Многомерная оптимизация

Звонарев Никита

Слушатели: 4-й курс, специальность СМ-СМ

Санкт-Петербургский Государственный Университет
Кафедра Статистического моделирования

Санкт-Петербург – 2018 г.

Общая постановка

$\mathcal{D} \subset \mathbb{R}^n$ — область, $f(\mathbf{x})$ — *целевая функция*, $f : \mathcal{D} \to \mathbb{R}$.
Задача:

$$\mathbf{x}^* = \arg\min_{\mathbf{x} \in \mathcal{D}} f(\mathbf{x}).$$

Теперь $n > 1$ (*да, n вместо k*).

Идея: свести задачу к одномерной оптимизации. (Как?)
Подход: итеративный, каждая итерация — в два этапа:

1. Поиск направления оптимизации ($\mathbf{x}_k$ — текущая точка, направление — $\mathbf{p}_k$ (как найти?)).
2. Шаг по направлению $\mathbf{p}_k$ либо одномерная оптимизация: $\alpha_k^* = \arg\min_{0 \le \alpha \le 1} f(\mathbf{x}_k + \alpha \mathbf{p}_k)$, $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_k^* \mathbf{p}_k$.

Покоординатный спуск

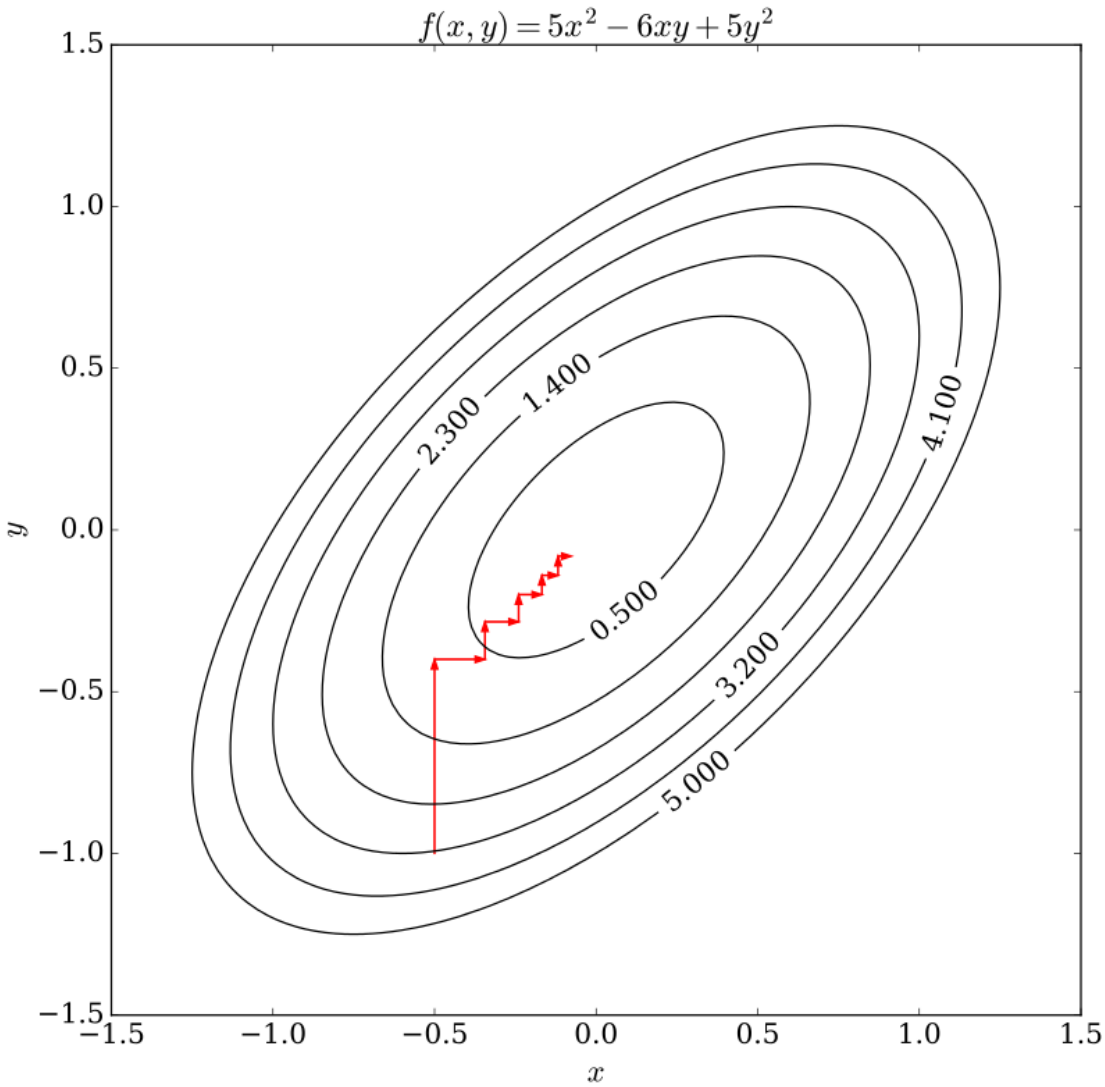
Он же *coordinate descent*. Самое простое, что можно придумать.

