بهینه سازی
مبانی بهینه سازی نامقید گرادیان مزدوج

محسن هوشمند
دانشکده تکنولوژی اطلاعات و علم رایانه
دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان

گرادیان مزدوج

هستنز و استیفل ۱۹۵۱

لنکزوس ۱۹۵۲

بهبود گرادیان نزولی با جلوگیری از تکرار مراحل

استفاده از تاریخچهء قدم قبلی جهت تسریع همگرائی

مشابه شدیدترین نزول به جز در محاسبه کردن قدمها

گ ن $\Leftarrow \boldsymbol{x}_{i+1} = \boldsymbol{x}_i + \alpha_i\left(-\nabla f(x_i)\right)$

م گ $\Leftarrow \boldsymbol{x}_{i+1} = \boldsymbol{x}_i + \alpha_i(-\nabla f(x_i) + \beta_i \boldsymbol{p}_i)$

حرکت در جهات متعامد

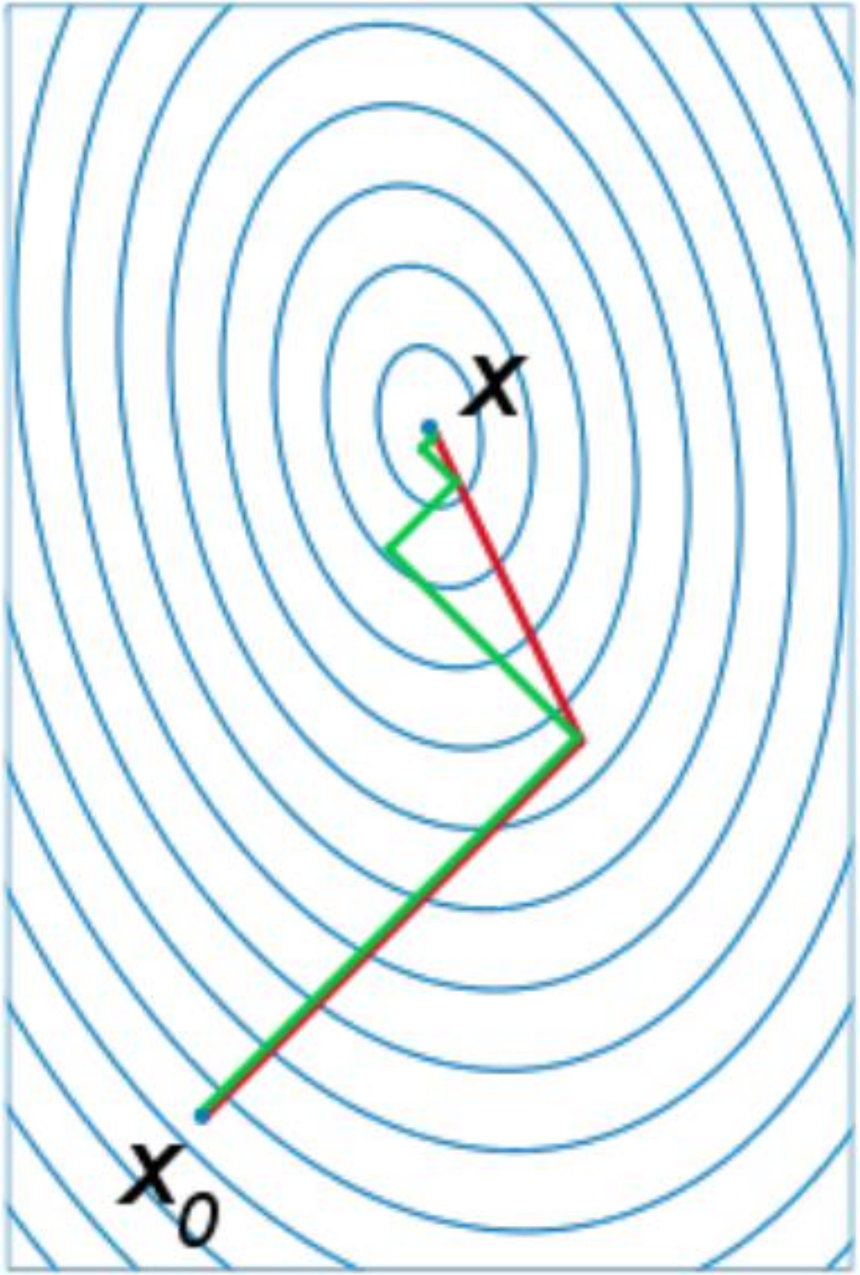
- جهت مزدوج با مسیر قبلی

متعامد یا مزدوجی دو بردار

$$\boldsymbol{p}_i^T Q \boldsymbol{p}_j = 0$$

جلوگیری از افزونگی

گرادیان مزدو



هستنز و استیفل ۱۹۵۱

لنکزوس ۱۹۵۲

بهبود گرادیان نزولی با جلوگیری از تکرار مراحل

استفاده از تاریخچهء قدم قبلی جهت سریع کردن

مشابه شدیدترین نزول به جز در محاسبهٔ کردن ة

حرکت در جهات متعامد

- جهت مزدوج با مسیر قبلی

متعامد یا مزدوجی دو بردار

جلوگیری از افزونگی

ضرب داخلی

$$\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b} \in \mathbb{R}^n \Longrightarrow \boldsymbol{a}.\boldsymbol{b} = \boldsymbol{a}^T\boldsymbol{b} = \sum a_i b_i$$

$$f, g \Longrightarrow \mathrm{f.g} = \int_T f(x)\bar{g}(\boldsymbol{x})dx$$

$\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^n, Q$ ماتریس مثبت معین $\Longrightarrow$

$$\Longrightarrow \boldsymbol{x}.\boldsymbol{y}_Q = \boldsymbol{x}^T Q \boldsymbol{y}$$

مسیرهای مزدوج

تعریف

Q ماتریس مثبت معین است. بردارهای $\{\boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{p}_2, \ldots, \boldsymbol{p}_k\}$ با شرط $\boldsymbol{p}_i \in \mathbb{R}^n, \boldsymbol{p}_i \neq \mathbf{0}$ متعامد-Q (مزدوج-Q) نسبت به Q هستند اگر

$$\boldsymbol{p}_i^T Q \boldsymbol{p}_j = 0, \forall i \neq j$$

Q=0

Q=I

مسیرهای مزدوج

تعریف

Q ماتریس مثبت معین است. بردارهای $\{\boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{p}_2, \ldots, \boldsymbol{p}_k\}$ با شرط $\boldsymbol{p}_i \in \mathbb{R}^n, \boldsymbol{p}_i \neq \boldsymbol{0}$ متعامد-Q (مزدوج-Q) نسبت به Q هستند اگر

$$\boldsymbol{p}_i^T Q \boldsymbol{p}_j = 0, \forall i \neq j$$

Q=0

Q=I

لم

Q مثبت معین باشد. اگر $\{\boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{p}_2, \ldots, \boldsymbol{p}_k\}$ متعامد-Q باشند، آن‌گاه همگی مستقل خطی از یکدیگرند.

اثبات

اهمیت مزدوج-Q

هدف

$$\frac{1}{2}\boldsymbol{x}^T Q\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}^T\boldsymbol{x}$$

فرض $Q \in \mathbb{R}^{n\times n}$ مثبت معین

پاسخ به مسئله بالا، پاسخ به معادله خطی روبرو نیز است: $Qx = b, x \in \mathbb{R}^n$

فرض $\boldsymbol{x}^*$ پاسخ مسئله

$\{\boldsymbol{p}_0, \boldsymbol{p}_1, \dots, \boldsymbol{p}_{n-1}\}$ متعامد-Q.

