

KÖZELÍTŐ ÉS SZIMBOLIKUS SZÁMÍTÁSOK

12. GYAKORLAT

Konjugált gradiens módszer

Készítette:

Gelle Kitti

Csendes Tibor

Vinkó Tamás

Faragó István

Horváth Róbert

jegyzetei alapján

1. Lineáris egyenletrendszerek megoldása

A Konjugált gradiens módszer olyan lineáris (azaz $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ alakú) egyenletrendszerek megoldására alkalmas, melyekben az A együtthatómátrix szimmetrikus (azaz $A = A^T$), pozitív definit (azaz $\forall \mathbf{x} \neq \mathbf{0} \quad \mathbf{x}^T A \mathbf{x} > 0$) és valós (tehát $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$). A módszer ugyan véges lépésben képes lenne pontos aritmetikával megtalálni az \mathbf{x}^* megoldást, viszont a kerekítési hibák miatt mégis iterációs módszerként tekintünk rá.

A fenti tulajdonságú mátrixok sokszor adódnak optimalizálási feladatok, vagy parciális differenciálegyenletek megoldásakor, s mivel ezek lehetnek nagy, ritka mátrixok is, a direkt módszerek alkalmazása nem hatékony. A konjugált gradiens módszer viszont hatékonyan oldja meg az ilyen típusú egyenletrendszereket is.

Az alapötlet az, hogy megadunk egy többváltozós függvényt, melynek globális minimumhelye az egyenletrendszer megoldása. Ezt a minimumhelyet keressük meg egy megfelelő iterációs eljárással. Vegyük a

$$\theta(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \mathbf{x}^T A \mathbf{x} - \mathbf{x}^T \mathbf{b}$$

n -változós függvényt. Az összeszorozott mátrixok mérete szerint a jobb oldali kifejezés valóban egy valós számot (egy 1×1 -es mátrixot) rendel minden vektorhoz. Megmutatható, hogy ennek a kvadratikus függvénynek egyetlen globális minimumhelye van az \mathbb{R}^n halmazon és ez pontosan az $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ egyenletrendszer megoldása (azaz az $\mathbf{x}^* = A^{-1}\mathbf{b}$ pontban), a minimum értéke pedig $-\mathbf{b}^T A^{-1}\mathbf{b}/2$.

A $\theta(\mathbf{x})$ függvény mindegyik változója szerint parciálisan deriválható, így minden pontban értelmezve van a függvény gradiense. Most kiszámítjuk a gradiensfüggvényt. Határozzuk meg a $\theta(\mathbf{x})$ függvény x_k változó szerinti parciális deriváltját ($k = 1, \dots, n$). Ekkor

$$\theta(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_{ij} x_i x_j - \sum_j b_j x_j$$

Elhagyva az x_k -kat nem tartalmazó tagokat (deriváláskor azok úgysis kiesnek) kapjuk, hogy

$$\frac{\partial \theta(\mathbf{x})}{\partial x_k} = \sum_{j=1}^n a_{kj} x_j - b_k.$$

Azaz a gradiensfüggvény $\nabla(\theta(\mathbf{x})) = A\mathbf{x} - \mathbf{b}$. Egy lineáris egyenletrendszer esetén az $\mathbf{r} = \mathbf{b} - A\mathbf{x}$ vektort maradékvektornak (vagy reziduális vektornak) hívjuk. A maradékvektor megmutatja, hogy egy adott \mathbf{x} vektor esetén mekkora az eltérés az egyenletrendszer két oldala között. Nyilvánvalóan $\mathbf{x} = \mathbf{x}^*$ esetén $\mathbf{r} = 0$. Fontos észrevétel, hogy a gradiensvektor a maradékvektor (-1) -szerese.

Az $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ lineáris egyenletrendszer megoldása tehát a $\theta(\mathbf{x})$ függvény minimumhelyének megkeresésével egyenértékű.