В терминах $\mathbf{p}_k$: $\mathbf{p}_k = e_{(k \mod n)+1}$, $e_i \in \mathbb{R}^n$ — i-й орт.
Схема итерации та же:
$\alpha_k^* = \arg\min_{\alpha \in \mathbb{R}} f(\mathbf{x}_k + \alpha \mathbf{p}_k)$, $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_k^* \mathbf{p}_k$.

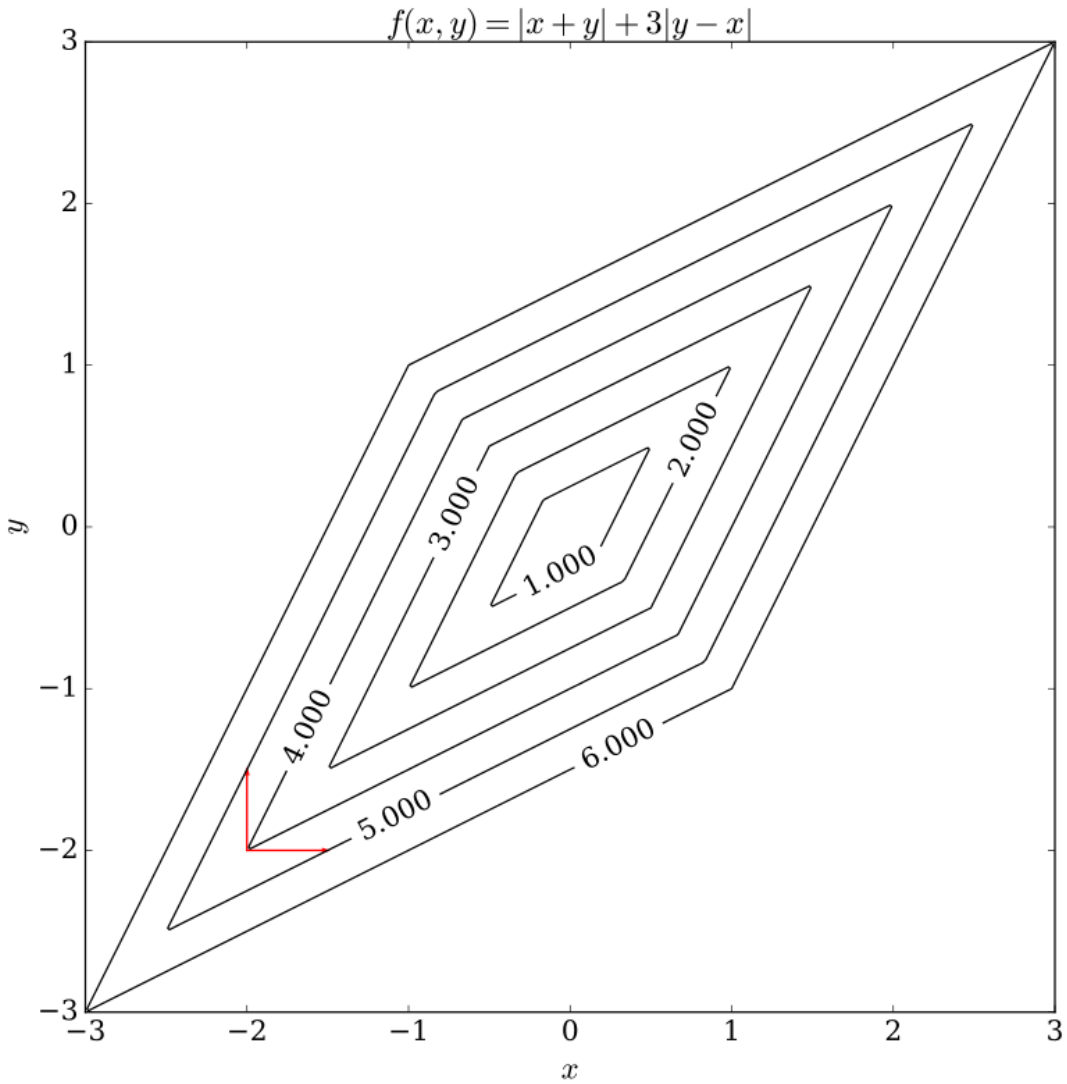
Что выполнено: $f(\mathbf{x}_{k+1}) \leq f(\mathbf{x}_k)$.