چون $\{\boldsymbol{p}_0, \boldsymbol{p}_1, \dots, \boldsymbol{p}_{n-1}\}$ مستقل هستند

$$\boldsymbol{x}^* = \alpha_0\boldsymbol{p}_0 + \cdots + \alpha_{n-1}\boldsymbol{p}_{n-1}$$

اهمیت مزدوج-Q

$$\boldsymbol{x}^* = \alpha_0 \boldsymbol{p}_0 + \cdots + \alpha_{n-1} \boldsymbol{p}_{n-1}$$

اهمیت مزدوج-Q

$$\boldsymbol{x}^* = \alpha_0 \boldsymbol{p}_0 + \cdots + \alpha_{n-1} \boldsymbol{p}_{n-1}$$

پس

$$\boldsymbol{p}_i^T Q \boldsymbol{x}^* = \boldsymbol{p}_i^T Q (\alpha_0 \boldsymbol{p}_0 + \cdots + \alpha_{n-1} \boldsymbol{p}_{n-1})$$

اهمیت مزدوج-Q

$$\boldsymbol{x}^* = \alpha_0 \boldsymbol{p}_0 + \cdots + \alpha_{n-1} \boldsymbol{p}_{n-1}$$

پس

$$\boldsymbol{p}_i^T Q \boldsymbol{x}^* = \boldsymbol{p}_i^T Q (\alpha_0 \boldsymbol{p}_0 + \cdots + \alpha_{n-1} \boldsymbol{p}_{n-1}) = \alpha_i \boldsymbol{p}_i^T Q \boldsymbol{p}_i$$

اهمیت مزدوج-Q

$$\boldsymbol{x}^* = \alpha_0 \boldsymbol{p}_0 + \cdots + \alpha_{n-1} \boldsymbol{p}_{n-1}$$

پس

$$\boldsymbol{p}_i^T Q \boldsymbol{x}^* = \boldsymbol{p}_i^T Q (\alpha_0 \boldsymbol{p}_0 + \cdots + \alpha_{n-1} \boldsymbol{p}_{n-1}) = \alpha_i \boldsymbol{p}_i^T Q \boldsymbol{p}_i$$

$$\alpha_i = \frac{\boldsymbol{p}_i^T Q \boldsymbol{x}^*}{\boldsymbol{p}_i^T Q \boldsymbol{p}_i}$$

اهمیت مزدوج-Q

$$\boldsymbol{x}^* = \alpha_0 \boldsymbol{p}_0 + \cdots + \alpha_{n-1} \boldsymbol{p}_{n-1}$$

پس

$$\boldsymbol{p}_i^T Q \boldsymbol{x}^* = \boldsymbol{p}_i^T Q (\alpha_0 \boldsymbol{p}_0 + \cdots + \alpha_{n-1} \boldsymbol{p}_{n-1}) = \alpha_i \boldsymbol{p}_i^T Q \boldsymbol{p}_i$$

$$\alpha_i = \frac{\boldsymbol{p}_i^T Q \boldsymbol{x}^*}{\boldsymbol{p}_i^T Q \boldsymbol{p}_i} = \frac{\boldsymbol{p}_i^T \boldsymbol{b}}{\boldsymbol{p}_i^T Q \boldsymbol{p}_i}$$

اهمیت مزدوج-Q

$$\boldsymbol{x}^* = \alpha_0 \boldsymbol{p}_0 + \cdots + \alpha_{n-1} \boldsymbol{p}_{n-1}$$

پس

$$\boldsymbol{p}_i^T Q \boldsymbol{x}^* = \boldsymbol{p}_i^T Q(\alpha_0 \boldsymbol{p}_0 + \cdots + \alpha_{n-1} \boldsymbol{p}_{n-1}) = \alpha_i \boldsymbol{p}_i^T Q \boldsymbol{p}_i$$

$$\alpha_i = \frac{\boldsymbol{p}_i^T Q \boldsymbol{x}^*}{\boldsymbol{p}_i^T Q \boldsymbol{p}_i} = \frac{\boldsymbol{p}_i^T \boldsymbol{b}}{\boldsymbol{p}_i^T Q \boldsymbol{p}_i}$$

عدم نیاز به دانستن $\boldsymbol{x}^*$ برای یافتن α_i

متعامدبودن معیار کافی نیست

- نیاز به متعامد-Q

اهمیت مزدوج-Q

$$\boldsymbol{x}^* = \alpha_0 \boldsymbol{p}_0 + \cdots + \alpha_{n-1} \boldsymbol{p}_{n-1}$$

$$\alpha_i = \frac{\boldsymbol{p}_i^T Q \boldsymbol{x}^*}{\boldsymbol{p}_i^T Q \boldsymbol{p}_i} = \frac{\boldsymbol{p}_i^T \boldsymbol{b}}{\boldsymbol{p}_i^T Q \boldsymbol{p}_i}$$

$$\boldsymbol{x}^* = \sum_{i=0}^{n-1} \alpha_i \boldsymbol{p}_i = \sum_{i=0}^{n-1} \frac{\boldsymbol{p}_i^T \boldsymbol{b}}{\boldsymbol{p}_i^T Q \boldsymbol{p}_i} \boldsymbol{p}_i$$

اهمیت مزدوج-Q

$$\boldsymbol{x}^* = \alpha_0 \boldsymbol{p}_0 + \cdots + \alpha_{n-1} \boldsymbol{p}_{n-1}$$

$$\alpha_i = \frac{\boldsymbol{p}_i^T Q \boldsymbol{x}^*}{\boldsymbol{p}_i^T Q \boldsymbol{p}_i} = \frac{\boldsymbol{p}_i^T \boldsymbol{b}}{\boldsymbol{p}_i^T Q \boldsymbol{p}_i}$$

$$\boldsymbol{x}^* = \sum_{i=0}^{n-1} \alpha_i \boldsymbol{p}_i = \sum_{i=0}^{n-1} \frac{\boldsymbol{p}_i^T \boldsymbol{b}}{\boldsymbol{p}_i^T Q \boldsymbol{p}_i} \boldsymbol{p}_i$$

صرفا احتیاج به ضرب داخلی

امکان یافتن نقطه کمینه‌سازی با استفاده از روش تکرار مراحل و عددی در **n** مرحله

- در مرحله **i**-ام مقدار $\alpha_i \boldsymbol{p}_i$ افزوده می‌شود
- تعمیم بیشتر با آغاز از نقطه دلبخواه $\boldsymbol{x}_0$