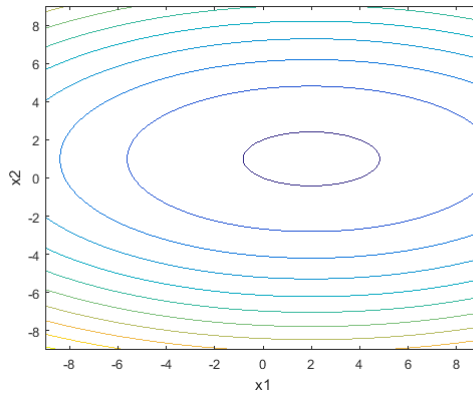
Példa: Tekintsük a $2x_1 = 4$, $8x_2 = 8$ egyenletrendszer, melynek megoldása $x_1^* = 2$, $x_2^* = 1$. Ekkor ez a megoldás lesz a

$$\theta(\mathbf{x}) = x_1^2 + 4x_2^2 - 4x_1 - 8x_2 = (x_1 - 2)^2 + 4(x_2 - 1)^2 - 8$$

kétváltozós függvény minimuma. A $c = 0$ értékhez tartozó szintvonal egyenlete

$$\frac{(x_1 - 2)^2}{8} + \frac{(x_2 - 1)^2}{2} = 1,$$

ami egy \mathbf{x}^* középpontú $\sqrt{8}$ és $\sqrt{2}$ féltengelyű ellipszis egyenlete, ahogy az az ábrán is látszik.



Szemléletesen a $\theta(\mathbf{x})$ függvény minimumhelyének megkeresése tulajdonképpen egy olyan felület „legmélyebben” fekvő pontjának megkeresése, melynek szintvonalai koncentrikus hiperellipszoidok¹.

2. Konjugált gradiens módszer

Ismert, hogy egy többváltozós függvény a gradiensvektorával ellentétes irányban csökken a leggyorsabban. Így kézenfekvőnek látszik mindig a gradiensvektor (-1) -szeresét (ami a korábban mondottak szerint éppen az adott pontbeli $\mathbf{r} = \mathbf{b} - A\mathbf{x}$ maradékvektor) választani keresési iránynak. Az így nyert iterációs módszert a $\theta(\mathbf{x})$ függvény minimumhelyének megkeresésére gradiens-módszernek, másképpen a legmeredekebb ereszkedés módszerének hívjuk. Azonban a keresési irány ilyen megválasztása lassú konvergenciát eredményez sok esetben. Ezt küszöböli ki a konjugált gradiens módszer.

Adott keresési irány mentén nem kell adaptív módon meghatározni a lépésközt (mint általános nemlineáris minimalizálás esetén kellene), mert az optimális α közvetlenül megadható. Mivel az új vektorunk az \mathbf{s}_k keresési irány mentén $\mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{s}_k$ lesz, így a $\theta(\mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{s}_k)$ értéket kell minimalizálnunk α függvényében az optimális α lépésköz

¹egy hipergömb képe egy invertálható lineáris transzformáció mellett

beállításához. Ezt a minimumot ott veszi fel, ahol az α szerinti deriváltja ennek a kifejezésnek 0. Ezt kiírva:

$$0 = \frac{\partial}{\partial \alpha} \theta(\mathbf{x}_{k+1}) = \nabla \theta(\mathbf{x}_{k+1})^T \frac{\partial}{\partial \alpha} \mathbf{x}_{k+1} = (A\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{b})^T \left(\frac{\partial}{\partial \alpha} (\mathbf{x}_k + \alpha \mathbf{s}_k) \right) = -\mathbf{r}_{k+1}^T \mathbf{s}_k.$$

Az új reziduális vektort ki lehet fejezni a régivel és a keresési iránnyal:

$$\mathbf{r}_{k+1} = \mathbf{b} - A\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{b} - A(\mathbf{x}_k + \alpha \mathbf{s}_k) = (\mathbf{b} - A\mathbf{x}_k) - \alpha A\mathbf{s}_k = \mathbf{r}_k - \alpha A\mathbf{s}_k.$$

