

# Методы оптимизации

## Дополнительный материал 3: Методы сопряженных градиентов

ВМК, осень 2018

## Метод сопряженных градиентов (CG). Общая схема

Решаемая задача:  $Ax = b$ , где  $A \in \mathbb{S}_{++}^n$ ,  $b \in \mathbb{R}^n$ .

Эквивалентно:  $f(x) := \frac{1}{2}\langle Ax, x \rangle - \langle b, x \rangle \rightarrow \min_{x \in \mathbb{R}^n}$ .

- ▶ Метод спуска:  $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$ .
- ▶ Для квадратичной функции можно аналитически найти

$$\alpha_k = \operatorname{argmin}_{\alpha \geq 0} f(x_k + \alpha d_k) = \frac{-\langle g_k, d_k \rangle}{\langle Ad_k, d_k \rangle}, \quad g_k := Ax_k - b$$

Сопряженные направления:  $\langle Ad_i, d_j \rangle = 0$  для  $i \neq j$ .

Возможные варианты:

- ▶ Ортогональные собственные векторы  $q_1, \dots, q_n$  матрицы  $A$ .
- ▶ Любые л.н.з. векторы + модифицированный процесс Грамма-Шмидта.

Это все неэффективно для больших матриц!

## Метод сопряженных градиентов (CG). Общая схема – 2

Основная идея: строить  $d_k$  онлайн (в итерациях алгоритма):

▶ Пусть уже есть  $d_0, \dots, d_k$ , т. ч.  $\langle Ad_i, d_j \rangle = 0$  для  $i \neq j$ .

▶ Ищем  $d_{k+1}$  как линейную комбинацию  $g_{k+1}$  и  $d_k$ :

$$d_{k+1} = -g_{k+1} + \beta_k d_k.$$

▶ Коэффициент  $\beta_k$  найдем из условия сопряженности:

$$0 = \langle Ad_k, d_{k+1} \rangle = -\langle d_k, Ag_{k+1} \rangle + \beta_k \langle Ad_k, d_k \rangle.$$

Отсюда

$$\beta_k = \frac{\langle Ad_k, g_{k+1} \rangle}{\langle Ad_k, d_k \rangle}.$$

▶ Таким образом мы обеспечили лишь  $\langle Ad_k, d_{k+1} \rangle = 0$ .

Оказывается, что если выбрать  $d_0 = -g_0$  (это важно!), то автоматически будет  $\langle Ad_i, d_{k+1} \rangle = 0$  для  $i < k$ .

## Метод сопряженных градиентов (CG). Общая схема – 3

### Метод сопряженных градиентов (неэффективная версия):

- |  |   |
|--|---|
| 1. $g_k \leftarrow Ax_k - b$   | 4. $g_{k+1} \leftarrow Ax_{k+1} - b$  |
| 2. $\alpha_k \leftarrow \frac{-\langle g_k, d_k \rangle}{\langle Ad_k, d_k \rangle}$ | 5. $\beta_k \leftarrow \frac{\langle g_{k+1}, Ad_k \rangle}{\langle Ad_k, d_k \rangle}$ |
| 3. $x_{k+1} \leftarrow x_k + \alpha_k d_k$   | 6. $d_{k+1} \leftarrow -g_{k+1} + \beta_k d_k$  |

► Недостаток: **три** матрично-векторных произведения.

Устраним этот недостаток:

1. Важное свойство CG:  $\langle g_i, g_{k+1} \rangle = 0$  и  $\langle g_{k+1}, d_i \rangle = 0$  для  $i \leq k$ .
2. Заметим, что  $g_{k+1} = A(x_k + \alpha_k d_k) - b = g_k + \alpha_k Ad_k$ .
3. Отсюда  $Ad_k = \alpha_k^{-1}(g_{k+1} - g_k)$ . Значит,

$$\begin{aligned}\beta_k &= \frac{\langle g_{k+1} - g_k, g_{k+1} \rangle}{\langle g_{k+1} - g_k, d_k \rangle} = \frac{\|g_{k+1}\|^2}{-\langle g_k, d_k \rangle} \\ &= \frac{\|g_{k+1}\|^2}{-\langle -g_k + \beta_{k-1} d_{k-1}, g_k \rangle} = \frac{\|g_{k+1}\|^2}{\|g_k\|^2}\end{aligned}$$

4. Аналогично  $\alpha_k = \frac{\|g_k\|^2}{\langle Ad_k, d_k \rangle}$ .

