Nelineární optimalizace a numerické metody

(MI–NON)

Magisterský program: Informatika

Obor: Teoretická informatika

Katedra: 18101 Katedra teoretické informatiky

Jaroslav Kruis

Evropský sociální fond

Praha & EU: Investujeme do vaší budoucnosti

Metoda sdružených gradientů

Nechť je dána kvadratická funkce n proměnných ve tvaru

$$f(\boldsymbol{x}) \;=\; \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{b}$$

kde $\boldsymbol{A} \in R^{n\times n}$ je symetrická pozitivně definitní matice a vektor $\boldsymbol{b} \in R^n$. Hledání minima lze provést metodou sdružených gradientů. Na rozdíl od metody největšího spádu se směr minimalizace nevolí totožný s vektorem rezidua, ale určuje se pomocí dodatečné podmínky.

Vzhledem k významu metody sdružených gradientů bude provedeno poměrně podrobné odvození.

Volí se počáteční aproximace $\boldsymbol{x}_0$ přesného řešení $\bar{\boldsymbol{x}}$. Počáteční reziduum má tvar $\boldsymbol{r}_0 = \boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_0$. Nová aproximace řešení se volí ve tvaru

$$\boldsymbol{x}_1 = \boldsymbol{x}_0 + \alpha_0 \boldsymbol{s}_0$$

kde $\boldsymbol{s}_0$ je vektor směru. Počáteční vektor $\boldsymbol{s}_0$ se volí roven vektoru rezidua, tedy $\boldsymbol{s}_0 = \boldsymbol{r}_0$. Dosazením vektoru $\boldsymbol{x}_1$ do kvadratické funkce vychází

$$f(\boldsymbol{x}_1) = \frac{1}{2}\boldsymbol{x}_0^T \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_0 + \alpha_0 \boldsymbol{x}_0^T \boldsymbol{A}\boldsymbol{s}_0 + \frac{1}{2}\alpha_0^2 \boldsymbol{s}_0^T \boldsymbol{A}\boldsymbol{s}_0 - \boldsymbol{x}_0^T \boldsymbol{b} - \alpha_0 \boldsymbol{s}_0^T \boldsymbol{b}$$

Z podmínky stacionarity plyne

$$\frac{\mathrm{d} f(\boldsymbol{x}_1)}{\mathrm{d}\alpha_0} = \boldsymbol{x}_0^T \boldsymbol{A}\boldsymbol{s}_0 + \alpha_0 \boldsymbol{s}_0^T \boldsymbol{A}\boldsymbol{s}_0 - \boldsymbol{s}_0^T \boldsymbol{b} = 0 \quad \Rightarrow \quad \alpha_0 = \frac{\boldsymbol{s}_0^T \boldsymbol{r}_0}{\boldsymbol{s}_0^T \boldsymbol{A}\boldsymbol{s}_0}$$

Pro další úvahy je užitečné vypočítat hodnotu kvadratické funkce pro $\boldsymbol{x}_1$, vychází

$$\begin{aligned} f(\boldsymbol{x}_1) &= \frac{1}{2}\boldsymbol{x}_0^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_0 - \boldsymbol{x}_0^T\boldsymbol{b} + \alpha_0\boldsymbol{s}_0^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_0 + \frac{1}{2}\alpha_0^2\boldsymbol{s}_0^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{s}_0 - \alpha_0\boldsymbol{s}_0^T\boldsymbol{b} = \\ &= f(\boldsymbol{x}_0) - \frac{1}{2}\frac{(\boldsymbol{s}_0^T\boldsymbol{r}_0)^2}{\boldsymbol{s}_0^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{s}_0} \end{aligned}$$

Další aproximace má tvar

$$\boldsymbol{x}_2 = \boldsymbol{x}_0 + \alpha_0\boldsymbol{s}_0 + \alpha_1\boldsymbol{s}_1$$

Nyní je vektor $\boldsymbol{s}_1$ neznámý a je třeba ho určit.