Behelyettesítve a fenti $0 = -\mathbf{r}_{k+1}^T \mathbf{s}_k$ -ba a most kapott $\mathbf{r}_{k+1} = \mathbf{r}_k - \alpha A\mathbf{s}_k$ -t kapjuk, hogy $(\alpha A\mathbf{s}_k - \mathbf{r}_k)^T \mathbf{s}_k = 0$, átrendezve ezt kapjuk, hogy $(\alpha A\mathbf{s}_k)^T \mathbf{s}_k = \mathbf{r}_k^T \mathbf{s}_k$ ami ugyanaz mint $\alpha \mathbf{s}_k^T A^T \mathbf{s}_k = \mathbf{r}_k^T \mathbf{s}_k$ amiből azt kihasználva, hogy $A^T = A$ azt kapjuk, hogy

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

Míg a gradiens módszer mindig a gradienssel ellentétes irányában keres, a konjugált gradiens úgy működik, hogy az \mathbf{s}_{k+1} keresési irányt úgy állítja be, hogy az A -ortogonális legyen az \mathbf{s}_k keresési irányra (és az összes megelőző keresési irányra is), ennek a tulajdonságnak a definíciója:

Definíció 2.1. Adott egy $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ szimmetrikus, pozitív definit mátrix. Azt mondjuk, hogy az \mathbf{x} és \mathbf{y} vektorok A -konjugáltak (vagy A -ortogonálisak), ha $\mathbf{x}^T A \mathbf{y} = 0$.

Lineáris algebrai azonosságok alkalmazásával kijön, hogy ehhez az új keresési irányt az

$$\mathbf{s}_{k+1} = \mathbf{r}_{k+1} + \frac{\mathbf{r}_{k+1}^T \mathbf{r}_k}{\mathbf{r}_k^T \mathbf{r}_k} \mathbf{s}_k$$

képlettel kapjuk meg. Az első iterációban \mathbf{s}_1 -et a maradékvektorral tesszük egyenlővé.

2.1 Konjugált gradiens-módszer iteratív algoritmus

Az $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ pozitív definit mátrix, $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$ adott vektor, $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ tetszőleges kezdővektor. Az első keresési irány, \mathbf{s}_1 és \mathbf{r}_1 is legyen az \mathbf{x} gradiensének (-1) -szerese.

Amíg nem teljesülnek a megállási feltételek a következőket iteráljuk:

1. $\alpha_k := (\mathbf{r}_k^T \mathbf{r}_k) / (\mathbf{s}_k^T A \mathbf{s}_k)$
2. $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{s}_k$
3. $\mathbf{r}_{k+1} = \mathbf{r}_k - \alpha_k A \mathbf{s}_k$
4. $\beta_{k+1} = (\mathbf{r}_{k+1}^T \mathbf{r}_{k+1}) / (\mathbf{r}_k^T \mathbf{r}_k)$

$$5. \mathbf{s}_{k+1} = \mathbf{r}_{k+1} + \beta_{k+1} \mathbf{s}_k$$

Vegyük észre, hogy az α_k értékét most kicsit más formában határoztuk meg. Érvényes viszont, hogy $\mathbf{r}_k^T \mathbf{s}_k = \mathbf{r}_k^T (\mathbf{r}_k + \beta_k \mathbf{s}_{k-1}) = \mathbf{r}_k^T \mathbf{r}_k + \beta_k \mathbf{r}_k^T \mathbf{s}_{k-1} = \mathbf{r}_k^T \mathbf{r}_k$, mivel az \mathbf{r}_k reziduális vektor merőleges az \mathbf{s}_{k-1} keresési irányra, hiszen láttuk, hogy az optimális α meghatározásakor $0 = -\mathbf{r}_{k+1}^T \mathbf{s}_k$ kell teljesülnön.

A megállási feltétel szokás szerint az, hogy a felhasználó előírja, hogy az utolsó néhány iterált közelítés eltérése és a lineáris egyenletrendszer két oldala különbsége normája ezekben a pontokban adott kis pozitív értékek alatt maradjanak.

