долгое время считалось, что метод представляет только теоретический интерес поскольку
  - не работает на логарифмической линейке
  - имеет небольшое преимущество перед исключением Гаусса при вычислениях на калькуляторе
- Метод сопряжённых градиентов необходимо рассматривать как *итерационный метод*, то есть останавливаться до точной сходимости!

Немного истории

- M. Hestenes и E. Stiefel предложили метод сопряжённых градиентов в 1952 году как *прямой* метод
- Долгое время считалось, что метод представляет только теоретический интерес поскольку
  - не работает на логарифмической линейке
  - имеет небольшое преимущество перед исключением Гаусса при вычислениях на калькуляторе
- Метод сопряжённых градиентов необходимо рассматривать как *итерационный метод*, то есть останавливаться до точной сходимости!
- Подробнее здесь

Мотивация

- Сходимость градиентного спуска сильно зависит от числа обусловленности

Мотивация

- Сходимость градиентного спуска сильно зависит от числа обусловленности
- Как сделать метод, который для любого числа обусловленности сходился бы как максимум за n итераций?

Мотивация

- Сходимость градиентного спуска сильно зависит от числа обусловленности
- Как сделать метод, который для любого числа обусловленности сходился бы как максимум за n итераций?

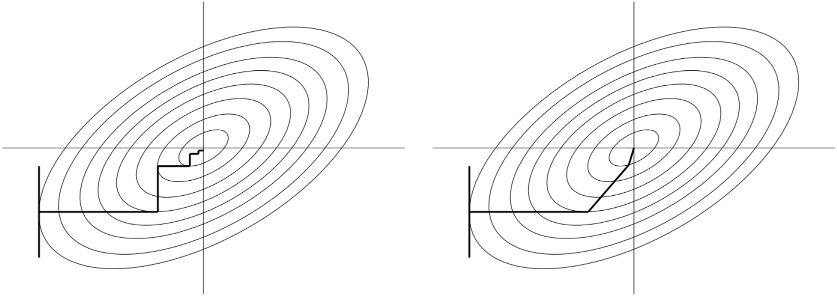


Рисунок взят отсюда

Сопряжённые направления

Определение

Множество ненулевых векторов $\{p_0, \ldots, p_l\}$ называется сопряжёнными относительно матрицы $A \in \mathbb{S}^n_{++}$, если

$$p_i^\top A p_j = 0, \qquad i \neq j$$

Сопряжённые направления

Определение

Множество ненулевых векторов $\{p_0, \ldots, p_l\}$ называется сопряжёнными относительно матрицы $A \in \mathbb{S}^n_{++}$, если

$$p_i^\top A p_j = 0, \qquad i \neq j$$

Свойства

Сопряжённые направления

Определение

Множество ненулевых векторов $\{p_0, \ldots, p_l\}$ называется сопряжёнными относительно матрицы $A \in \mathbb{S}^n_{++}$, если

$$p_i^\top A p_j = 0, \qquad i \neq j$$

Свойства

- линейно независимы

Сопряжённые направления

Определение

Множество ненулевых векторов $\{p_0, \ldots, p_l\}$ называется сопряжёнными относительно матрицы $A \in \mathbb{S}^n_{++}$, если

$$p_i^\top A p_j = 0, \qquad i \neq j$$

Свойства

- линейно независимы
- сопряжённые направления + шаг по правилу наискорейшего спуска = метод, сходящийся за n итераций

Сопряжённые направления

Определение

Множество ненулевых векторов $\{p_0, \ldots, p_l\}$ называется сопряжёнными относительно матрицы $A \in \mathbb{S}^n_{++}$, если

$$p_i^\top A p_j = 0, \qquad i \neq j$$

Свойства

- линейно независимы
- сопряжённые направления + шаг по правилу наискорейшего спуска = метод, сходящийся за n итераций
- $x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k \to r_{k+1} = r_k + \alpha_k A p_k$

Сопряжённые направления

Определение

Множество ненулевых векторов $\{p_0, \ldots, p_l\}$ называется сопряжёнными относительно матрицы $A \in \mathbb{S}^n_{++}$, если

$$p_i^\top A p_j = 0, \qquad i \neq j$$

Свойства

- линейно независимы
- сопряжённые направления + шаг по правилу наискорейшего спуска = метод, сходящийся за n итераций
- $x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k \to r_{k+1} = r_k + \alpha_k A p_k$

Q: как получить сопряжённые направления из любого набора линейно независимых векторов?

Сходимость

Теорема

Пусть x_k генерируются методом сопряжённых направлений.
Тогда

1. $\langle r_k, p_i \rangle = 0, \; i = 1, \ldots, k-1$
2. $x_k = \arg\min\limits_{x \in P} f(x)$, где $P = x_0 + \texttt{span}(p_0, \ldots, p_{k-1})$

Доказательство

Сходимость

Теорема

Пусть x_k генерируются методом сопряжённых направлений. Тогда

1. $\langle r_k, p_i \rangle = 0, \ i = 1, \ldots, k-1$
2. $x_k = \arg\min\limits_{x \in P} f(x)$, где $P = x_0 + \texttt{span}(p_0, \ldots, p_{k-1})$

Доказательство

1. $\phi(\gamma) = f(x_0 + \gamma_0 p_0 + \ldots + \gamma_{k-1} p_{k-1})$

Сходимость

Теорема

Пусть x_k генерируются методом сопряжённых направлений. Тогда

1. $\langle r_k, p_i \rangle = 0, \; i = 1, \ldots, k-1$
2. $x_k = \arg\min\limits_{x \in P} f(x)$, где $P = x_0 + \mathtt{span}(p_0, \ldots, p_{k-1})$