کمینه‌سازی توابع درجه دو

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

فرض بر داشتن $\{\boldsymbol{p}_i\}_{i=1}^{n}$ برابر با Q-مزدوج. فرض $\boldsymbol{x} = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i \boldsymbol{p}_i$

$$f(x) = \frac{1}{2}\|\boldsymbol{x}\|_Q^2 - \boldsymbol{b}^T \boldsymbol{x} = \sum_{i=1}^{n} \underbrace{\left(\frac{1}{2}\alpha_i^2 \|\boldsymbol{p}_i\|_Q^2 - \alpha_i \boldsymbol{b}^T \boldsymbol{p}_i\right)}_{\phi_i(\alpha_i)}$$

$$f(x(\boldsymbol{\alpha})) = \sum_{i=1}^{n} \phi_i(\alpha_i)$$

جداپذیر بر الفا

کمینه‌سازی توابع درجه دو

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

فرض بر داشتن $\{\boldsymbol{p}_i\}_{i=1}^{n}$ برابر با Q-مزدوج. فرض $\boldsymbol{x} = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i \boldsymbol{p}_i$

$$f(x) = \frac{1}{2}\|\boldsymbol{x}\|_Q^2 - \boldsymbol{b}^T\boldsymbol{x} = \sum_{i=1}^{n} \underbrace{\left(\frac{1}{2}\alpha_i^2\|\boldsymbol{p}_i\|_Q^2 - \alpha_i \boldsymbol{b}^T\boldsymbol{p}_i\right)}_{\phi_i(\alpha_i)}$$

$$\min_{\boldsymbol{\alpha}} f(x(\boldsymbol{\alpha})) = \sum_{i=1}^{n} \min_{\alpha_i} \phi_i(\alpha_i)$$

n دنباله از کمینه‌سازی‌های جستجو خط یک-بعدی

روش جهت مزدوج

$$\min_{\boldsymbol{\alpha}} f(x(\boldsymbol{\alpha})) = \sum_{i=1}^{n} \min_{\alpha_i} \phi_i(\alpha_i)$$

n دنباله از کمینه‌سازی‌های جستجو خط یک-بعدی

بسط خاصیت زیرفضا- ادامه

$$\boldsymbol{x} = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i \boldsymbol{p}_i$$

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}_0 + \sum_{i=1}^{k} \alpha_i \boldsymbol{p}_i$$

$$G_k = \left\{ \boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}_0 + \sum_{i=1}^{k} \alpha_i \boldsymbol{p}_i \,, \forall \boldsymbol{\alpha} \right\}$$

پس از k مرحله از روش مزدوج

$$\boldsymbol{x}_k = \underset{\boldsymbol{x} \in G_k}{\operatorname{argmin}} f(\boldsymbol{x})$$

بسط خاصیت زیرفضا- ادامه

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}_0 + \sum_{i=1}^{k} \alpha_i \boldsymbol{p}_i$$

$$\boldsymbol{\alpha} \in \mathbb{R}^k, P = (\boldsymbol{p}_1 \boldsymbol{p}_2 \ \ldots \boldsymbol{p}_k) \Rightarrow \boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}_0 + P\boldsymbol{\alpha}$$

$$\boldsymbol{\alpha}^* = \underset{\boldsymbol{\alpha}}{\operatorname{argmin}} f(\boldsymbol{x}_0 + P\boldsymbol{\alpha})$$

$$\boldsymbol{x}^* = \boldsymbol{x}_0 + P\boldsymbol{\alpha}^*$$

$$\nabla_{\boldsymbol{\alpha}} = P^T \nabla_{\boldsymbol{x}} f(\underbrace{\boldsymbol{x}_0 + P\boldsymbol{\alpha}}_{\boldsymbol{x}})$$

$$= P^T \nabla_{\boldsymbol{x}} f(\boldsymbol{x}^*) = \boldsymbol{0} \Rightarrow \begin{cases} \boldsymbol{p}_1^T \nabla_{\boldsymbol{x}} f(\boldsymbol{x}^*) = 0 \\ \vdots \\ \boldsymbol{p}_k^T \nabla_{\boldsymbol{x}} f(\boldsymbol{x}^*) = 0 \end{cases}$$

بسط خاصیت زیرفضا- ادامه

$$\nabla_{\boldsymbol{\alpha}} = P^T \nabla_{\boldsymbol{x}} f(\underbrace{\boldsymbol{x}_0 + P\boldsymbol{\alpha}}_{\boldsymbol{x}})$$

$$= P^T \nabla_{\boldsymbol{x}} f(\boldsymbol{x}^*) = \boldsymbol{0} \Longrightarrow \begin{cases} \boldsymbol{p}_1^T \nabla_{\boldsymbol{x}} f(\boldsymbol{x}^*) = 0 \\ \vdots \\ \boldsymbol{p}_k^T \nabla_{\boldsymbol{x}} f(\boldsymbol{x}^*) = 0 \end{cases}$$

گرادیان جدید متعامد بر تمامی جهت‌های قبلی $\boldsymbol{p}_i$ و i=1,...,k

بسط خاصیت زیرفضا- ادامه

$$\nabla_{\alpha} = P^{T}\nabla_{x} f\big(\underbrace{\boldsymbol{x}_0 + P\boldsymbol{\alpha}}_{\boldsymbol{x}}\big)$$

$$= P^{T}\nabla_{x} f(\boldsymbol{x}^{*}) = \mathbf{0} \Longrightarrow \begin{cases} \boldsymbol{p}_1^{T}\nabla_{x} f(\boldsymbol{x}^{*}) = 0 \\ \vdots \\ \boldsymbol{p}_k^{T}\nabla_{x} f(\boldsymbol{x}^{*}) = 0 \end{cases}$$

گرادیان جدید متعامد بر تمامی جهت‌های قبلی $\boldsymbol{p}_i$ و i=1,...,k

کمینه‌سازی توابع درجه دو

$$\min f(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^T Q\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}^T\boldsymbol{x}$$
$$\boldsymbol{g}^* = \nabla f(\boldsymbol{x}^*) = Q\boldsymbol{x}^* - \boldsymbol{b}$$

آغاز:

$$\boldsymbol{p}_0 = -\boldsymbol{g}_0 = -Q\boldsymbol{x}_0 + \boldsymbol{b}$$

مرحلهٔ k-اُم

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

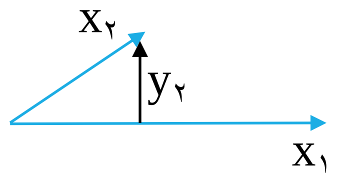
نیاز به جستجو خط کامل

$$\boldsymbol{p}_{k+1} = -\boldsymbol{g}_{k+1} + \sum_{j=0}^{k}\left(\frac{{\boldsymbol{g}_{k+1}}^T Q\boldsymbol{p}_j}{{\boldsymbol{p}_j}^T Q\boldsymbol{p}_j}\boldsymbol{p}_j\right)$$

استفاده از گرام- اشمیت برای متعامد-Q مربوط به $\{\boldsymbol{p}_j\}_{j=0}^{k}$

روش گرام اشمیت

- به دنبال پایه یکه متعامد $\{\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \boldsymbol{x}_3, \dots, x_j\}$ پایه‌ای برای X