Dosazením vektoru $\boldsymbol{x}_2$ do kvadratické funkce vychází

$$
\begin{aligned}
f(\boldsymbol{x}_2) &= \frac{1}{2}\boldsymbol{x}_0^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_0 + \alpha_0\boldsymbol{x}_0^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{s}_0 + \frac{1}{2}\alpha_0^2\boldsymbol{s}_0^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{s}_0 - \boldsymbol{x}_0^T\boldsymbol{b} - \alpha_0\boldsymbol{s}_0^T\boldsymbol{b} + \\
&+ \alpha_1\boldsymbol{x}_0^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{s}_1 + \alpha_0\alpha_1\boldsymbol{s}_0^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{s}_1 + \frac{1}{2}\alpha_1^2\boldsymbol{s}_1^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{s}_1 - \alpha_1\boldsymbol{s}_1^T\boldsymbol{b}
\end{aligned}
$$

S uvážením vztahů pro α_0 a $\boldsymbol{r}_0$ a s ohledem na volbu $\boldsymbol{s}_0$ lze předcházející výraz upravit do tvaru

$$
\begin{aligned}
f(\boldsymbol{x}_2) &= f(\boldsymbol{x}_0) - \frac{1}{2}\frac{(\boldsymbol{s}_0^T\boldsymbol{r}_0)^2}{\boldsymbol{s}_0^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{s}_0} + \alpha_0\alpha_1\boldsymbol{s}_0^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{s}_1 + \frac{1}{2}\alpha_1^2\boldsymbol{s}_1^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{s}_1 - \alpha_1\boldsymbol{s}_1^T\boldsymbol{r}_0 \\
&= f(\boldsymbol{x}_1) + \alpha_0\alpha_1\boldsymbol{s}_0^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{s}_1 + \frac{1}{2}\alpha_1^2\boldsymbol{s}_1^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{s}_1 - \alpha_1\boldsymbol{s}_1^T\boldsymbol{r}_0
\end{aligned}
$$

Bude-li zvolen vektor $\boldsymbol{s}_1$ tzv. $\boldsymbol{A}$-ortogonální k vektoru $\boldsymbol{s}_0$, tj. bude-li platit $\boldsymbol{s}_1^T \boldsymbol{A} \boldsymbol{s}_0 = 0$, bude mít výraz pro α_1 tvar

$$\alpha_1 = \frac{\boldsymbol{s}_1^T \boldsymbol{r}_0}{\boldsymbol{s}_1^T \boldsymbol{A} \boldsymbol{s}_1}$$

Úpravami vycházejí důležité vztahy

$$\boldsymbol{x}_1 = \boldsymbol{x}_0 + \alpha_0 \boldsymbol{s}_0 \qquad \Rightarrow \qquad \boldsymbol{x}_1 - \boldsymbol{x}_0 = \alpha_0 \boldsymbol{s}_0$$

proto platí

$$\boldsymbol{s}_1^T \boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}_1 - \boldsymbol{x}_0) = \alpha_0 \boldsymbol{s}_1^T \boldsymbol{A} \boldsymbol{s}_0 = 0$$

a dále

$$\boldsymbol{s}_1^T \boldsymbol{A} \boldsymbol{x}_1 - \boldsymbol{s}_1^T \boldsymbol{A} \boldsymbol{x}_0 = \boldsymbol{s}_1^T \boldsymbol{A} \boldsymbol{x}_1 - \boldsymbol{s}_1^T \boldsymbol{A} \boldsymbol{x}_0 + \boldsymbol{s}_1^T \boldsymbol{b} - \boldsymbol{s}_1^T \boldsymbol{b} =$$
$$\boldsymbol{s}_1^T (\boldsymbol{b} - \boldsymbol{A} \boldsymbol{x}_0) - \boldsymbol{s}_1^T (\boldsymbol{b} - \boldsymbol{A} \boldsymbol{x}_1) = \boldsymbol{s}_1^T \boldsymbol{r}_0 - \boldsymbol{s}_1^T \boldsymbol{r}_1 = 0$$