## Метод сопряженных градиентов (CG). Общая схема – 4

**Метод сопряженных градиентов (эффективная версия):**

$$g_0 \leftarrow Ax_0 - b$$

$$d_0 \leftarrow -g_0$$

$$k \leftarrow 0$$

**while**  $\|g_k\| > \varepsilon \|b\|$  **do**

$$\alpha_k \leftarrow \frac{\|g_k\|^2}{\langle Ad_k, d_k \rangle}$$

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

$$g_{k+1} \leftarrow g_k + \alpha_k Ad_k$$

$$\beta_k \leftarrow \frac{\|g_{k+1}\|^2}{\|g_k\|^2}$$

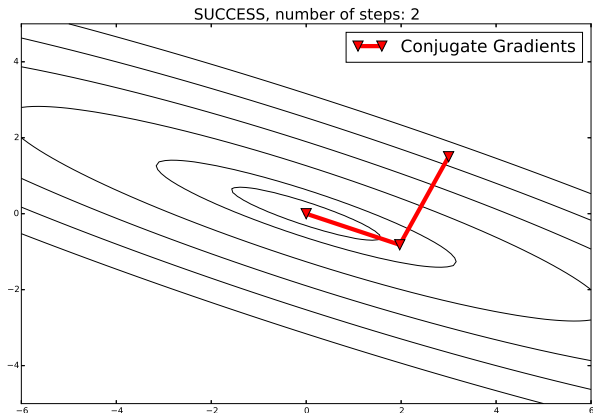
$$d_{k+1} \leftarrow -g_{k+1} + \beta_k d_k$$

$$k \leftarrow k + 1$$

**end while**

- ▶ Одно матрично-векторное произведение за итерацию!

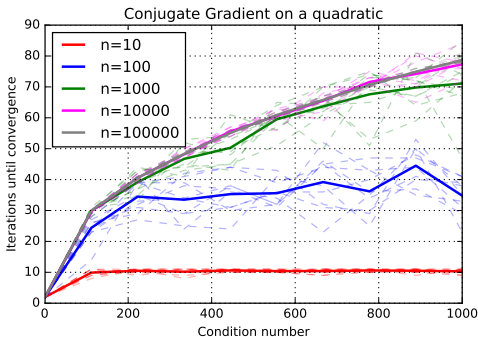
# Метод сопряженных градиентов: траектория



- ▶ Всегда  $\leq 2$  итерации в двумерном случае.

# Зависимость от обусловленности и размерности задачи

$$A = \text{Diag}(a), \quad b \equiv \mathcal{N}(0, I_n), \quad a_i = \begin{cases} 1, & i = 1 \\ \text{Unif}(1, \kappa), & 2 \leq i \leq n-1 \\ \kappa, & i = n \end{cases}$$

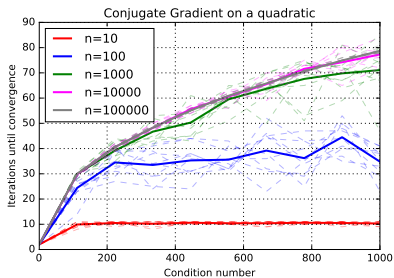
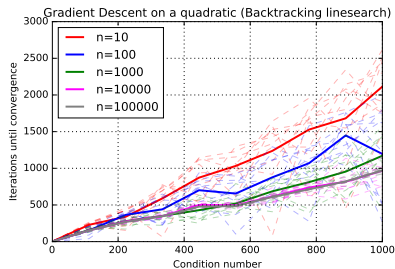


- ▶ Всегда  $\leq n$  итераций (м.б. чуть больше из-за погрешностей).
- ▶ В худшем случае:  $O(\sqrt{\kappa})$  ( $\kappa$  — число обусловленности).
- ▶ С ростом размерности число итераций не увеличивается!

# Сравнение СГ с градиентным спуском

Квадратичная функция:  $f(x) = \frac{1}{2} \langle Ax, x \rangle - \langle b, x \rangle$ .

$$A = \text{Diag}(a), \quad b \equiv \mathcal{N}(0, I_n), \quad a_i = \begin{cases} 1, & i = 1 \\ \text{Unif}(1, \kappa), & 2 \leq i \leq n-1 \\ \kappa, & i = n \end{cases}$$



- ▶  $O(\kappa)$  против  $O(\sqrt{\kappa})$  ( $\kappa$  — число обусловленности).
- ▶ Огромная разница уже даже при небольших  $\kappa$ !