Вопрос: это гарантирует сходимость к локальному минимуму?

Покоординатный спуск: пример, когда есть сходимость



Покоординатный спуск: пример, когда нет сходимости



Покоординатный спуск

Ой! Метод может “застрять” там, где нет локального минимума.
На гладких функциях может сходиться медленно.

Получается, в нём нет смысла?

Идею используют. Например, вместо спуска по одной координате разбивают координаты на два набора, $n_1 + n_2 = n$, и чередуют их. На итерации — многомерная оптимизация по подмножеству координат.

Зачем так делают? Когда напрямую $f(\mathbf{x})$ оптимизировать слишком сложно.

Применения: статистика, ...

Градиентный спуск

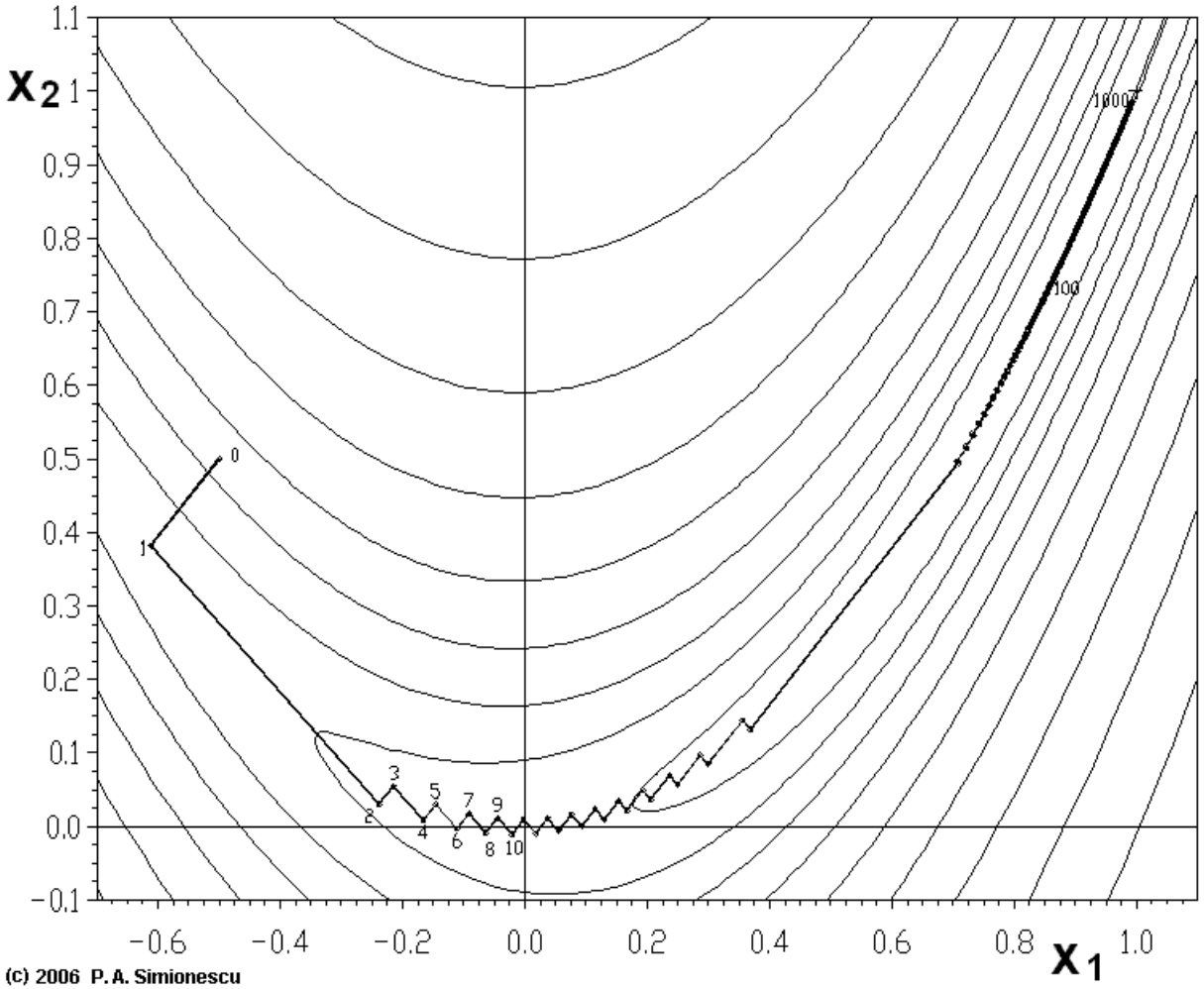
Он же *gradient descent*. f — дифференцируема
$\mathbf{p}_k$ — направление *антиградиента*: $\mathbf{p}_k = -f'(\mathbf{x}_k)$.
Схема итерации та же:
$\alpha_k^* = \arg\min_{0 \le \alpha < \infty} f(\mathbf{x}_k + \alpha \mathbf{p}_k)$, $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_k^* \mathbf{p}_k$.

Можно выбрать такие малые α_k^*: $f(\mathbf{x}_{k+1}) \le f(\mathbf{x}_k)$.

Сходимость выполняется в некоторых специфических случаях (выпуклость f, липшицевость f', ...).

Градиентный спуск: пример медленной сходимости

Rosenbrock function: $f(x_1, x_2) = (1 - x_1)^2 + 100(x_2 - x_1^2)^2$.



Градиентный спуск: применения

Применяют, когда более сложные методы слишком дороги по времени/памяти. В этом случае применяют не поиск по направлению, а шаг на определенное расстояние.

В статистике применяют вариант градиентного спуска к целевым функциям вида:

$$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{N} \sum_{1}^{N} f_i(\mathbf{x}).$$

f_i — это ....
Вместо того, чтобы на каждой итерации оптимизировать f, случайным образом разыгрывается индекс i, и вычисляется шаг по антиградиенту $-f_i'$ с угасающим весом. Получили метод стохастического градиента *(Stochastic gradient descent, SGD)*.
Модификации: AdaGrad, RMSProp, Adam, . . . (2010-е)

Метод сопряжённых градиентов, квадратичная функция

Он же *Conjugated gradient, CG*.
Хорошее название: никаких градиентов в нём нет.
Рассмотрим частный случай: $\arg\min_{\mathbf{x}\in\mathbb{R}^n} f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}\mathbf{x}^{\mathrm{T}}\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}$, $\mathbf{A}$ — симметричная, положительно определенная матрица.

