

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:

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

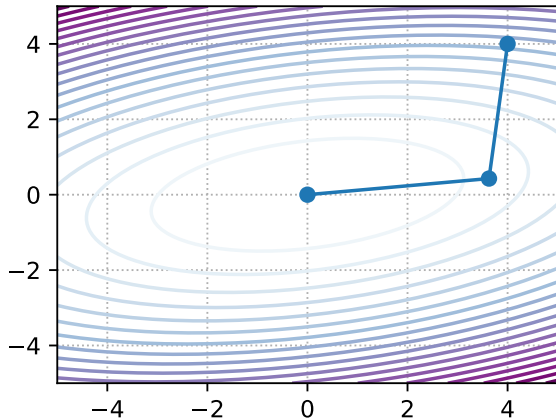
Условия оптимальности:

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

Steepest Descent



Conjugate Gradient



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 $f(x_k + \alpha_k d_k)$:

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

- 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 $f(x_k + \alpha_k d_k)$:

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

- 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:

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

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 $f(x_k + \alpha_k d_k)$:

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

- 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:

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

- 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 α_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:

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

Найдём аналитическое выражение для шага α_k :

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

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

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

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:

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

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:

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

💡 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-ортogonalность

v_1 and v_2 are orthogonal

$$v_1^T v_2 = 0.00$$

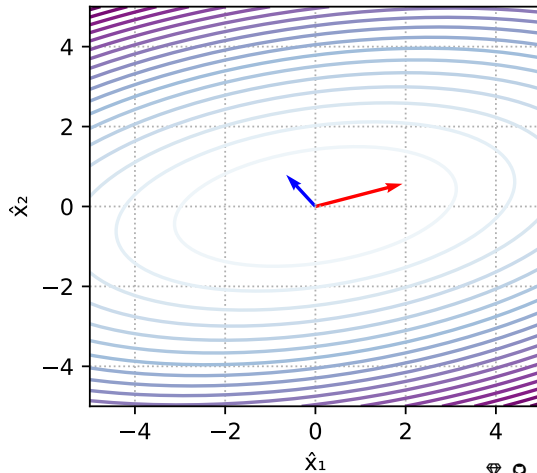
$$v_1^T A v_2 = 1.19$$



\hat{v}_1 and \hat{v}_2 are A-orthogonal

$$\hat{v}_1^T \hat{v}_2 = -0.80$$

$$\hat{v}_1^T A \hat{v}_2 = -0.00$$



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 $\alpha_i = -\frac{d_i^\top (Ax_i - b)}{d_i^\top A d_i}$, 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:

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

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, $r_i^\top r_k = 0, \forall i \neq k$ (**Лемма 5** из лекции).

Метод сопряжённых градиентов на практике

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

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

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, $r_i^\top r_k = 0, \forall i \neq k$ (**Лемма 5** из лекции).

Выведем выражение для β_k :

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

Метод сопряжённых градиентов на практике

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

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

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, $r_i^\top r_k = 0, \forall i \neq k$ (**Лемма 5** из лекции).

Выведем выражение для β_k :

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

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

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

Метод сопряжённых градиентов на практике

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

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

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, $r_i^\top r_k = 0, \forall i \neq k$ (**Лемма 5** из лекции).

Выведем выражение для β_k :

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

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

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

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

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

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:

$$x_{k+1} - x_k = c d_k,$$

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

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 .