Platí tedy důležitý vztah

$$\boldsymbol{s}_1^T \boldsymbol{r}_0 = \boldsymbol{s}_1^T \boldsymbol{r}_1$$

s jehož pomocí lze přepsat výraz pro α_1 do tvaru

$$\alpha_1 = \frac{\boldsymbol{s}_1^T \boldsymbol{r}_1}{\boldsymbol{s}_1^T \boldsymbol{A} \boldsymbol{s}_1}$$

Další aproximace je ve tvaru

$$\boldsymbol{x}_3 = \boldsymbol{x}_0 + \alpha_0 \boldsymbol{s}_0 + \alpha_1 \boldsymbol{s}_1 + \alpha_2 \boldsymbol{s}_2$$

Dosazením do kvadratické funkce vychází

$$
\begin{aligned}
& f(\boldsymbol{x}_3) = \\
= \quad & \frac{1}{2}\boldsymbol{x}_0^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_0 + \frac{1}{2}\alpha_0\boldsymbol{x}_0^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{s}_0 + \frac{1}{2}\alpha_1\boldsymbol{x}_0^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{s}_1 + \frac{1}{2}\alpha_2\boldsymbol{x}_0^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{s}_2 + \\
+ \quad & \frac{1}{2}\alpha_0\boldsymbol{s}_0^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_0 + \frac{1}{2}\alpha_0^2\boldsymbol{s}_0^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{s}_0 + \frac{1}{2}\alpha_0\alpha_1\boldsymbol{s}_0^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{s}_1 + \frac{1}{2}\alpha_0\alpha_2\boldsymbol{s}_0^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{s}_2 + \\
+ \quad & \frac{1}{2}\alpha_1\boldsymbol{s}_1^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_0 + \frac{1}{2}\alpha_1\alpha_0\boldsymbol{s}_1^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{s}_0 + \frac{1}{2}\alpha_1^2\boldsymbol{s}_1^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{s}_1 + \frac{1}{2}\alpha_1\alpha_2\boldsymbol{s}_1^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{s}_2 + \\
+ \quad & \frac{1}{2}\alpha_2\boldsymbol{s}_2^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_0 + \frac{1}{2}\alpha_2\alpha_0\boldsymbol{s}_2^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{s}_0 + \frac{1}{2}\alpha_2\alpha_1\boldsymbol{s}_2^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{s}_1 + \frac{1}{2}\alpha_2^2\boldsymbol{s}_2^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{s}_2 - \\
- \quad & \boldsymbol{x}_0^T\boldsymbol{b} - \alpha_0\boldsymbol{s}_0^T\boldsymbol{b} - \alpha_1\boldsymbol{s}_1^T\boldsymbol{b} - \alpha_2\boldsymbol{s}_2^T\boldsymbol{b}
\end{aligned}
$$

S ohledem na $\boldsymbol{A}$-ortogonalitu směrových vektorů $\boldsymbol{s}_i$, vztahů pro α_i a definici rezidua platí

$$\begin{aligned} f(\boldsymbol{x}_3) &= f(\boldsymbol{x}_0) - \frac{(\boldsymbol{s}_0^T \boldsymbol{r}_0)^2}{2\boldsymbol{s}_0^T \boldsymbol{A} \boldsymbol{s}_0} - \frac{(\boldsymbol{s}_1^T \boldsymbol{r}_1)^2}{2\boldsymbol{s}_1^T \boldsymbol{A} \boldsymbol{s}_1} + \\ &+ \alpha_2 \boldsymbol{s}_2^T \boldsymbol{A} \boldsymbol{x}_0 + \frac{1}{2}\alpha_2^2 \boldsymbol{s}_2^T \boldsymbol{A} \boldsymbol{s}_2 - \alpha_2 \boldsymbol{s}_2^T \boldsymbol{b} \end{aligned}$$

odkud vychází

$$\alpha_2 = \frac{\boldsymbol{s}_2^T \boldsymbol{r}_0}{\boldsymbol{s}_2^T \boldsymbol{A} \boldsymbol{s}_2}$$