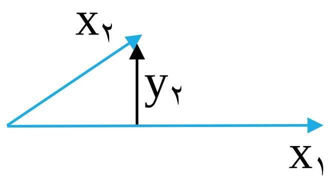


- $X_1 = span(\boldsymbol{x}_1) \Rightarrow \boldsymbol{y}_1 = \frac{\boldsymbol{x}_1}{\|\boldsymbol{x}_1\|}$
- $X_2 = span(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2) = span(\boldsymbol{y}_1, \boldsymbol{x}_2)$
- $\Rightarrow \boldsymbol{y}_2 = \frac{\boldsymbol{x}_2 - (\boldsymbol{x}_2 . \boldsymbol{y}_1)\boldsymbol{y}_1}{\|\boldsymbol{x}_2 - (\boldsymbol{x}_2 . \boldsymbol{y}_1)\boldsymbol{y}_1\|} \Rightarrow X_2 = span(\boldsymbol{y}_1, \boldsymbol{y}_2)$
- $X_3 = span(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \boldsymbol{x}_3) = span(\boldsymbol{y}_1, \boldsymbol{y}_2, \boldsymbol{x}_3)$
- $\Rightarrow \boldsymbol{y}_3 = \frac{\boldsymbol{x}_3 - (\boldsymbol{x}_3 . \boldsymbol{y}_1)\boldsymbol{y}_1 - (\boldsymbol{x}_3 . \boldsymbol{y}_2)\boldsymbol{y}_2}{\|\boldsymbol{x}_3 - (\boldsymbol{x}_2 . \boldsymbol{y}_1)\boldsymbol{y}_1 - (\boldsymbol{x}_3 . \boldsymbol{y}_2)\boldsymbol{y}_2\|} \Rightarrow X_3 = span(\boldsymbol{y}_1, \boldsymbol{y}_2, \boldsymbol{y}_3)$
- $\vdots$
- $X_j = span(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \boldsymbol{x}_3, \dots, \boldsymbol{x}_j) = span(\boldsymbol{y}_1, \boldsymbol{y}_2, \dots, \boldsymbol{y}_{j-1}, \boldsymbol{x}_j)$
- $\Rightarrow \boldsymbol{y}_j = \frac{\boldsymbol{x}_j - \sum_{i=1}^{j-1} (\boldsymbol{x}_j . \boldsymbol{y}_i)\boldsymbol{y}_i}{\left\|\boldsymbol{x}_j - \sum_{i=1}^{j-1} (\boldsymbol{x}_j . \boldsymbol{y}_i)\boldsymbol{y}_i\right\|} \Rightarrow X_j = span(\boldsymbol{y}_1, \boldsymbol{y}_2, \dots, \boldsymbol{y}_j)$

متعامدسازی گرام-اشمیت- ادامه

بردارهای مستقل خطی $\{\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_n\}$

ایجاد محورهای(پایه‌های) متعامد



$$\boldsymbol{y}_1 = \boldsymbol{x}_1$$

$$\boldsymbol{y}_2 = \boldsymbol{x}_2 - \left(\boldsymbol{x}_2 . \frac{\boldsymbol{y}_1}{\|\boldsymbol{y}_1\|}\right) \frac{\boldsymbol{y}_1}{\|\boldsymbol{y}_1\|} = \boldsymbol{x}_2 - \frac{\boldsymbol{x}_2 . \boldsymbol{y}_1}{\|\boldsymbol{y}_1\|^2} \boldsymbol{y}_1$$

$$\vdots$$

$$\boldsymbol{y}_j = \boldsymbol{x}_j - \sum_{i=1}^{j-1} \frac{\boldsymbol{x}_j . \boldsymbol{y}_i}{\|\boldsymbol{y}_i\|^2} \boldsymbol{y}_i$$

کمینه‌سازی توابع درجه دو

$$\boldsymbol{p}_{k+1} = -\boldsymbol{g}_{k+1} + \sum_{j=0}^{k} \left(\frac{\boldsymbol{g}_{k+1}{}^{T} Q \boldsymbol{p}_j}{\boldsymbol{p}_j{}^{T} Q \boldsymbol{p}_j} \boldsymbol{p}_j \right)$$

ساده‌سازی ۱

$$\boldsymbol{p}_k = \frac{1}{\alpha_k}(\boldsymbol{x}_{k+1} - \boldsymbol{x}_k) \Rightarrow Q\boldsymbol{p}_k = \frac{1}{\alpha_k} Q(\boldsymbol{x}_{k+1} - \boldsymbol{x}_k) = \frac{1}{\alpha_k}(\boldsymbol{g}_{k+1} - \boldsymbol{g}_k)$$

$\boldsymbol{g}_{k+1}$ عمود بر $\boldsymbol{g}_0$، $\boldsymbol{g}_1$،...،$\boldsymbol{g}_k$ $\leftarrow$ پس آخرین بخش در جمع مقادیر بالای صفحه کافی است

کمینه‌سازی توابع درجه دو

$$\boldsymbol{p}_{k+1} = -\boldsymbol{g}_{k+1} + \sum_{j=0}^{k} \left(\frac{{\boldsymbol{g}_{k+1}}^T Q \boldsymbol{p}_j}{{\boldsymbol{p}_j}^T Q \boldsymbol{p}_j} \boldsymbol{p}_j \right)$$

ساده‌سازی ۱

$$\boldsymbol{p}_k = \frac{1}{\alpha_k}(\boldsymbol{x}_{k+1} - \boldsymbol{x}_k) \Longrightarrow Q\boldsymbol{p}_k = \frac{1}{\alpha_k} Q(\boldsymbol{x}_{k+1} - \boldsymbol{x}_k) = \frac{1}{\alpha_k}(\boldsymbol{g}_{k+1} - \boldsymbol{g}_k)$$

ب) با قضیه بسط زیرفضا

$\boldsymbol{g}_{k+1}$ عمود بر $\boldsymbol{g}_0$، $\boldsymbol{g}_1$،...،$\boldsymbol{g}_k$ $\leftarrow$ پس آخرین بخش کافی است

$$\boldsymbol{p}_{k+1} = -\boldsymbol{g}_{k+1} + \frac{{\boldsymbol{g}_{k+1}}^T (\boldsymbol{g}_{k+1} - \boldsymbol{g}_k)}{{\boldsymbol{p}_k}^T (\boldsymbol{g}_{k+1} - \boldsymbol{g}_k)} \boldsymbol{p}_k$$

کمینه‌سازی توابع درجه دو

$$\boldsymbol{p}_{k+1} = -\boldsymbol{g}_{k+1} + \frac{{\boldsymbol{g}_{k+1}}^T(\boldsymbol{g}_{k+1}-\boldsymbol{g}_k)}{{\boldsymbol{p}_k}^T(\boldsymbol{g}_{k+1}-\boldsymbol{g}_k)}\boldsymbol{p}_k$$

$$\beta_k = \frac{{\boldsymbol{g}_{k+1}}^T(\boldsymbol{g}_{k+1}-\boldsymbol{g}_k)}{{\boldsymbol{p}_k}^T(\boldsymbol{g}_{k+1}-\boldsymbol{g}_k)}$$

ساده‌سازی ۲

$$\boldsymbol{p}_{k+1} = -\boldsymbol{g}_{k+1} + \beta_k\boldsymbol{p}_k$$

الف) $\boldsymbol{p}_k$ عمود بر $\boldsymbol{g}_{k+1}$ پس در مخرج داریم ${\boldsymbol{p}_k}^T(\boldsymbol{g}_{k+1} - \boldsymbol{g}_k) = {\boldsymbol{p}_k}^T(-\boldsymbol{g}_k)$

ب) همچنین $\boldsymbol{p}_k = -\boldsymbol{g}_k + \beta_{k-1}\boldsymbol{p}_{k-1}$ پس جایگذاری در معادله ساده شده مرحله قبل

$$(-\boldsymbol{g}_k + \beta_{k-1}\boldsymbol{p}_{k-1})^T(-\boldsymbol{g}_k) = {\boldsymbol{g}_k}^T\boldsymbol{g}_k$$

کمینه‌سازی توابع درجه دو

$$\boldsymbol{p}_{k+1} = -\boldsymbol{g}_{k+1} + \frac{{\boldsymbol{g}_{k+1}}^T(\boldsymbol{g}_{k+1}-\boldsymbol{g}_k)}{{\boldsymbol{p}_k}^T(\boldsymbol{g}_{k+1}-\boldsymbol{g}_k)}\boldsymbol{p}_k$$

$$\beta_k = \frac{{\boldsymbol{g}_{k+1}}^T(\boldsymbol{g}_{k+1}-\boldsymbol{g}_k)}{{\boldsymbol{p}_k}^T(\boldsymbol{g}_{k+1}-\boldsymbol{g}_k)}$$