# Предобуславливание в методе сопряженных градиентов

**Оригинальная задача:**  $Ax = b$ , где  $A \in \mathbb{S}_{++}^n$ ,  $b \in \mathbb{R}^n$ .

- ▶ Выполним эквивалентное преобразование системы:

$$Ax = b \Leftrightarrow (S^{-T}AS^{-1})(Sx) = S^{-T}b,$$

где  $S \in \mathbb{R}^{n \times n}$  — невырожденная матрица.

**Новая задача:**  $\tilde{A}\tilde{x} = \tilde{b}$ , где  $\tilde{A} := S^{-T}AS^{-1}$ ,  $\tilde{b} := S^{-T}b$ .

- ▶ Решение исходной системы:  $x = S^{-1}\tilde{x}$ .

Предобуславливатель:  $M := S^T S$ .

- ▶ Идеальный предобуславливатель:  $M \approx A$

$$\tilde{A} \approx S^{-T}(S^T S)S^{-1} = I_n$$

В этом случае сходимость будет примерно за одну итерацию.

## Схема предобусловленного CG

### Обычный CG:

$$g_0 \leftarrow Ax_0 - b$$

$$d_0 \leftarrow -g_0$$

$$k \leftarrow 0$$

**while**  $\|g_k\| > \varepsilon\|b\|$  **do**

$$\alpha_k \leftarrow \frac{\|g_k\|^2}{\langle Ad_k, d_k \rangle}$$

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

$$g_{k+1} \leftarrow g_k + \alpha_k Ad_k$$

$$\beta_k \leftarrow \frac{\|g_{k+1}\|^2}{\|g_k\|^2}$$

$$d_{k+1} \leftarrow -g_{k+1} + \beta_k d_k$$

$$k \leftarrow k + 1$$

**end while**

### Предобусловленный CG:

$$g_0 \leftarrow Ax_0 - b$$

$$d_0 \leftarrow -M^{-1}g_0$$

$$k \leftarrow 0$$

**while**  $\|g_k\| > \varepsilon\|b\|$  **do**

$$\alpha_k \leftarrow \frac{\langle M^{-1}g_k, g_k \rangle}{\langle Ad_k, d_k \rangle}$$

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

$$g_{k+1} \leftarrow g_k + \alpha_k Ad_k$$

$$\beta_k \leftarrow \frac{\langle M^{-1}g_{k+1}, g_{k+1} \rangle}{\langle M^{-1}g_k, g_k \rangle}$$

$$d_{k+1} \leftarrow -M^{-1}g_{k+1} + \beta_k d_k$$

$$k \leftarrow k + 1$$

**end while**

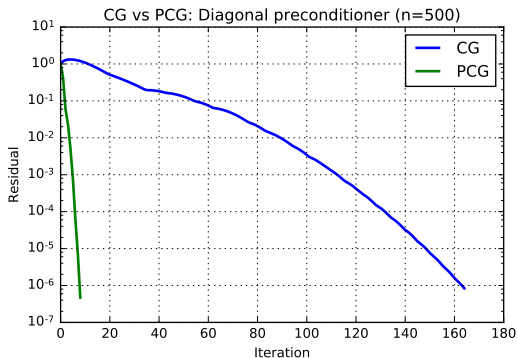
- ▶ Дополнительно нужна процедура вычисления  $M^{-1}g_k$ .
- ▶ Обычно применяют для хорошо структурированных  $M$ .
  - ▶ Примеры: диагональная, ленточная, разреженная и т. д.

# Предобуславливание: пример

- ▶ Система  $Ax = b$  размера  $n = 500$ , где  $b := (1, \dots, 1)$  и

$$a_{ij} := \begin{cases} 1 + i^{1.2} & \text{если } i = j \\ 1 & \text{если } |i - j| = 1 \text{ или } |i - j| = 100 \\ 0 & \text{иначе} \end{cases}$$

- ▶ Диагональный предобуславливатель:  $M := \text{Diag}(A)$ .



- ▶ Хороший предобуславливатель существенно ускоряет метод.