Úpravami vycházejí důležité vztahy

$$\boldsymbol{x}_2 - \boldsymbol{x}_0 = \alpha_0 \boldsymbol{s}_0 + \alpha_1 \boldsymbol{s}_1$$

proto platí

$$\boldsymbol{s}_2^T \boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}_2 - \boldsymbol{x}_0) = \alpha_0 \boldsymbol{s}_2^T \boldsymbol{A} \boldsymbol{s}_0 + \alpha_1 \boldsymbol{s}_2^T \boldsymbol{A} \boldsymbol{s}_1 = 0$$

a dále

$$\boldsymbol{s}_2^T \boldsymbol{A} \boldsymbol{x}_2 - \boldsymbol{s}_2^T \boldsymbol{A} \boldsymbol{x}_0 = \boldsymbol{s}_2^T \boldsymbol{r}_0 - \boldsymbol{s}_2^T \boldsymbol{r}_2 = 0$$

výraz pro α_2 lze proto přepsat do tvaru

$$\alpha_2 = \frac{\boldsymbol{s}_2^T \boldsymbol{r}_2}{\boldsymbol{s}_2^T \boldsymbol{A} \boldsymbol{s}_2}$$

Obecně platí

$$\boldsymbol{x}_k = \boldsymbol{x}_0 + \sum_{i=0}^{i=k-1} \alpha_i \boldsymbol{s}_i \quad \Rightarrow \quad \boldsymbol{x}_k - \boldsymbol{x}_0 = \sum_{i=0}^{i=k-1} \alpha_i \boldsymbol{s}_i$$

proto

$$\boldsymbol{s}_k^T \boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}_k - \boldsymbol{x}_0) = \sum_{i=0}^{i=k-1} \alpha_i \boldsymbol{s}_k^T \boldsymbol{A} \boldsymbol{s}_i = 0$$

a dále pak

$$\boldsymbol{s}_k^T \boldsymbol{r}_0 - \boldsymbol{s}_k^T \boldsymbol{r}_k = 0 \quad \Rightarrow \quad \boldsymbol{s}_k^T \boldsymbol{r}_0 = \boldsymbol{s}_k^T \boldsymbol{r}_k$$

Věta. Nechť je dán vektor $\boldsymbol{x}_0$. Potom pro každé $i < k$ platí $\boldsymbol{s}_i^T \boldsymbol{r}_k = 0$.

Důkaz.

$$\boldsymbol{s}_i^T \boldsymbol{r}_k \;=\; \boldsymbol{s}_i^T (\boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_k) = \boldsymbol{s}_i^T \left(\boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_0 - \sum_{j=0}^{j=k-1} \alpha_j \boldsymbol{A}\boldsymbol{s}_j \right)$$

S ohledem na ortogonalitu směrových vektorů platí

$$\boldsymbol{s}_i^T \boldsymbol{r}_k \;=\; \boldsymbol{s}_i^T \boldsymbol{r}_0 - \alpha_i \boldsymbol{s}_i^T \boldsymbol{A}\boldsymbol{s}_i = \boldsymbol{s}_i^T \boldsymbol{r}_0 - \frac{\boldsymbol{s}_i^T \boldsymbol{r}_0}{\boldsymbol{s}_i^T \boldsymbol{A}\boldsymbol{s}_i} \boldsymbol{s}_i^T \boldsymbol{A}\boldsymbol{s}_i = 0$$

Věta. Platí $\boldsymbol{r}_k^T \boldsymbol{s}_k = \boldsymbol{r}_k^T \boldsymbol{r}_k$

Důkaz. Přenásobením vztahu pro nový směrový vektor

$$\boldsymbol{s}_{k+1} = \boldsymbol{r}_{k+1} + \beta_k \boldsymbol{s}_k$$

vektorem $\boldsymbol{r}_{k+1}^T$ zleva vychází

$$\boldsymbol{r}_{k+1}^T \boldsymbol{s}_{k+1} = \boldsymbol{r}_{k+1}^T \boldsymbol{r}_{k+1} + \beta_k \boldsymbol{r}_{k+1}^T \boldsymbol{s}_k = \boldsymbol{r}_{k+1}^T \boldsymbol{r}_{k+1}$$

protože platí předcházející věta.