ساده‌سازی ۲

$$\boldsymbol{p}_{k+1} = -\boldsymbol{g}_{k+1} + \beta_k \boldsymbol{p}_k$$

الف) $\boldsymbol{p}_k$ عمود بر $\boldsymbol{g}_{k+1}$ پس در مخرج داریم ${\boldsymbol{p}_k}^T(\boldsymbol{g}_{k+1} - \boldsymbol{g}_k) = {\boldsymbol{p}_k}^T(-\boldsymbol{g}_k)$

ب) همچنین $\boldsymbol{p}_k = -\boldsymbol{g}_k + \beta_{k-1}\boldsymbol{p}_{k-1}$ پس جایگذاری در معادله ساده شده مرحله قبل

$$(-\boldsymbol{g}_k + \beta_{k-1}\boldsymbol{p}_{k-1})^T(-\boldsymbol{g}_k) = {\boldsymbol{g}_k}^T\boldsymbol{g}_k$$

پس

$$\beta_k = \frac{{\boldsymbol{g}_{k+1}}^T(\boldsymbol{g}_{k+1} - \boldsymbol{g}_k)}{{\boldsymbol{g}_k}^T\boldsymbol{g}_k} = \frac{{\boldsymbol{g}_{k+1}}^T(\boldsymbol{g}_{k+1} - \boldsymbol{g}_k)}{\|\boldsymbol{g}_k\|_2^2} = \frac{\|\boldsymbol{g}_{k+1}\|_2^2}{\|\boldsymbol{g}_k\|_2^2}$$

کمینه‌سازی توابع درجه دو

$$\boldsymbol{p}_{k+1} = -\boldsymbol{g}_{k+1} + \beta_k \boldsymbol{p}_k$$

پس

روش پولاک-ریبریه $\beta_k = \frac{{\boldsymbol{g}_{k+1}}^T(\boldsymbol{g}_{k+1} - \boldsymbol{g}_k)}{\|\boldsymbol{g}_k\|_2^2}$

روش فلچر-ریوز $\beta_k = \frac{\|\boldsymbol{g}_{k+1}\|_2^2}{\|\boldsymbol{g}_k\|_2^2}$

صورت پولاک دارای عملکرد بهتر در روش حل عددی توابع غیردرجه دو

الگوریتم گرادیان مزدوج غیرخطی

$f: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$

- به دنبال یافتن کمینه

الگوریتم گرادیان مزدوج

مقداردهی اولیه $\boldsymbol{x}_0$ و $\boldsymbol{p}_0 = -\boldsymbol{g}_0 = \nabla f(\boldsymbol{x}_0)$

برای n بار

- $\boldsymbol{x}_{i+1} = \boldsymbol{x}_i + \alpha_i \boldsymbol{p}_i$
- α_i کمینه‌ساز $g(\alpha) = f(\boldsymbol{x}_i + \alpha_i \boldsymbol{p}_i)$
- $\boldsymbol{g}_{i+1} = \nabla f(\boldsymbol{x}_{i+1})$
- $\boldsymbol{p}_{i+1} = -\boldsymbol{g}_{i+1} + \beta_i \boldsymbol{p}_i$
- $\beta_i = \frac{{\boldsymbol{g}_{i+1}}^T (\boldsymbol{g}_{i+1} - \boldsymbol{g}_i)}{\|\boldsymbol{g}_i\|_2^2}$ یا $\beta_i = \frac{\|\boldsymbol{g}_{i+1}\|_2^2}{\|\boldsymbol{g}_i\|_2^2}$

$\boldsymbol{x}_0 = \boldsymbol{x}_n$ و تکرار تا همگرا شدن

$\beta_k^{HS} = \dfrac{\mathbf{g}_{k+1}^\mathsf{T}\mathbf{y}_k}{\mathbf{d}_k^\mathsf{T}\mathbf{y}_k}$	(1952)	in the original (linear) CG paper of Hestenes and Stiefel [59]
$\beta_k^{FR} = \dfrac{\lVert\mathbf{g}_{k+1}\rVert^2}{\lVert\mathbf{g}_k\rVert^2}$	(1964)	first nonlinear CG method, proposed by Fletcher and Reeves [45]
$\beta_k^{D} = \dfrac{\mathbf{g}_{k+1}^\mathsf{T}\nabla^2 f(\mathbf{x}_k)\mathbf{d}_k}{\mathbf{d}_k^\mathsf{T}\nabla^2 f(\mathbf{x}_k)\mathbf{d}_k}$	(1967)	proposed by Daniel [39], requires evaluation of the Hessian $\nabla^2 f(\mathbf{x})$
$\beta_k^{PRP} = \dfrac{\mathbf{g}_{k+1}^\mathsf{T}\mathbf{y}_k}{\lVert\mathbf{g}_k\rVert^2}$	(1969)	proposed by Polak and Ribière [84] and by Polyak [85]
$\beta_k^{CD} = \dfrac{\lVert\mathbf{g}_{k+1}\rVert^2}{-\mathbf{d}_k^\mathsf{T}\mathbf{g}_k}$	(1987)	proposed by Fletcher [44], CD stands for "Conjugate Descent"
$\beta_k^{LS} = \dfrac{\mathbf{g}_{k+1}^\mathsf{T}\mathbf{y}_k}{-\mathbf{d}_k^\mathsf{T}\mathbf{g}_k}$	(1991)	proposed by Liu and Storey [67]
$\beta_k^{DY} = \dfrac{\lVert\mathbf{g}_{k+1}\rVert^2}{\mathbf{d}_k^\mathsf{T}\mathbf{y}_k}$	(1999)	proposed by Dai and Yuan [27]
$\beta_k^{N} = \left(\mathbf{y}_k - 2\mathbf{d}_k\dfrac{\lVert\mathbf{y}_k\rVert^2}{\mathbf{d}_k^\mathsf{T}\mathbf{y}_k}\right)^\mathsf{T}\dfrac{\mathbf{g}_{k+1}}{\mathbf{d}_k^\mathsf{T}\mathbf{y}_k}$	(2005)	proposed by Hager and Zhang [53]

TABLE 1.1
Various choices for the CG update parameter

روش مسیرهای مزدوج

$$\min f(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^T Q\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}^T\boldsymbol{x}$$
$$\boldsymbol{g}^* = \nabla f(\boldsymbol{x}^*) = Q\boldsymbol{x}^* - \boldsymbol{b}$$

آغاز:

$$\boldsymbol{p}_0 = -\boldsymbol{g}_0 = -Q\boldsymbol{x}_0 + \boldsymbol{b}$$

مرحلهٔ **i**-اُم

$$\boldsymbol{x}_{i+1} = \boldsymbol{x}_i + \alpha_i\boldsymbol{p}_i$$

نیاز به جستجو خط کامل

$$\boldsymbol{p}_{i+1} = -\boldsymbol{g}_{i+1} + \sum_{j=0}^{i}\left(\frac{\boldsymbol{g}_{i+1}{}^T Q\boldsymbol{p}_j}{\boldsymbol{p}_j{}^T Q\boldsymbol{p}_j}\boldsymbol{p}_j\right)$$