Доказательство

1. $\phi(\gamma) = f(x_0 + \gamma_0 p_0 + \ldots + \gamma_{k-1} p_{k-1})$
2. $\phi(\gamma)$ – строго выпукла $\rightarrow$ существует γ^*

Сходимость

Теорема

Пусть x_k генерируются методом сопряжённых направлений.
Тогда

1. $\langle r_k, p_i \rangle = 0, \; i = 1, \ldots, k-1$
2. $x_k = \arg\min\limits_{x \in P} f(x)$, где $P = x_0 + \mathtt{span}(p_0, \ldots, p_{k-1})$

Доказательство

1. $\phi(\gamma) = f(x_0 + \gamma_0 p_0 + \ldots + \gamma_{k-1} p_{k-1})$
2. $\phi(\gamma)$ – строго выпукла $\to$ существует γ^*
3. По критерию первого порядка

$$\phi'(\gamma^*) = \langle f'(x_0 + \gamma_0^* p_0 + \ldots + \gamma_{k-1}^* p_{k-1}), p_i \rangle = 0, \; i = 0, \ldots, k-1$$

Сходимость

Теорема

Пусть x_k генерируются методом сопряжённых направлений.
Тогда

1. $\langle r_k, p_i \rangle = 0, \; i = 1, \ldots, k-1$
2. $x_k = \arg\min\limits_{x \in P} f(x)$, где $P = x_0 + \texttt{span}(p_0, \ldots, p_{k-1})$

Доказательство

1. $\phi(\gamma) = f(x_0 + \gamma_0 p_0 + \ldots + \gamma_{k-1} p_{k-1})$
2. $\phi(\gamma)$ – строго выпукла $\to$ существует γ^*
3. По критерию первого порядка

$$\phi'(\gamma^*) = \langle f'(x_0 + \gamma_0^* p_0 + \ldots + \gamma_{k-1}^* p_{k-1}), p_i \rangle = 0, \; i = 0, \ldots, k-1$$

4. Из определения r_k следует, что $\langle r_k, p_i \rangle = 0, \; i = 0, \ldots, k-1$

Сходимость

Теорема

Пусть x_k генерируются методом сопряжённых направлений. Тогда

1. $\langle r_k, p_i \rangle = 0, \ i = 1, \ldots, k-1$
2. $x_k = \arg\min\limits_{x \in P} f(x)$, где $P = x_0 + \mathtt{span}(p_0, \ldots, p_{k-1})$

Доказательство

1. $\phi(\gamma) = f(x_0 + \gamma_0 p_0 + \ldots + \gamma_{k-1} p_{k-1})$
2. $\phi(\gamma)$ – строго выпукла $\to$ существует γ^*
3. По критерию первого порядка

$$\phi'(\gamma^*) = \langle f'(x_0 + \gamma_0^* p_0 + \ldots + \gamma_{k-1}^* p_{k-1}), p_i \rangle = 0, \ i = 0, \ldots, k-1$$

4. Из определения r_k следует, что $\langle r_k, p_i \rangle = 0, \ i = 0, \ldots, k-1$
5. Таким образом, $(1) \Leftrightarrow (2)$

6. Докажем (1) по индукции:

6. Докажем (1) по индукции:
   - база: $\langle r_1, p_0 \rangle = 0$ по построению

6. Докажем (1) по индукции:
   - база: $\langle r_1, p_0 \rangle = 0$ по построению
   - гипотеза: $\langle r_{k-1}, p_i \rangle = 0,\ i = 1, \ldots, k-2$

6. Докажем (1) по индукции:
   - база: $\langle r_1, p_0 \rangle = 0$ по построению
   - гипотеза: $\langle r_{k-1}, p_i \rangle = 0, \ i = 1, \dots, k-2$
7. $r_k = r_{k-1} + \alpha_{k-1} A p_{k-1}$

6. Докажем (1) по индукции:
   - база: $\langle r_1, p_0 \rangle = 0$ по построению
   - гипотеза: $\langle r_{k-1}, p_i \rangle = 0,\ i = 1, \ldots, k-2$
7. $r_k = r_{k-1} + \alpha_{k-1} A p_{k-1}$
8. $\langle p_{k-1}, r_k \rangle = \langle p_{k-1}, r_{k-1} \rangle + \alpha_{k-1} \langle p_{k-1}, A p_{k-1} \rangle = 0$ по построению α_{k-1}

6. Докажем (1) по индукции:
   - база: $\langle r_1, p_0 \rangle = 0$ по построению
   - гипотеза: $\langle r_{k-1}, p_i \rangle = 0, \ i = 1, \ldots, k-2$
7. $r_k = r_{k-1} + \alpha_{k-1} A p_{k-1}$
8. $\langle p_{k-1}, r_k \rangle = \langle p_{k-1}, r_{k-1} \rangle + \alpha_{k-1} \langle p_{k-1}, A p_{k-1} \rangle = 0$ по построению α_{k-1}
9. $\langle p_i, r_k \rangle = \langle p_i, r_{k-1} \rangle + \alpha_{k-1} \langle p_i, A p_{k-1} \rangle, \ i = 1, \ldots, k-2$