volba počáteční aproximace $\boldsymbol{x}_0$

výpočet počátečního rezidua $\boldsymbol{r}_0 = \boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_0$

nastavení počátečního směrového vektoru $\boldsymbol{s}_0 = \boldsymbol{r}_0$

iterace $k = 0, 1, \ldots$

$$\alpha_k = \frac{\boldsymbol{r}_k^T \boldsymbol{r}_k}{\boldsymbol{s}_k^T \boldsymbol{A} \boldsymbol{s}_k}$$

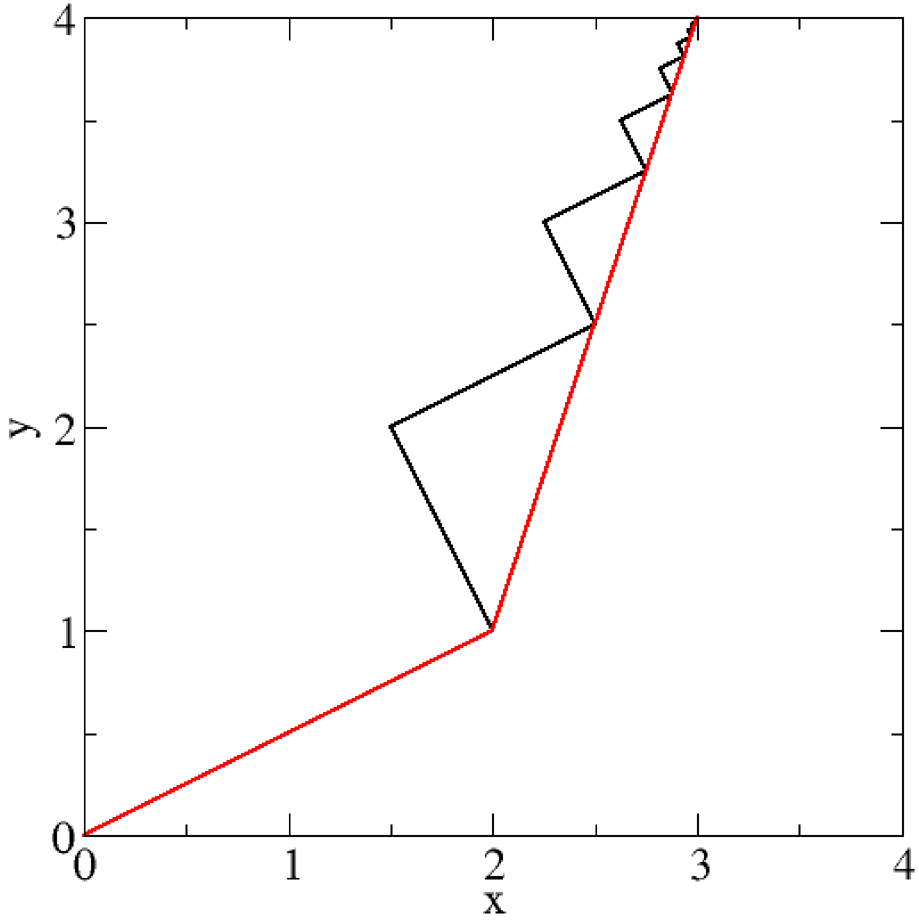
$$\boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{x}_k + \alpha_k \boldsymbol{s}_k$$

$$\boldsymbol{r}_{k+1} = \boldsymbol{r}_k - \alpha_k \boldsymbol{A} \boldsymbol{s}_k$$

pokud $\|\boldsymbol{r}_{k+1}\| < \varepsilon$, konec iterace

$$\beta_k = \frac{\boldsymbol{r}_{k+1}^T \boldsymbol{r}_{k+1}}{\boldsymbol{r}_k^T \boldsymbol{r}_k}$$

$$\boldsymbol{s}_{k+1} = \boldsymbol{r}_{k+1} + \beta_k \boldsymbol{s}_k$$



0
1
2
3
4
x
y