استفاده از گرام- اشمیت برای متعامد-Q مربوط به $\{\boldsymbol{p}_j\}_{j=0}^{i}$

الگوریتم گرادیان مزدوج

$f: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$

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

$$\boldsymbol{x}_i = \boldsymbol{x}_0 + \alpha_0 \boldsymbol{p}_0 + \cdots + \alpha_{i-1}\boldsymbol{p}_{i-1}$$

$$\boldsymbol{p}_i^T Q \boldsymbol{x}_i = \boldsymbol{p}_i^T Q \boldsymbol{x}_0 \Longrightarrow \boldsymbol{p}_i^T Q(\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_0) = 0$$

$$\boldsymbol{p}_i^T Q(\boldsymbol{x}^* - \boldsymbol{x}_0) = \boldsymbol{p}_i^T Q(\boldsymbol{x}^* - \boldsymbol{x}_i) = \boldsymbol{p}_i^T(\boldsymbol{b} - Q\boldsymbol{x}_i) = -\boldsymbol{p}_i^T \boldsymbol{g}_i$$

$$\boldsymbol{p}_i^T Q(\boldsymbol{x}^* - \boldsymbol{x}_0) = -\boldsymbol{p}_i^T \boldsymbol{g}_i$$

$$\boldsymbol{x}^* = \boldsymbol{x}_0 + \alpha_0 \boldsymbol{p}_0 + \cdots + \alpha_{n-1}\boldsymbol{p}_{n-1}$$

$$\boldsymbol{p}_i^T Q \boldsymbol{x}^* = \boldsymbol{p}_i^T Q \boldsymbol{x}_0 + \alpha_i \boldsymbol{p}_i^T Q \boldsymbol{p}_i$$

$$\boldsymbol{p}_i^T Q(\boldsymbol{x}^* - \boldsymbol{x}_0) = \alpha_i \boldsymbol{p}_i^T Q \boldsymbol{p}_i$$

$$\Longrightarrow \alpha_i = -\frac{\boldsymbol{p}_i^T \boldsymbol{g}_i}{\boldsymbol{p}_i^T Q \boldsymbol{p}_i}$$

روش گرادیان مزدوج

$$\min f(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^T Q\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}^T\boldsymbol{x}$$
$$\boldsymbol{g}^* = \nabla f(\boldsymbol{x}^*) = Q\boldsymbol{x}^* - \boldsymbol{b}$$

آغاز:

$$\boldsymbol{p}_0 = -\boldsymbol{g}_0 = -Q\boldsymbol{x}_0 + \boldsymbol{b}$$

مرحلهٔ **i**-اُم

$$\boldsymbol{x}_{i+1} = \boldsymbol{x}_i + \alpha_i\boldsymbol{p}_i$$

نیاز به جستجو خط کامل

$$\boldsymbol{p}_{i+1} = -\boldsymbol{g}_{i+1} + \beta_i\boldsymbol{p}_i$$

روش گرادیان مزدوج

$$\boldsymbol{p}_{i+1} = -\boldsymbol{g}_{i+1} + \beta_i \boldsymbol{p}_i$$

$$\boldsymbol{p}_i^T Q \boldsymbol{p}_{i+1} = \boldsymbol{p}_i^T Q(-\boldsymbol{g}_{i+1} + \beta_i \boldsymbol{p}_i)$$

$$0 = -\boldsymbol{p}_i^T Q \boldsymbol{g}_{i+1} + \beta_i \boldsymbol{p}_i^T Q \boldsymbol{p}_i$$

$$\boldsymbol{p}_i^T Q \boldsymbol{g}_{i+1} = \beta_i \boldsymbol{p}_i^T Q \boldsymbol{p}_i$$

$$\beta_i = \frac{\boldsymbol{p}_i^T Q \boldsymbol{g}_{i+1}}{\boldsymbol{p}_i^T Q \boldsymbol{p}_i} = \frac{\boldsymbol{g}_{i+1}^T Q \boldsymbol{p}_i}{\boldsymbol{p}_i^T Q \boldsymbol{p}_i}$$

الگوریتم گرادیان مزدوج

$$f: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$$

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

- به دنبال یافتن کمینه

الگوریتم گرادیان مزدوج۲

مقداردهی اولیه $\boldsymbol{x}_0$ و $\boldsymbol{g}_0 = Q\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}$ و $\boldsymbol{p}_0 = -\boldsymbol{g}_0$

برای n بار

- $\alpha_i = -\frac{\boldsymbol{g}_i{}^T\boldsymbol{p}_i}{\boldsymbol{p}_i{}^T Q\boldsymbol{p}_i}$
- $\boldsymbol{x}_{i+1} = \boldsymbol{x}_i + \alpha_i\boldsymbol{p}_i$
- $\boldsymbol{g}_{i+1} = Q\boldsymbol{x}_{i+1} - \boldsymbol{b}$
- $\beta_i = \frac{\boldsymbol{g}_{i+1}{}^T Q\boldsymbol{p}_i}{\boldsymbol{p}_i{}^T Q\boldsymbol{p}_i}$
- $p_{i+1} = -\boldsymbol{g}_{i+1} + \beta_i\boldsymbol{p}_i$

مثال

$$Q=\begin{bmatrix}2 & -1\\ -1 & 2\end{bmatrix}, \mathbf{b}=\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}$$

$$\boldsymbol{x}_0=\begin{bmatrix}0\\0\end{bmatrix}$$

$$\boldsymbol{g}_0=\nabla f(\boldsymbol{x}_0)=Q\boldsymbol{x}-\boldsymbol{b}=-\boldsymbol{b}=\begin{bmatrix}-1\\0\end{bmatrix}$$

$$\boldsymbol{p}_0=-\boldsymbol{g}_0=\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}$$

$$\alpha_0=-\frac{\boldsymbol{g}_0{}^T\boldsymbol{p}_0}{\boldsymbol{p}_0{}^TQ\boldsymbol{p}_0}=-\frac{\begin{bmatrix}-1 & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}}{\begin{bmatrix}1 & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}2 & -1\\ -1 & 2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}}=\frac{1}{2}$$

$$\boldsymbol{x}_1=\boldsymbol{x}_0+\alpha_0\boldsymbol{p}_0=\begin{bmatrix}0\\0\end{bmatrix}+\frac{1}{2}\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\frac{1}{2}\\0\end{bmatrix}$$

$$\boldsymbol{g}_1=Q\boldsymbol{x}_1-\boldsymbol{b}=\begin{bmatrix}2 & -1\\ -1 & 2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\frac{1}{2}\\0\end{bmatrix}-\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0\\-\frac{1}{2}\end{bmatrix}$$

$$\beta_0=\frac{\boldsymbol{g}_1{}^TQ\boldsymbol{p}_0}{\boldsymbol{p}_0{}^TQ\boldsymbol{p}_0}=\frac{\begin{bmatrix}0 & -\frac{1}{2}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}2 & -1\\ -1 & 2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}}{\begin{bmatrix}1 & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}2 & -1\\ -1 & 2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}}=\frac{1}{4}$$

$$p_1=-\boldsymbol{g}_1+\beta_0p_0=-\begin{bmatrix}0\\-\frac{1}{2}\end{bmatrix}+\frac{1}{4}\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\frac{1}{4}\\\frac{1}{2}\end{bmatrix}$$

$$\alpha_1=-\frac{\boldsymbol{g}_1{}^T\boldsymbol{p}_1}{\boldsymbol{p}_1{}^TQ\boldsymbol{p}_1}=-\frac{\begin{bmatrix}0 & -\frac{1}{2}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\frac{1}{4}\\\frac{1}{2}\end{bmatrix}}{\begin{bmatrix}\frac{1}{4} & \frac{1}{2}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}2 & -1\\ -1 & 2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\frac{1}{4}\\\frac{1}{2}\end{bmatrix}}=\frac{2}{3}$$

$$\boldsymbol{x}_2=\boldsymbol{x}_1+\alpha_1\boldsymbol{p}_1=\begin{bmatrix}\frac{1}{2}\\0\end{bmatrix}+\frac{2}{3}\begin{bmatrix}\frac{1}{4}\\\frac{1}{2}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\frac{2}{3}\\\frac{1}{3}\end{bmatrix}$$

$$\boldsymbol{g}_2=Q\boldsymbol{x}_2-\boldsymbol{b}=\begin{bmatrix}2 & -1\\ -1 & 2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\frac{2}{3}\\\frac{1}{3}\end{bmatrix}-\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0\\0\end{bmatrix}$$