# Нелинейный метод СГ. Версия Флетчера–Ривса

## Обычный СГ:

$$g_0 \leftarrow Ax_0 - b$$

$$d_0 \leftarrow -g_0$$

$$k \leftarrow 0$$

**while**  $\|g_k\| > \varepsilon \|b\|$  **do**

$$\alpha_k \leftarrow \frac{\|g_k\|^2}{\langle Ad_k, d_k \rangle}$$

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

$$g_{k+1} \leftarrow g_k + \alpha_k Ad_k$$

$$\beta_k \leftarrow \frac{\langle g_{k+1}, g_{k+1} \rangle}{\|g_k\|^2}$$

$$d_{k+1} \leftarrow -g_{k+1} + \beta_k d_k$$

$$k \leftarrow k + 1$$

**end while**

## Метод Флетчера–Ривса:

$$g_0 \leftarrow \nabla f(x_0)$$

$$d_0 \leftarrow -g_0$$

$$k \leftarrow 0$$

**while**  $\|g_k\| > \varepsilon \|\nabla f(x_0)\|$  **do**

$$\alpha_k \leftarrow \{\text{линейный поиск}\}$$

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

$$g_{k+1} \leftarrow \nabla f(x_{k+1})$$

$$\beta_k \leftarrow \frac{\|g_{k+1}\|^2}{\|g_k\|^2}$$

$$d_{k+1} \leftarrow -g_{k+1} + \beta_k d_k$$

$$k \leftarrow k + 1$$

**end while**

## Другие схемы нелинейного метода CG

Существует много версий нелинейного CG. Все они отличаются лишь выбором коэффициента  $\beta_k$ :

Полак–Рибье: 
$$\beta_k^{\text{PR}} := \frac{\langle \mathbf{g}_{k+1}, \mathbf{y}_k \rangle}{\|\mathbf{g}_k\|^2}$$

Хестинс–Штифель: 
$$\beta_k^{\text{HS}} := \frac{\langle \mathbf{g}_{k+1}, \mathbf{y}_k \rangle}{\langle \mathbf{d}_k, \mathbf{y}_k \rangle}$$

Полак–Рибье+: 
$$\beta_k^{\text{PR}+} := \max\{0, \beta_k^{\text{PR}}\}$$

Гильберт–Ноусидаль: 
$$\beta_k^{\text{GN}} := \max\{-\beta_k^{\text{FR}}, \min\{\beta_k^{\text{PR}}, \beta_k^{\text{FR}}\}\}$$

Дай–Юань: 
$$\beta_k^{\text{DY}} := \frac{\|\mathbf{g}_{k+1}\|^2}{\langle \mathbf{d}_k, \mathbf{y}_k \rangle}$$

Агер–Джан: 
$$\beta_k^{\text{HZ}} := \frac{\langle \mathbf{g}_{k+1}, \mathbf{y}_k - \frac{2\|\mathbf{y}_k\|^2}{\langle \mathbf{d}_k, \mathbf{y}_k \rangle} \mathbf{d}_k \rangle}{\langle \mathbf{d}_k, \mathbf{y}_k \rangle}$$

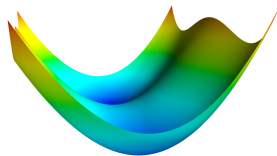
Во всех формулах  $\mathbf{y}_k := \mathbf{g}_{k+1} - \mathbf{g}_k$ .

- ▶ Все эти схемы совпадают на строго выпуклой квадратичной функции.
- ▶ На неквадратичной функции их поведение различается.

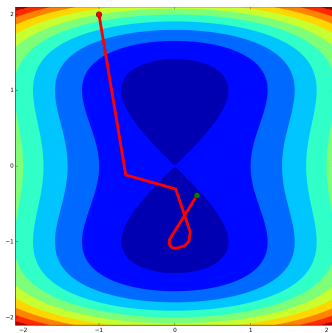
## Флетчер–Ривс и направление спуска

- ▶ В общем случае метод Флетчера–Ривса не гарантирует того, что направление  $d_k$  является направлением спуска.
- ▶ Однако можно доказать, что если в линейном поиске использовать сильные условия Вульфа с константой  $c_2 < 0.5$ , то  $d_k$  будет направлением спуска (т. е. поиск должен быть точнее, чем обычно).
- ▶ Пример: рассмотрим двумерную функцию

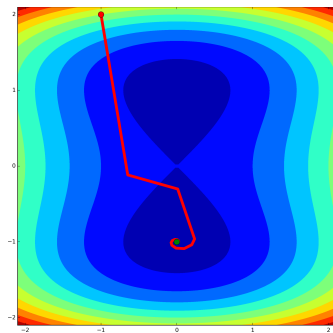
$$f(x) := \frac{1}{2}x_1^2 + \frac{1}{4}x_2^4 - \frac{1}{2}x_2^2,$$



## Флетчер–Ривс и направление спуска 2



$c_2 = 0.9$



$c_2 = 0.2$

- ▶ При  $c_2 > 0.5$  метод может не сходиться.
- ▶ При  $c_2 < 0.5$  метод сходится.