6. Докажем (1) по индукции:
   - база: $\langle r_1, p_0 \rangle = 0$ по построению
   - гипотеза: $\langle r_{k-1}, p_i \rangle = 0, \; i = 1, \ldots, k-2$
7. $r_k = r_{k-1} + \alpha_{k-1} A p_{k-1}$
8. $\langle p_{k-1}, r_k \rangle = \langle p_{k-1}, r_{k-1} \rangle + \alpha_{k-1} \langle p_{k-1}, A p_{k-1} \rangle = 0$ по построению α_{k-1}
9. $\langle p_i, r_k \rangle = \langle p_i, r_{k-1} \rangle + \alpha_{k-1} \langle p_i, A p_{k-1} \rangle, \; i = 1, \ldots, k-2$
10. $\langle p_i, r_{k-1} \rangle = 0$ по гипотезе

6. Докажем (1) по индукции:
   - база: $\langle r_1, p_0 \rangle = 0$ по построению
   - гипотеза: $\langle r_{k-1}, p_i \rangle = 0,\ i = 1, \ldots, k-2$
7. $r_k = r_{k-1} + \alpha_{k-1} A p_{k-1}$
8. $\langle p_{k-1}, r_k \rangle = \langle p_{k-1}, r_{k-1} \rangle + \alpha_{k-1} \langle p_{k-1}, A p_{k-1} \rangle = 0$ по построению α_{k-1}
9. $\langle p_i, r_k \rangle = \langle p_i, r_{k-1} \rangle + \alpha_{k-1} \langle p_i, A p_{k-1} \rangle,\ i = 1, \ldots, k-2$
10. $\langle p_i, r_{k-1} \rangle = 0$ по гипотезе
11. $\langle p_i, A p_{k-1} \rangle = 0$ по свойству сопряжённости $\{p_i\}$

Сопряжённые градиенты

- $p_0 = -r_0$ — антиградиент

Сопряжённые градиенты

- $p_0 = -r_0$ — антиградиент
- $p_{k+1} = -r_{k+1} + \beta_{k+1} p_k$, где β_{k+1} гарантирует сопряжённость p_k и p_{k+1}:

$$p_k^\top A p_{k+1} = p_k^\top A(-r_{k+1} + \beta_{k+1} p_k) = 0$$

$$\beta_{k+1} = \frac{p_k^\top A r_{k+1}}{p_k^\top A p_k}$$

Псевдокод: медленная версия

```
def ConjugateGradientQuadratic(x0, A, b, eps):
    r = A.dot(x0) - b
    p = -r
    while np.linalg.norm(r) > eps:
        alpha = -r.dot(p) / p.dot(A.dot(p))
        x = x + alpha * p
        r = A.dot(x) - b
        beta = r.dot(A.dot(p)) / p.dot(A.dot(p))
        p = -r + beta * p
    return x
```

Ускорение медленной версии

- Вычисление α_k:

$$\alpha_k = -\frac{r_k^\top p_k}{p_k^\top A p_k} = -\frac{r_k^\top(-r_k + \beta_k p_{k-1})}{p_k^\top A p_k} = \frac{\|r_k\|_2^2}{p_k^\top A p_k}$$

Ускорение медленной версии

- Вычисление α_k:

$$\alpha_k = -\frac{r_k^\top p_k}{p_k^\top A p_k} = -\frac{r_k^\top(-r_k + \beta_k p_{k-1})}{p_k^\top A p_k} = \frac{\|r_k\|_2^2}{p_k^\top A p_k}$$

- Вычисление β_k:

$$\beta_{k+1} = \frac{r_{k+1}^\top A p_k}{p_k^\top A p_k} = \frac{r_{k+1}^\top (r_{k+1} - r_k)}{(-r_k + \beta_k p_{k-1})^\top (r_{k+1} - r_k)} = \frac{\|r_{k+1}\|_2^2}{\|r_k\|_2^2}$$

Псевдокод: быстрая версия

```
def ConjugateGradientQuadratic(x0, A, b, eps):
    r = A.dot(x0) - b
    p = -r
    while np.linalg.norm(r) > eps:
        alpha = r.dot(r) / p.dot(A.dot(p))
        x = x + alpha * p
        r_next = r + alpha * A.dot(p)
        beta = r_next.dot(r_next) / r.dot(r)
        p = -r_next + beta * p
        r = r_next
    return x
```

Почему сопряжённые градиенты сопряжены?

Теорема

Пусть после k итераций $x_k \neq x^*$. Тогда

1. $\langle r_k, r_i \rangle = 0, \; i = 1, \ldots k-1$
2. $\mathtt{span}(r_0, \ldots, r_k) = \mathtt{span}(r_0, Ar_0, \ldots, A^k r_0)$
3. $\mathtt{span}(p_0, \ldots, p_k) = \mathtt{span}(r_0, Ar_0, \ldots, A^k r_0)$
4. $p_k^\top A p_i = 0$, $i = 1, \ldots, k-1$

Крыловское пространство

Определение

Пространство $\mathcal{K}_k(A) = \mathtt{span}(b, Ab, \ldots, A^{k-1}b)$ называется пространством Крылова.

Крыловское пространство

Определение

Пространство $\mathcal{K}_k(A) = \mathtt{span}(b, Ab, \dots, A^{k-1}b)$ называется пространством Крылова.

Основное свойство

$$A^{-1}b \in \mathcal{K}_n(A)$$

Крыловское пространство

Определение

Пространство $\mathcal{K}_k(A) = \texttt{span}(b, Ab, \ldots, A^{k-1}b)$ называется пространством Крылова.

Основное свойство

$$A^{-1}b \in \mathcal{K}_n(A)$$

Доказательство

Крыловское пространство

Определение

Пространство $\mathcal{K}_k(A) = \mathtt{span}(b, Ab, \ldots, A^{k-1}b)$ называется пространством Крылова.