Эквивалентная задача: решение СЛАУ $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$.
Обозначим $r(x) = \mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}$.
Рассмотрим систему из n сопряжённых (т.е. ортогональных с $\mathbf{A}$) векторов $\mathbf{p}_1, \ldots, \mathbf{p}_n$: $\mathbf{p}_i^{\mathrm{T}}\mathbf{A}\mathbf{p}_j = 0$, $i \neq j$, $\mathbf{p}_i \neq 0$.
Возмьмём произвольное $\mathbf{x}_0$, и найдём решение системы в виде разложения по векторам $\mathbf{p}_k$, то есть, $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_k\mathbf{p}_k$. α_k можно найти, взяв минимум по направлению:

$$\alpha_k = -\frac{r_k^{\mathrm{T}}\mathbf{p}_k}{\mathbf{p}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{A}\mathbf{p}_k}, \quad r_k = r(\mathbf{x}_k).$$

Метод сопряжённых градиентов, квадратичная функция

$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{p}_k.$

$$\alpha_k = -\frac{r_k^{\mathrm{T}} \mathbf{p}_k}{\mathbf{p}_k^{\mathrm{T}} \mathbf{A} \mathbf{p}_k}, \quad r_k = r(\mathbf{x}_k).$$

Теорема

Для любого $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^n$ последовательность $\mathbf{x}_k$ сходится к решению $\mathbf{x}^*$ в худшем случае за n шагов.

Вопрос: как найти векторы $\mathbf{p}_k$?

$\mathbf{p}_k = -\mathbf{r}_k + \beta_k \mathbf{p}_{k-1}$,

$$\beta_k = \frac{r_k^{\mathrm{T}} \mathbf{A} \mathbf{p}_{k-1}}{\mathbf{p}_{k-1}^{\mathrm{T}} \mathbf{A} \mathbf{p}_{k-1}}.$$

Nocedal, Jorge, Wright, S. Numerical Optimization.

Метод сопряжённых градиентов, алгоритм

$\mathbf{r}_0 = \mathbf{A}\mathbf{x}_0 - \mathbf{b}$, $\mathbf{p}_0 = -\mathbf{r}_0$, $k = 0$.

Пока $\mathbf{r}_k \neq 0$:

- $\alpha_k = \frac{\mathbf{r}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{r}_k}{\mathbf{p}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{A}\mathbf{p}_k}$
- $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{p}_k$
- $\mathbf{r}_{k+1} = \mathbf{r}_k + \alpha_k \mathbf{A}\mathbf{p}_k$
- $\beta_{k+1} = \frac{\mathbf{r}_{k+1}^{\mathrm{T}}\mathbf{r}_{k+1}}{\mathbf{r}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{r}_k}$
- $\mathbf{p}_{k+1} = -\mathbf{r}_k + \beta_{k+1}\mathbf{p}_k$
- Положить $k = k + 1$

Метод сопряжённых градиентов для произвольной функции

$f_i = f(\mathbf{x}_i)$, $\nabla f_i = f'(\mathbf{x}_i)$. f — дифференцируема.

Метод Fletcher-Reeves:

$\mathbf{p}_0 = -\nabla f_0$, $k = 0$.

Пока не выполнен критерий остановки:

- $\alpha_k = \arg\min_{0 \le \alpha < \infty} f(\mathbf{x}_k + \alpha \mathbf{p}_k)$
- $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{p}_k$
- Вычислить ∇f_{k+1}
- $\beta^{FR}_{k+1} = \frac{\nabla f_{k+1}^{\mathrm{T}} \nabla f_{k+1}}{\nabla f_k^{\mathrm{T}} \nabla f_k}$
- $\mathbf{p}_{k+1} = -\nabla f_k + \beta^{FR}_{k+1} \mathbf{p}_k$
- Положить $k = k + 1$

Метод Polak-Ribiere:

$$\beta^{PR}_{k+1} = \frac{\nabla f_{k+1}^{\mathrm{T}} (\nabla f_{k+1} - \nabla f_k)}{\nabla f_k^{\mathrm{T}} \nabla f_k}.$$

Многомерный метод Ньютона

$\mathbf{p}_k = -\nabla^2 f_k^{-1} \nabla f_k$, $f_k = f(\mathbf{x}_k)$.
$\nabla^2 f_k$ — матрица Гессе (матрица вторых производных).