## Нелинейный метод CG и рестарт

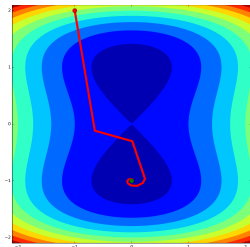
- ▶ На квадратичной функции CG сходится  $\leq$  за  $n$  итераций. Для функций общего вида это необязательно так.
- ▶ Многие функции вблизи оптимума близки к квадратичной. Как гарантировать быструю сходимость в окрестности оптимума?
- ▶ Для линейного CG очень важно, что  $d_0 = -g_0$ .
- ▶ Этого можно добиться, если **делать рестарт** каждые  $n$  итераций.
- ▶ Такое условие неэффективное, т.к. на практике метод обычно запускается на менее чем  $n$  итераций (например,  $n \sim 10^6$ ). Более эффективным условием является **условие Пауэлла**:

$$\text{рестарт} \Leftrightarrow |\langle g_k, g_{k+1} \rangle| \geq \nu \|g_{k+1}\|^2.$$

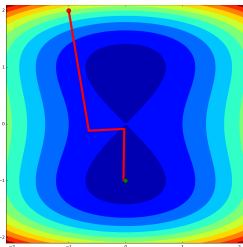
Обычно берут  $\nu = 0.1$ . Основано на том, что в CG соседние градиенты ортогональны.



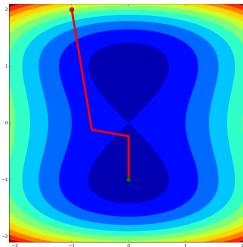
# Сравнение версий FR, PR и FR+restart



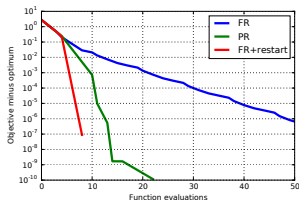
FR



PR



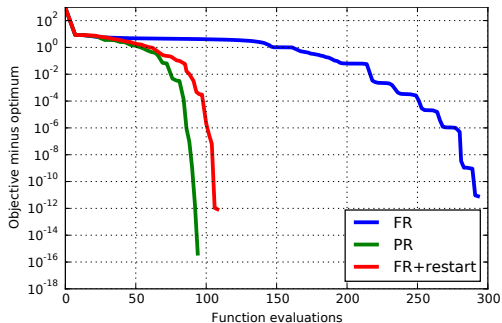
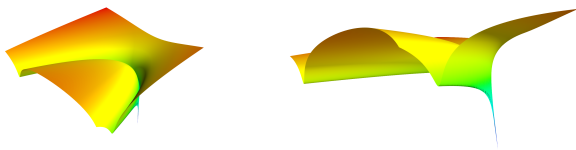
FR+restart



- ▶ Методы PR и FR+restart сходятся сильно быстрее, чем просто FR.
- ▶ Метод PR делает «автоматический» рестарт.

## Пример 2. Функция Розенброка

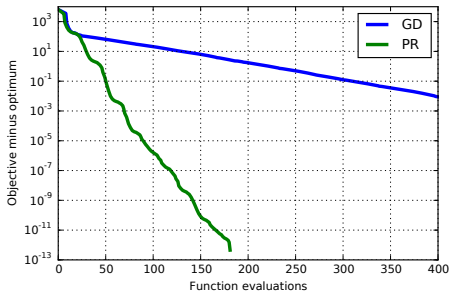
Функция Розенброка:  $f(x) := (1 - x_1)^2 + 100(x_2 - x_1^2)^2$ .



# Сравнение нелинейного СГ и градиентного спуска

Логистическая регрессия с  $l^2$ -регуляризатором:

$$f(x) := \sum_{i=1}^m \ln(1 + e^{\langle a_i, x \rangle}) + \frac{\tau}{2} \|x\|^2 \quad \rightarrow \quad \min_{x \in \mathbb{R}^n} .$$



- ▶ На практике нелинейный метод сопряженных градиентов работает существенно быстрее градиентного спуска.

## Нелинейный метод CG: заключение

- ▶ Нелинейный метод CG является методом первого порядка.
- ▶ Существуют много разных вариантов, отличающихся лишь выбором коэффициента  $\beta_k$ .
- ▶ В линейном поиске обычно используются сильные условия Вульфа с константой  $c_2 < 0.5$ . Также обычно применяют рестарт.
- ▶ Метод Флетчера–Ривса без рестартов является наименее эффективным. Наиболее популярным является метод Полака–Рибье.