Основное свойство

$$A^{-1}b \in \mathcal{K}_n(A)$$

Доказательство

- Теорема Гамильтона-Кэли: $p(A) = 0$, где $p(\lambda) = \det(A - \lambda I)$

Крыловское пространство

Определение

Пространство $\mathcal{K}_k(A) = \mathtt{span}(b, Ab, \ldots, A^{k-1}b)$ называется пространством Крылова.

Основное свойство

$$A^{-1}b \in \mathcal{K}_n(A)$$

Доказательство

- Теорема Гамильтона-Кэли: $p(A) = 0$, где $p(\lambda) = \det(A - \lambda I)$
- $p(A)b = A^n b + a_1 A^{n-1} b + \ldots + a_{n-1} Ab + a_n b = 0$

Крыловское пространство

Определение

Пространство $\mathcal{K}_k(A) = \mathtt{span}(b, Ab, \ldots, A^{k-1}b)$ называется пространством Крылова.

Основное свойство

$$A^{-1}b \in \mathcal{K}_n(A)$$

Доказательство

- Теорема Гамильтона-Кэли: $p(A) = 0$, где $p(\lambda) = \det(A - \lambda I)$
- $p(A)b = A^n b + a_1 A^{n-1} b + \ldots + a_{n-1} Ab + a_n b = 0$
- $A^{-1}p(A)b = A^{n-1} b + a_1 A^{n-2} b + \ldots + a_{n-1} b + a_n A^{-1} b = 0$

Крыловское пространство

Определение

Пространство $\mathcal{K}_k(A) = \texttt{span}(b, Ab, \ldots, A^{k-1}b)$ называется пространством Крылова.

Основное свойство

$$A^{-1}b \in \mathcal{K}_n(A)$$

Доказательство

- Теорема Гамильтона-Кэли: $p(A) = 0$, где $p(\lambda) = \det(A - \lambda I)$
- $p(A)b = A^n b + a_1 A^{n-1} b + \ldots + a_{n-1} Ab + a_n b = 0$
- $A^{-1}p(A)b = A^{n-1}b + a_1 A^{n-2} b + \ldots + a_{n-1} b + a_n A^{-1} b = 0$
- $A^{-1}b = -\frac{1}{a_n}(A^{n-1}b + a_1 A^{n-2} b + \ldots + a_{n-1} b)$

Интерпретация

- Поиск лучшего приближения на k-ом Крыловском пространстве
$$x_k = \arg\min_{x \in \mathcal{K}_k} f(x)$$

Интерпретация

- Поиск лучшего приближения на k-ом Крыловском пространстве
$$x_k = \arg\min_{x \in \mathcal{K}_k} f(x)$$
- Направления $\{p_i\} \neq \{b, Ab, \ldots, A^{k-1}b\}$. Почему?

Интерпретация

- Поиск лучшего приближения на k-ом Крыловском пространстве
$$x_k = \arg\min_{x \in \mathcal{K}_k} f(x)$$
- Направления $\{p_i\} \neq \{b, Ab, \ldots, A^{k-1}b\}$. Почему?

Краткое описание метода сопряжённых градиентов

Поиск решения в ортонормированном Крыловском базисе

Полезные соотношения

- Решение: $x^* = A^{-1}b$

Полезные соотношения

- Решение: $x^* = A^{-1}b$
- Минимум функции:

$$f^* = \frac{1}{2}b^\top A^{-\top}AA^{-1}b - b^\top A^{-1}b = -\frac{1}{2}b^\top A^{-1}b = -\frac{1}{2}\|x^*\|_A^2$$

Полезные соотношения

- Решение: $x^* = A^{-1}b$
- Минимум функции:

$$f^* = \frac{1}{2}b^\top A^{-\top}AA^{-1}b - b^\top A^{-1}b = -\frac{1}{2}b^\top A^{-1}b = -\frac{1}{2}\|x^*\|_A^2$$

- Оценка сходимости по функции:

$$\begin{aligned} f(x) - f^* &= \frac{1}{2}x^\top Ax - b^\top x + \frac{1}{2}\|x^*\|_A^2 \\ &= \frac{1}{2}\|x\|_A^2 - x^\top Ax^* + \frac{1}{2}\|x^*\|_A^2 \\ &= \frac{1}{2}\|x - x^*\|_A^2 \end{aligned}$$

Сходимость

- x_k лежит в $\mathcal{K}_k$

Сходимость

- x_k лежит в $\mathcal{K}_k$
- $x_k = \sum\limits_{i=1}^{k} c_i A^{i-1} b = p(A)b$, где $p(x)$ некоторый полином степени не выше $k-1$

Сходимость

- x_k лежит в $\mathcal{K}_k$
- $x_k = \sum\limits_{i=1}^{k} c_i A^{i-1} b = p(A)b$, где $p(x)$ некоторый полином степени не выше $k-1$
- x_k минимизирует f на $\mathcal{K}_k$, отсюда

$$2(f_k - f^*) = \inf_{x \in \mathcal{K}_k} \|x - x^*\|_A^2 = \inf_{\deg(p) < k} \|(p(A) - A^{-1})b\|_A^2$$

Сходимость

- x_k лежит в $\mathcal{K}_k$
- $x_k = \sum\limits_{i=1}^{k} c_i A^{i-1} b = p(A)b$, где $p(x)$ некоторый полином степени не выше $k-1$
- x_k минимизирует f на $\mathcal{K}_k$, отсюда

$$2(f_k - f^*) = \inf_{x \in \mathcal{K}_k} \|x - x^*\|_A^2 = \inf_{\deg(p) < k} \|(p(A) - A^{-1})b\|_A^2$$