الگوریتم گرادیان مزدوج روش کاراتر

$f: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$

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

- به دنبال یافتن کمینه

الگوریتم گرادیان مزدوج۳

مقداردهی اولیه $\boldsymbol{x}_0$ و $\boldsymbol{g}_0 = Q\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}$ و $\boldsymbol{p}_0 = -\boldsymbol{g}_0$

تازمان $\boldsymbol{g}_i \neq 0$

- $\alpha_i = \frac{\boldsymbol{g}_i^T \boldsymbol{g}_i}{\boldsymbol{p}_i^T Q \boldsymbol{p}_i}$
- $\boldsymbol{x}_{i+1} = \boldsymbol{x}_i + \alpha_i \boldsymbol{p}_i$
- $\boldsymbol{g}_{i+1} = \boldsymbol{g}_i + \alpha_i Q \boldsymbol{p}_i$
- $\beta_i = \frac{\boldsymbol{g}_{i+1}^T \boldsymbol{g}_{i+1}}{\boldsymbol{g}_i^T \boldsymbol{g}_i}$
- $\boldsymbol{p}_{i+1} = -\boldsymbol{g}_{i+1} + \beta_i \boldsymbol{p}_i$

الگوریتم گرادیان مزدوج۲

مقداردهی اولیه $\boldsymbol{x}_0$ و $\boldsymbol{g}_0 = Q\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}$ و $\boldsymbol{p}_0 = -\boldsymbol{g}_0$

برای n بار

- $\alpha_i = -\frac{\boldsymbol{g}_i{}^T \boldsymbol{p}_i}{\boldsymbol{p}_i{}^T Q \boldsymbol{p}_i}$
- $\boldsymbol{x}_{i+1} = \boldsymbol{x}_i + \alpha_i \boldsymbol{p}_i$
- $\boldsymbol{g}_{i+1} = Q\boldsymbol{x}_{i+1} - \boldsymbol{b}$
- $\beta_i = \frac{\boldsymbol{g}_{i+1}{}^T Q \boldsymbol{p}_i}{\boldsymbol{p}_i{}^T Q \boldsymbol{p}_i}$
- $\boldsymbol{p}_{i+1} = -\boldsymbol{g}_{i+1} + \beta_i \boldsymbol{p}_i$

الگوریتم گرادیان مزدوج۳

مقداردهی اولیه $\boldsymbol{x}_0$ و $\boldsymbol{g}_0 = Q\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}$ و $\boldsymbol{p}_0 = -\boldsymbol{g}_0$

تازمان $\boldsymbol{g}_i \neq 0$

- $\alpha_i = \frac{\boldsymbol{g}_i{}^T \boldsymbol{g}_i}{\boldsymbol{p}_i{}^T Q \boldsymbol{p}_i}$
- $\boldsymbol{x}_{i+1} = \boldsymbol{x}_i + \alpha_i \boldsymbol{p}_i$
- $\boldsymbol{g}_{i+1} = \boldsymbol{g}_i + \alpha_i Q \boldsymbol{p}_i$
- $\beta_i = \frac{\boldsymbol{g}_{i+1}{}^T \boldsymbol{g}_{i+1}}{\boldsymbol{g}_i{}^T \boldsymbol{g}_i}$
- $\boldsymbol{p}_{i+1} = -\boldsymbol{g}_{i+1} + \beta_i \boldsymbol{p}_i$

مثال

$$Q = \begin{bmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 2 \end{bmatrix}, \mathbf{b} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\boldsymbol{x}_0 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\boldsymbol{g}_0 = \nabla f(\boldsymbol{x}_0) = Q\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b} = -\boldsymbol{b} = \begin{bmatrix} -1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\boldsymbol{p}_0 = -\boldsymbol{g}_0 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\alpha_0 = \frac{\boldsymbol{g}_0{}^T \boldsymbol{g}_0}{\boldsymbol{p}_0{}^T Q \boldsymbol{p}_0} = \frac{\begin{bmatrix} -1 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} -1 \\ 0 \end{bmatrix}}{\begin{bmatrix} 1 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}} = \frac{1}{2}$$

$$\boldsymbol{x}_1 = \boldsymbol{x}_0 + \alpha_0 \boldsymbol{p}_0 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} + \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\boldsymbol{g}_1 = \boldsymbol{g}_0 + \alpha_0 Q \boldsymbol{p}_0 = \begin{bmatrix} -1 \\ 0 \end{bmatrix} + \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} 0 \\ -\frac{1}{2} \end{bmatrix}$$

$$\beta_0 = \frac{\boldsymbol{g}_1{}^T \boldsymbol{g}_1}{\boldsymbol{g}_0{}^T \boldsymbol{g}_0} = \frac{\begin{bmatrix} 0 & -\frac{1}{2} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0 \\ -\frac{1}{2} \end{bmatrix}}{\begin{bmatrix} -1 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} -1 \\ 0 \end{bmatrix}} = \frac{1}{4}$$

$$p_1 = -\boldsymbol{g}_1 + \beta_0 p_0 = \begin{bmatrix} 0 \\ \frac{1}{2} \end{bmatrix} + \frac{1}{4}\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{4} \\ \frac{1}{2} \end{bmatrix}$$

$$\alpha_1 = \frac{\boldsymbol{g}_1{}^T \boldsymbol{g}_1}{\boldsymbol{p}_1{}^T Q \boldsymbol{p}_1} = \frac{2}{3}$$

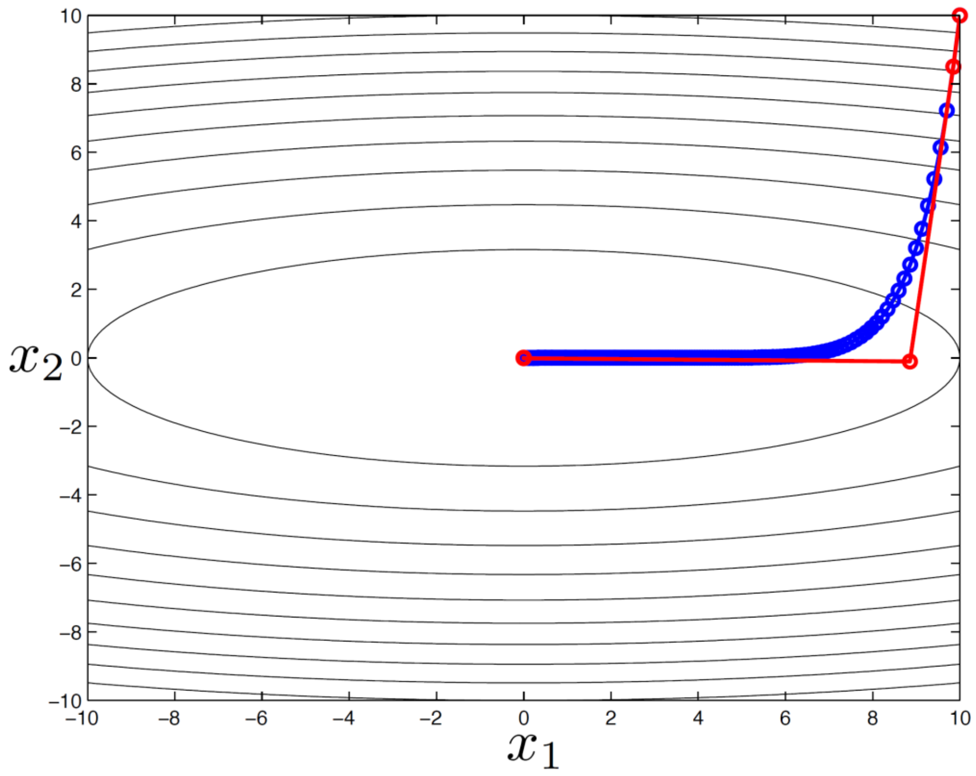
$$\boldsymbol{x}_2 = \boldsymbol{x}_1 + \alpha_1 \boldsymbol{p}_1 = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} \\ 0 \end{bmatrix} + \frac{2}{3}\begin{bmatrix} \frac{1}{4} \\ \frac{1}{2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{2}{3} \\ \frac{1}{3} \end{bmatrix}$$