Egy megvalósítása Matlabban:

```

1 function [x] = conjgrad(A,b,x)
2     r=b-A*x;
3     p=r;
4     rsold=r'*r;
5
6     for i=1:length(b)
7         Ap=A*p;
8         alpha=rsold/(p'*Ap);
9         x=x+alpha*p;
10        r=r-alpha*Ap;
11        rsnew=r'*r;
12        if sqrt(rsnew)<1e-10
13            break;
14        end
15        p=r+(rsnew/rsold)*p;
16        rsold=rsnew;
17    end
18 end

```

3. Nemlineáris optimalizálás

A konjugált gradiens módszer nemlineáris optimalizálásra is alkalmas, ha minden iterációs lépésben az eredeti célfüggvény kvadratikus modelljére alkalmazzuk (az adott pontbeli függvényértékre, a gradiensre és a Hesse mátrixra vagy ezek közelítésére támaszkodva).

A lineáris verzióhoz képest 3 dolgon kell változtatnunk: a rekurzív formula a reziduális vektor kiszámításához nem használható, nehezebb kiszámolni az α lépésközt, és a β megválasztására többféle lehetőségünk is van.

A nemlineáris konjugált gradiens módszerben a reziduális vektort mindig a gradiens -1 -szeresére választjuk (azaz $\mathbf{r}_k = -f'(\mathbf{x}_k)$, ha f a függvényünk). A keresési irányt ugyanúgy megkaphatjuk, mint lineáris esetben, viszont a „keresés” kicsit bonyolultabb,

mint a lineáris konjugált gradiens esetében. Az α_k -t úgy választjuk, hogy az $f(\mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{s}_k)$ függvényt minimalizálja úgy, hogy a keresési irányra merőleges legyen a gradiens.

A nemlineáris konjugált gradiens módszer esetén a β kiszámítására több különböző, egymással nem ekvivalens eredményt adó módszer van. Két lehetőség például a Fletcher-Reeves formula, amit a lineáris módszerben is alkalmazunk, és a Polak-Ribière formula:

$$\beta^{FR} = \frac{\mathbf{r}_{k+1}^T \mathbf{r}_{k+1}}{\mathbf{r}_k^T \mathbf{r}_k}, \quad \beta^{PR} = \frac{\mathbf{r}_{k+1}^T (\mathbf{r}_{k+1} - \mathbf{r}_k)}{\mathbf{r}_k^T \mathbf{r}_k}$$

A Fletcher-Reeves módszer akkor konvergens, ha a kiindulási pont elég közel van a keresett minimumhoz, a Polak-Ribière módszer pedig ritka esetekben végtelen ciklusba esik és nem konvergál. Azonban a Polak-Ribière gyakran sokkal gyorsabban konvergál.

Tehát a nemlineáris optimalizálásra használható konjugált gradiens módszer lépései a következők:

1. $\mathbf{s}_0 = \mathbf{r}_0 = -f'(\mathbf{x}_0)$
2. Keressük azt az α_k -t, ami minimalizálja az $f(\mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{s}_k)$ függvényt
3. $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{s}_k$
4. $\mathbf{r}_{k+1} = -f'(\mathbf{x}_{k+1})$
5. $\beta_{k+1} = \frac{\mathbf{r}_{k+1}^T \mathbf{r}_{k+1}}{\mathbf{r}_k^T \mathbf{r}_k}$, vagy $\beta_{k+1} = \max\left\{\frac{\mathbf{r}_{k+1}^T (\mathbf{r}_{k+1} - \mathbf{r}_k)}{\mathbf{r}_k^T \mathbf{r}_k}, 0\right\}$
6. $\mathbf{s}_{k+1} = \mathbf{r}_{k+1} + \beta_{k+1} \mathbf{s}_k$

A módszer egy problémája, hogy egy f függvénynek több lokális minimuma is lehet, ekkor a nemlineáris konjugált gradiens módszer viszont nem garantálja, hogy a globális minimumot kapjuk eredményül.