- Спектральное разложение $A = U\Lambda U^*$ даёт

$$\begin{aligned} 2(f_k - f^*) &= \inf_{\deg(p)<k} \|(p(\Lambda) - \Lambda^{-1})d\|_\Lambda^2 \\ &= \inf_{\deg(p)<k} \sum_{i=1}^{n} \frac{d_i^2(\lambda_i p(\lambda_i) - 1)^2}{\lambda_i} \\ &= \inf_{\deg(q) \le k, q(0)=1} \sum_{i=1}^{n} \frac{d_i^2 q(\lambda_i)^2}{\lambda_i} \end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
f_k - f^* &\le \left(\sum_{i=1}^{n} \frac{d_i^2}{2\lambda_i} \right) \inf_{\deg(q) \le k, q(0)=1} \left(\max_{i=1,\ldots,n} q(\lambda_i)^2 \right) \\
&= \frac{1}{2} \|x^*\|_A^2 \inf_{\deg(q) \le k, q(0)=1} \left(\max_{i=1,\ldots,n} q(\lambda_i)^2 \right)
\end{aligned}
$$

- Пусть A имеет m различных собственных значений, тогда для
$$
r(y) = \frac{(-1)^m}{\lambda_1 \cdot \ldots \cdot \lambda_m} (y - \lambda_i) \cdot \ldots \cdot (y - \lambda_m)
$$
выполнено $\deg(r) = m$ и $r(0) = 1$

$$
\begin{aligned}
f_k - f^* &\le \left(\sum_{i=1}^{n} \frac{d_i^2}{2\lambda_i}\right) \inf_{\deg(q)\le k, q(0)=1} \left(\max_{i=1,\dots,n} q(\lambda_i)^2\right) \\
&= \frac{1}{2}\|x^*\|_A^2 \inf_{\deg(q)\le k, q(0)=1} \left(\max_{i=1,\dots,n} q(\lambda_i)^2\right)
\end{aligned}
$$

- Пусть A имеет m различных собственных значений, тогда для
$$
r(y) = \frac{(-1)^m}{\lambda_1 \cdot \ldots \cdot \lambda_m}(y-\lambda_i)\cdot \ldots \cdot (y-\lambda_m)
$$
выполнено $\deg(r) = m$ и $r(0) = 1$
- Значение для оптимального полинома степени не выше k оценим сверху значением для полинома r степени m
$$
0 \le f_k - f^* \le \frac{1}{2}\|x^*\|_A^2 \max_{i=1,\dots,m} r(\lambda_i) = 0
$$

$$
\begin{aligned}
f_k - f^* &\le \left(\sum_{i=1}^{n} \frac{d_i^2}{2\lambda_i}\right) \inf_{\deg(q)\le k, q(0)=1} \left(\max_{i=1,\dots,n} q(\lambda_i)^2\right) \\
&= \frac{1}{2}\|x^*\|_A^2 \inf_{\deg(q)\le k, q(0)=1} \left(\max_{i=1,\dots,n} q(\lambda_i)^2\right)
\end{aligned}
$$

- Пусть A имеет m различных собственных значений, тогда для

$$
r(y) = \frac{(-1)^m}{\lambda_1 \cdot \ldots \cdot \lambda_m}(y - \lambda_i) \cdot \ldots \cdot (y - \lambda_m)
$$

выполнено $\deg(r) = m$ и $r(0) = 1$

- Значение для оптимального полинома степени не выше k оценим сверху значением для полинома r степени m

$$
0 \le f_k - f^* \le \frac{1}{2}\|x^*\|_A^2 \max_{i=1,\dots,m} r(\lambda_i) = 0
$$

- Метод сопряжённых градиентов сошёлся за m итераций

Пример задачи

- $n = 100$
- Спектр A: $\{1, 10, 100, 1000\}$
- $\kappa = 1000$

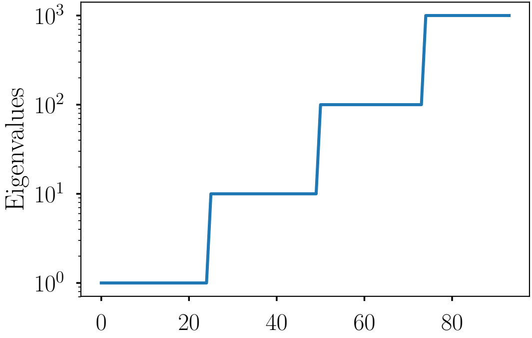
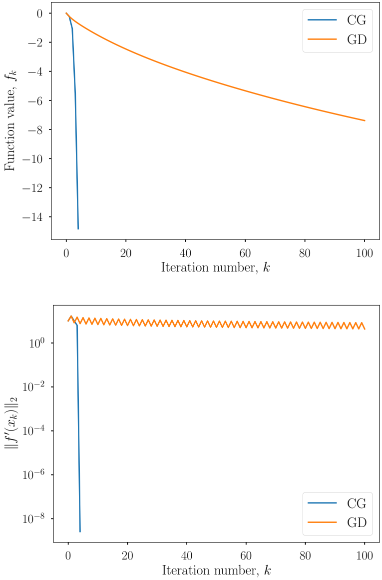


Иллюстрация сходимости



Другие оценки

- Если $q(x)$ – Чебышёвский полином на $[\lambda_{\min}, \lambda_{\max}]$, то

$$f_k - f^* \leq C \left(\frac{\sqrt{\kappa} - 1}{\sqrt{\kappa} - 1} \right)^k$$

- Если $q(x)$ имеет корни $\lambda_1, \ldots, \lambda_{k-1}$ и $(\lambda_1 + \lambda_n)/2$, то

$$f_k - f^* \leq C \left(\frac{\lambda_k - \lambda_n}{\lambda_k + \lambda_n} \right)^2$$