Теорема

Предположим, что f дважды дифференцируема, гессиан $\nabla^2 f(\mathbf{x})$ — липшицев в окрестности точки $\mathbf{x}^*$, в которой выполнены достаточные условия локального минимума. Тогда

1. *Если $\mathbf{x}_0$ достаточно близко к $\mathbf{x}^*$, то последовательность сойдётся к $\mathbf{x}^*$.*
2. *Скорость сходимости $\mathbf{x}_k$ к $\mathbf{x}^*$ квадратичная.*
3. *$\|\nabla f_k\|$ сходится квадратично к 0.*

Достаточное условие строгого локального минимума в точке $\mathbf{x}^*$: $\nabla^2 f_k$ — непрерывна в открытой окрестности $\mathbf{x}^*$, $\nabla f(\mathbf{x}^*) = 0$, $\nabla^2 f(x^*)$ положительно определена.
Липшицевость: $\|\nabla^2 f(\mathbf{x}_1) - \nabla^2 f(\mathbf{x}_2)\| \leq M\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2\|$ для любых $\mathbf{x}_1$, $\mathbf{x}_2$ в некоторой окрестности $\mathbf{x}^*$.

Многомерный метод Ньютона

$\mathbf{p}_k = -\nabla^2 f_k^{-1} \nabla f_k$, $f_k = f(\mathbf{x}_k)$.
Вопрос: сколько итераций требуется методу для сходимости на квадратичной функции?

Как вычислять градиент/матрицу Гессе: честно/численно (обсуждали).
Можно искать минимум по направлению $\mathbf{p}_k$, либо задать длину шага: константа ($\alpha_k = 1$) — не самое лучшее решение.
Backtracking: $\alpha_k^{(0)} = 1$, $\alpha_k^{(j+1)} = \alpha_k^{(j)}/2$.
Если $f(\mathbf{x}_k) \geq f(\mathbf{x}_k + \alpha_k^{(j)} \mathbf{p}_k)$, то $\alpha_k = \alpha_k^{(j)}$.

Когда можно обойтись без вычисления матрицы Гессе?
Пример: пусть $f = \|g(\mathbf{x}) - \mathbf{b}\|^2$, $g : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^M$, $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^M$.
Метод Гаусса-Ньютона: $\mathbf{p}_k = -(\nabla g(\mathbf{x}_k))^+ (g(\mathbf{x}) - \mathbf{b})$, $\nabla g(\mathbf{x}_k) \in \mathbb{R}^{M \times n}$ — якобиан, $\mathbf{F}^+ = (\mathbf{F}^{\mathrm{T}}\mathbf{F})^{-1}\mathbf{F}^{\mathrm{T}}$ — псевдообращение Мура-Пенроуза.

На практике: методы *BFGS*, *L-BFGS-B* — используют приближение гессиана.

Возможные критерии остановки

- $\|\nabla f(\mathbf{x}_k)\| < \varepsilon$
- $\|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_{k-1}\| < \varepsilon$
- $\|\frac{f(\mathbf{x}_k) - f(\mathbf{x}_{k-1})}{f(\mathbf{x}_k)}\| < \varepsilon$

+ ограничение на число итераций! (чтобы метод не работал бесконечно долго, если он “застрял”).

Вопрос: а если мы используем численное вычисление градиента, то надо ли нам тогда обратить внимание на ε?

Методы на выбор для семестрового задания

1. Покоординатный спуск
2. Градиентный спуск
3. Сопряженные градиенты Fletcher-Reeves
4. Сопряженные градиенты Polak-Ribiere
5. Ньютон (поиск по направлению)
6. Ньютон (backtracking)
7. Nelder-Mead (метод деформируемого многогранника)