$$\boldsymbol{g}_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

مثال- تندترین نزول در برابر گرادیان مزدوج

$$f(\mathbf{x}) = x_1^2 + 10x_2^2 \qquad \mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 10 \end{pmatrix}, \mathbf{b} = 0$$

$$\alpha_i = 0.015$$



گرادیان مزدوج

«تصحیح» جهت شدیدترین نزول

$$\boldsymbol{p}_i = -\nabla f(x_i) + \beta_i \boldsymbol{p}_{i-1}$$

محاسبهٔ β_i جهت مزدوج کردن p_{i-1} و p_i

- اجازهٔ استفاده از جهت قبلی

مزایا

- کاراتر از گردایان کاهشی
- پیاده‌سازی ساده به همان میزان
- صرفا اطلاع مرتبهٔ اول
- حافظهٔ کم
- قابل استفاده جهت توابع غیرخطی

معایب

- سرعت همگرایی متوسط
- حساس به مقیاس‌گذاری

سرعت همگرائی گرادیان مزدوج

$$0 \leq \lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \cdots \leq \lambda_n$$

$$\|\boldsymbol{x}_{k+1} - \boldsymbol{x}^*\|_Q^2 \leq \left(\frac{\lambda_{n-k} - \lambda_1}{\lambda_{n-k} + \lambda_1}\right)^2 \|\boldsymbol{x}_0 - \boldsymbol{x}^*\|_Q^2$$

$$\|\boldsymbol{x}_{k+1} - \boldsymbol{x}^*\|_Q \approx \epsilon \|\boldsymbol{x}_0 - \boldsymbol{x}^*\|_Q$$

$$\|\boldsymbol{x}_k - \boldsymbol{x}^*\|_Q \leq 2\left(\frac{\sqrt{\kappa(Q)} - 1}{\sqrt{\kappa(Q)} + 1}\right)^2 \|\boldsymbol{x}_0 - \boldsymbol{x}^*\|_Q$$

- $\kappa(Q) = \|Q\| \left\|Q^{-۱}\right\|$
  - $\kappa(Q)$ کوچک: «خوش وضعیتی»
  - $\kappa(Q)$ بزرگ: بدوضعیتی»!
  - گاهی اوقات امکان تعریف $\kappa(Q)$ با مقادیر ویژه
    - چه مواقعی؟

سرعت همگرائی گرادیان مزدوج

$$\|\boldsymbol{x}_{k+1} - \boldsymbol{x}^*\| \le \frac{\sqrt{\lambda_n} - \sqrt{\lambda_1}}{\sqrt{\lambda_n} + \sqrt{\lambda_1}} \|\boldsymbol{x}_k - \boldsymbol{x}^*\|$$

در صورت غلبهٔ λ_n بر λ_1

$$\frac{\sqrt{\lambda_n} - \sqrt{\lambda_1}}{\sqrt{\lambda_n} + \sqrt{\lambda_1}} = 1 - 2\sqrt{\frac{\lambda_1}{\lambda_n}} = 1 - \frac{2}{\sqrt{\kappa(Q)}}$$

تابع درجه دو
- بیضی‌های متحدالمرکز

هر چه $\kappa(Q)$ بزرگتر
- بیضی کشیده‌تر
- کاهش همگرائی

پیش‌شرطی

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

تغییر متغیرها

- فرض S معکوس‌پذیر و $\boldsymbol{y} = \boldsymbol{S}\boldsymbol{x}$

جایگذاری در تابع هدف

$$\phi(y) = \frac{1}{2}\boldsymbol{y}^T\left(S^{-T}QS^{-1}\right)\boldsymbol{y} - \left(S^{-T}\boldsymbol{b}\right)^T\boldsymbol{y}$$

$$\left(S^{-T}QS^{-1}\right)\boldsymbol{y} = \left(S^{-T}\boldsymbol{b}\right)^T$$

سرعت همگرائی به جای Q وابسته به مقدارویژه‌های ماتریس $S^{-T}QS^{-1}$

- پس به دنبال S-ی که مقدار ویژه‌های مناسبتر جهت همگرائی
  - تبدیل به ماتریسی با عدد شرط کمتر

الگوریتم گرادیان مزدوج پیش‌شرطی

$f: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$

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

- به دنبال یافتن کمینه
- $M = S^T S$

الگوریتم گرادیان مزدوج پیش‌شرطی

M پیش‌شرط‌ساز و

مقداردهی اولیه $\boldsymbol{x}_0$ و $\boldsymbol{g}_0 = Q\boldsymbol{x}_0 - \boldsymbol{b}$

حل $M\boldsymbol{y}_0 = \boldsymbol{g}_0$

قرار دادن $\boldsymbol{p}_0 = -\boldsymbol{y}_0$

تازمان $\boldsymbol{g}_i \neq 0$

- $\alpha_i = \dfrac{\boldsymbol{g}_i{}^T \boldsymbol{y}_i}{\boldsymbol{p}_i{}^T Q \boldsymbol{p}_i}$
- $\boldsymbol{x}_{i+1} = \boldsymbol{x}_i + \alpha_i \boldsymbol{p}_i$
- $\boldsymbol{g}_{i+1} = \boldsymbol{g}_i + \alpha_i Q \boldsymbol{p}_i$
- حل $M\boldsymbol{y}_{i+1} = \boldsymbol{g}_{i+1}$
- $\beta_i = \dfrac{\boldsymbol{g}_{i+1}{}^T \boldsymbol{y}_{i+1}}{\boldsymbol{g}_i{}^T \boldsymbol{y}_i}$
- $p_{i+1} = -\boldsymbol{y}_{i+1} + \beta_i p_i$

پیش‌شرطی

روش مستقیم بروزکردن x

$$W = S^T S$$
$$\boldsymbol{p}_0 = W\boldsymbol{g}_0$$
$$\boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{x}_k + \alpha_k \boldsymbol{p}_k$$
$$\boldsymbol{p}_{k+1} = W\boldsymbol{g}_{k+1} + \beta_k \boldsymbol{p}_k$$

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

منابع

[نازه‌دل]

[لوئن‌برگر]

W. Hager, H. Zhang, “A Survey Of Nonlinear Conjugate Gradient Methods,” Pac. J. Optim. 2, No. 1, 35-58, 2006.

“Conjugate Gradient,” https://bookdown.org/rdpeng/advstatcomp/conjugate-gradient.html

M. Zibulevsky, “Method of Conjugate Gradients,” https://www.youtube.com/watch?v=hZVK_PGE0_I

“Proving the Vector Projection Formula,” https://www.youtube.com/watch?v=MdfArHlKWZc

“Orthogonal Projections,” http://mathonline.wikidot.com/orthogonal-projections