Обобщение на неквадратичную целевую функцию

1. Шаг α_k подбирается адаптивно

Обобщение на неквадратичную целевую функцию

1. Шаг α_k подбирается адаптивно
2. Коэффициент β_k ищется с помощью градиентов $f'(x_{k-1}), f'(x_{k-2})$

Обобщение на неквадратичную целевую функцию

1. Шаг α_k подбирается адаптивно
2. Коэффициент β_k ищется с помощью градиентов $f'(x_{k-1}), f'(x_{k-2})$

Примеры

Обобщение на неквадратичную целевую функцию

1. Шаг α_k подбирается адаптивно
2. Коэффициент β_k ищется с помощью градиентов $f'(x_{k-1}), f'(x_{k-2})$

Примеры

- Метод Флетчера-Ривса (Fletcher-Reeves)

$$\beta_k = \frac{\|f'(x_{k-1})\|_2^2}{\|f'(x_{k-2})\|_2^2}$$

Обобщение на неквадратичную целевую функцию

1. Шаг α_k подбирается адаптивно
2. Коэффициент β_k ищется с помощью градиентов $f'(x_{k-1}), f'(x_{k-2})$

Примеры

- Метод Флетчера-Ривса (Fletcher-Reeves)

$$\beta_k = \frac{\|f'(x_{k-1})\|_2^2}{\|f'(x_{k-2})\|_2^2}$$

- Метод Полака-Рибьера (Polak-Ribière)

$$\beta_k = \frac{\langle f'(x_{k-1}), f'(x_{k-1}) - f'(x_{k-2})\rangle}{\|f'(x_{k-2})\|_2^2}$$

Обобщение на неквадратичную целевую функцию

1. Шаг α_k подбирается адаптивно
2. Коэффициент β_k ищется с помощью градиентов $f'(x_{k-1}), f'(x_{k-2})$

Примеры

- Метод Флетчера-Ривса (Fletcher-Reeves)

$$\beta_k = \frac{\|f'(x_{k-1})\|_2^2}{\|f'(x_{k-2})\|_2^2}$$

- Метод Полака-Рибьера (Polak-Ribière)

$$\beta_k = \frac{\langle f'(x_{k-1}), f'(x_{k-1}) - f'(x_{k-2})\rangle}{\|f'(x_{k-2})\|_2^2}$$

- Метод Хестенса-Штифеля (Hestenes-Stiefel)

$$\beta_k = \frac{\langle f'(x_{k-1}), f'(x_{k-1}) - f'(x_{k-2})\rangle}{\langle p_{k-1}, f'(x_{k-1}) - f'(x_{k-2})\rangle}$$

Особенности неквадратичного случая

- С ростом числа итераций направления p_k могут становится всё более коллинеарными

Особенности неквадратичного случая

- С ростом числа итераций направления p_k могут становится всё более коллинеарными
- Помогают рестарты при выполнении некоторых условий

Особенности неквадратичного случая

- С ростом числа итераций направления p_k могут становится всё более коллинеарными
- Помогают рестарты при выполнении некоторых условий
- При выборе α_k по правилу наискорейшего спуска, p_k – направление убывание

Особенности неквадратичного случая

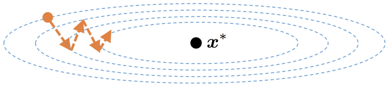
- С ростом числа итераций направления p_k могут становится всё более коллинеарными
- Помогают рестарты при выполнении некоторых условий
- При выборе α_k по правилу наискорейшего спуска, p_k – направление убывание
- НЕ при любом способе адаптивного поиска α_k направление $\alpha_k p_k$ будет направлением убывания

Особенности неквадратичного случая

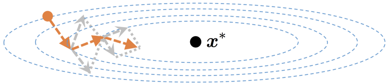
- С ростом числа итераций направления p_k могут становится всё более коллинеарными
- Помогают рестарты при выполнении некоторых условий
- При выборе α_k по правилу наискорейшего спуска, p_k – направление убывание
- НЕ при любом способе адаптивного поиска α_k направление $\alpha_k p_k$ будет направлением убывания
- Интерпретация через квазиньютоновский метод с ограниченной памятью – через две недели

Метод тяжёлого шарика (Б. Т. Поляк, 1964)

$$x_{k+1} = x_k - \alpha_k f'(x_k) + \beta_k(x_k - x_{k-1})$$



gradient descent



heavy-ball method

Рисунок взят отсюда

- Двухшаговый немонотонный метод
- Дискретизация следующего дифференциального уравнения

$$\ddot{x} + b\dot{x} + af'(x) = 0$$

- Метод сопряжённых градиентов — частный случай

Сходимость для сильно выпуклой функции

- Перепишем метод как

$$\begin{bmatrix} x_{k+1} \\ x_k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (1+\beta_k)I & -\beta_k I \\ I & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_k \\ x_{k-1} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -\alpha_k f'(x_k) \\ 0 \end{bmatrix}$$

Сходимость для сильно выпуклой функции

- Перепишем метод как

$$\begin{bmatrix} x_{k+1} \\ x_k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (1+\beta_k)I & -\beta_k I \\ I & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_k \\ x_{k-1} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -\alpha_k f'(x_k) \\ 0 \end{bmatrix}$$

- Используем теорему из анализа

$$\begin{bmatrix} x_{k+1} - x^* \\ x_k - x^* \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} (1+\beta_k)I - \alpha_k \int_0^1 f''(x(\tau))d\tau & -\beta_k I \\ I & 0 \end{bmatrix}}_{=A_t} \begin{bmatrix} x_k - x^* \\ x_{k-1} - x^* \end{bmatrix},$$

где $x(\tau) = x_k + \tau(x^* - x_k)$

Сходимость для сильно выпуклой функции

- Перепишем метод как

$$\begin{bmatrix} x_{k+1} \\ x_k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (1+\beta_k)I & -\beta_k I \\ I & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_k \\ x_{k-1} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -\alpha_k f'(x_k) \\ 0 \end{bmatrix}$$

- Используем теорему из анализа

$$\begin{bmatrix} x_{k+1} - x^* \\ x_k - x^* \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} (1+\beta_k)I - \alpha_k \int_0^1 f''(x(\tau))d\tau & -\beta_k I \\ I & 0 \end{bmatrix}}_{=A_t} \begin{bmatrix} x_k - x^* \\ x_{k-1} - x^* \end{bmatrix},$$

где $x(\tau) = x_k + \tau(x^* - x_k)$

- Сходимость зависит от спектрального радиуса матрицы итераций A_t

Сходимость для сильно выпуклой функции

- Перепишем метод как

$$\begin{bmatrix} x_{k+1} \\ x_k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (1+\beta_k)I & -\beta_k I \\ I & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_k \\ x_{k-1} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -\alpha_k f'(x_k) \\ 0 \end{bmatrix}$$

- Используем теорему из анализа

$$\begin{bmatrix} x_{k+1} - x^* \\ x_k - x^* \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} (1+\beta_k)I - \alpha_k \int_0^1 f''(x(\tau))d\tau & -\beta_k I \\ I & 0 \end{bmatrix}}_{=A_t} \begin{bmatrix} x_k - x^* \\ x_{k-1} - x^* \end{bmatrix},$$

  где $x(\tau) = x_k + \tau(x^* - x_k)$
- Сходимость зависит от спектрального радиуса матрицы итераций A_t
- Выберем α_k и β_k так, чтобы минимизировать спектральный радиус

Выбор параметров

Теорема

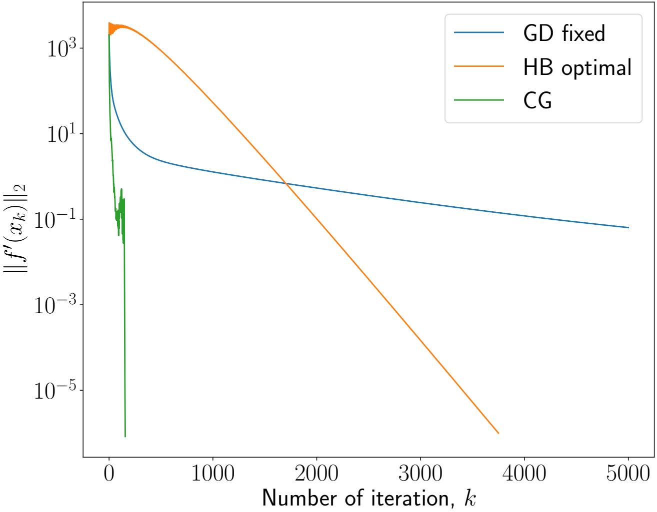
Пусть f выпуклая с Липшицевым градиентом и сильно выпуклая функция. Тогда $\alpha_k = \frac{4}{(\sqrt{L}+\sqrt{\mu})^2}$ и $\beta_k = \max(|1-\sqrt{\alpha_k L}|, |1-\sqrt{\alpha_k \mu}|)^2$ дают

$$\left\| \begin{bmatrix} x_{k+1} - x^* \\ x_k - x^* \end{bmatrix} \right\|_2 \leq \left(\frac{\sqrt{\kappa} - 1}{\sqrt{\kappa} + 1} \right)^k \left\| \begin{bmatrix} x_1 - x^* \\ x_0 - x^* \end{bmatrix} \right\|_2$$

- Параметры зависят от L и μ
- Быстрее чем градиентный спуск
- Аналог CG для сильно выпуклой квадратичной функции

Иллюстрация

- $n = 100$
- Случайная квадратичная задача



Ускоренный градиентный метод (Нестеров, 1983)

Один из вариантов

$$
\begin{aligned}
y_0 &= x_0 \\
x_{k+1} &= y_k - \alpha_k f'(y_k) \\
y_{k+1} &= x_{k+1} + \frac{k}{k+3}(x_{k+1} - x_k)
\end{aligned}
$$

Ускоренный градиентный метод (Нестеров, 1983)

Один из вариантов

$$
\begin{aligned}
y_0 &= x_0 \\
x_{k+1} &= y_k - \alpha_k f'(y_k) \\
y_{k+1} &= x_{k+1} + \frac{k}{k+3}(x_{k+1} - x_k)
\end{aligned}
$$

- Сравнение с методом тяжёлого шарика

Ускоренный градиентный метод (Нестеров, 1983)

Один из вариантов

$$
\begin{aligned}
y_0 &= x_0 \\
x_{k+1} &= y_k - \alpha_k f'(y_k) \\
y_{k+1} &= x_{k+1} + \frac{k}{k+3}(x_{k+1} - x_k)
\end{aligned}
$$

- Сравнение с методом тяжёлого шарика
- Немонотонный

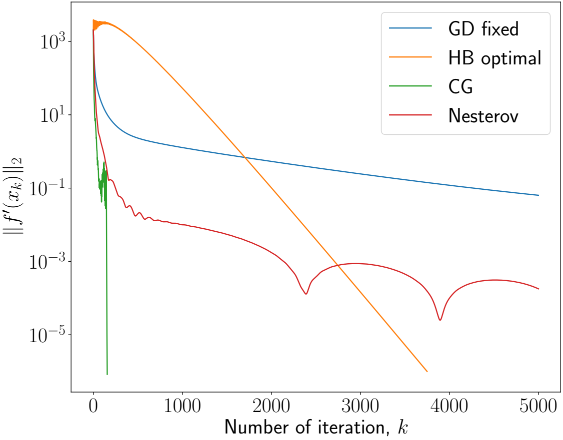
Ускоренный градиентный метод (Нестеров, 1983)

Один из вариантов

$$
\begin{aligned}
&y_0 = x_0 \\
&x_{k+1} = y_k - \alpha_k f'(y_k) \\
&y_{k+1} = x_{k+1} + \frac{k}{k+3}(x_{k+1} - x_k)
\end{aligned}
$$

- Сравнение с методом тяжёлого шарика
- Немонотонный
- Интерпретация как дискретизация некоторого ОДУ

Визуализация итераций



Сходимость

Теорема

Пусть f выпукла с Липшицевым градиентом, а шаг $\alpha_k = \frac{1}{L}$.
Тогда ускоренный градиентый метод сходится как

$$f(x_k) - f^* \leq \frac{2L\|x_0 - x^*\|_2^2}{(k+1)^2} = \mathcal{O}(1/k^2)$$

Сходимость

Теорема

Пусть f выпукла с Липшицевым градиентом, а шаг $\alpha_k = \frac{1}{L}$.
Тогда ускоренный градиентый метод сходится как

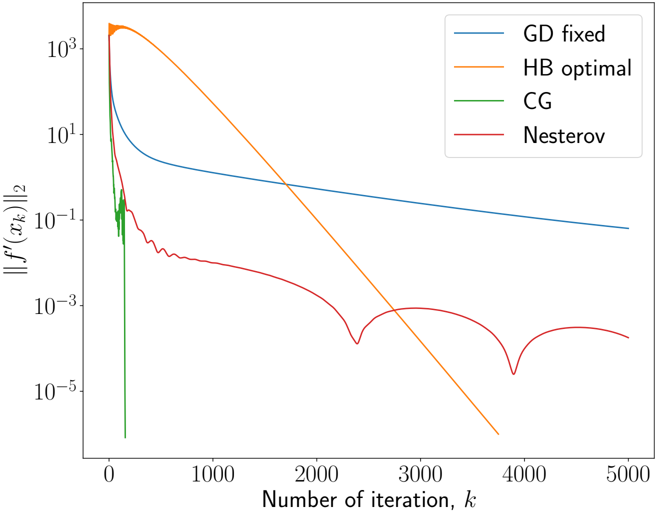
$$f(x_k) - f^* \leq \frac{2L\|x_0 - x^*\|_2^2}{(k+1)^2} = \mathcal{O}(1/k^2)$$

Теорема

Ускоренный метод Нестерова для сильно выпуклой функции при шаге $\alpha_k = \frac{1}{L}$ сходится как

$$f(x_k) - f^* \leq L\|x_k - x_0\|_2^2 \left(1 - \frac{1}{\sqrt{\kappa}}\right)^k$$

Пример сходимости



Что мы знаем?

- Сходимость градиентного спуска может быть улучшена

Что мы знаем?

- Сходимость градиентного спуска может быть улучшена
- Метод сопряжённых градиентов надо использовать для квадратичных сильно выпуклых функций

Что мы знаем?

- Сходимость градиентного спуска может быть улучшена
- Метод сопряжённых градиентов надо использовать для квадратичных сильно выпуклых функций
- Ускоренный метод Нестерова оптимален для выпуклых с Липшицевым градиентом и сильно выпуклых функций

Что мы знаем?

- Сходимость градиентного спуска может быть улучшена
- Метод сопряжённых градиентов надо использовать для квадратичных сильно выпуклых функций
- Ускоренный метод Нестерова оптимален для выпуклых с Липшицевым градиентом и сильно выпуклых функций

Вопросы

Что мы знаем?

- Сходимость градиентного спуска может быть улучшена
- Метод сопряжённых градиентов надо использовать для квадратичных сильно выпуклых функций
- Ускоренный метод Нестерова оптимален для выпуклых с Липшицевым градиентом и сильно выпуклых функций

Вопросы

- Что делать, когда нельзя точно посчитать градиент?

Что мы знаем?

- Сходимость градиентного спуска может быть улучшена
- Метод сопряжённых градиентов надо использовать для квадратичных сильно выпуклых функций
- Ускоренный метод Нестерова оптимален для выпуклых с Липшицевым градиентом и сильно выпуклых функций

Вопросы

- Что делать, когда нельзя точно посчитать градиент?
- Все методы зависят от неизвестных констант, как подбирать шаги адаптивно?

Что мы знаем?

- Сходимость градиентного спуска может быть улучшена
- Метод сопряжённых градиентов надо использовать для квадратичных сильно выпуклых функций
- Ускоренный метод Нестерова оптимален для выпуклых с Липшицевым градиентом и сильно выпуклых функций

Вопросы

- Что делать, когда нельзя точно посчитать градиент?
- Все методы зависят от неизвестных констант, как подбирать шаги адаптивно?
- Что произойдёт со скоростями сходимости?

Резюме

- Метод сопряжённых градиентов

Резюме

- Метод сопряжённых градиентов
- Метод тяжёлого шарика

Резюме

- Метод сопряжённых градиентов
- Метод тяжёлого шарика
- Ускоренный градиентный метод Нестерова