Modifikace metody BFGS s omezenou pamětí, založené na myšlence sdružených směrů *

Jan Vlček, Ladislav Lukšan
ICS ASCR Praha 8, L. Lukšan také TU Liberec

J. Vlček, L. Lukšan: *A conjugate directions approach to improve the limited-memory BFGS method*, Report V-1120, ICS ASCR, Prague 2011.

*Tato práce vznikla s podporou RVO: 67985807

1. ÚVOD

Předmět práce: úprava metody BFGS s omezenou pamětí (L-BFGS) pro nepodmíněnou minimalizaci pomocí vektorových korekcí, které využívají hodnot z předchozí iterace.

Běžně – takové korekce se odvozují z interpolačních metod.

Zde – korekce odvozené z myšlenky **sdružených směrů** (podobný přístup lze najít ve zprávě Hu, Storey 1991).

Pro kvadratické účelové funkce je zlepšení konvergence **nejlepší možné** v jistém smyslu.

Metoda L-BFGS (Liu, Nocedal 1989) patří mezi **metody s proměnnou metrikou** typu line search - kvazinewtonovské metody pro efektivní lokální minimalizaci diferencovatelných funkcí $f : \mathcal{R}^N \to \mathcal{R}$, založené na lokálním kvadratickém modelu

$$Q(d) = \frac{1}{2} d^T B d + g^T d, \;\; g = \nabla f(x), \;\; d = -Hg \ldots \text{směrový vektor},$$

$B = H^{-1}$ ... aproximace **Hessovy matice** funkce f v bodě x.

Zvolíme $x_0 \in \mathcal{R}^N$. **Iterace** $x_{k+1} \triangleq x_+$ se generuje: $x_+ = x + td$, $k > 0$, $t > 0$ ... délka kroku, splňující (slabé) Wolfeovy podmínky

$$f(x_+) - f(x) \le \varepsilon_1 \, t \, g^T d, \quad g_+^T d \ge \varepsilon_2 \, g^T d, \quad 0 < \varepsilon_1 < \frac{1}{2}, \;\; \varepsilon_1 < \varepsilon_2 < 1.$$

Matice se konstruují iteračně, obvykle $H_0 = I$, další H_+ spd, blízko k H a splňující kvazinewtonovskou podmínku

$$H_+ y = s, \quad y = g_+ - g, \quad s = x_+ - x.$$

Metoda **BFGS** (1970) patří mezi nejefektivnější metody s proměnnou metrikou; aktualizaci lze psát ve tvaru

$$H_+ = \frac{1}{b} s s^T + V H V^T, \quad V = I - \frac{1}{b} s y^T, \quad b = s^T y,$$

na němž je právě **L-BFGS** – metoda BFGS s omezenou pamětí, adaptace metody BFGS pro velký počet proměnných, založena; neukládají se $N \times N$ matice H, jen max m dvojic vektorů s, y ($m \geq 1$ je parametr), směrový vektor $d = -Hg$ se počítá **Strangovými rekurencemi** (Nocedal 1980).

Vektorové korekce

Uvažujeme korigované vektory

$$\bar{s}_0 = s_0, \ \bar{y}_0 = y_0, \qquad \bar{s}_k = s_k - \alpha_k \bar{s}_{k-1}, \ \bar{y}_k = y_k - \beta_k \bar{y}_{k-1},$$

$k > 0$, s takovými α_k, $\beta_k \in \mathcal{R}$, aby $\bar{s}_k^T \bar{y}_k > 0$.

Korigovaný směrový vektor: $-\bar{H}_k g_k$ místo $-H_k g_k$, kde $\bar{H}_0 = I$ a matici $\bar{H}_{k+1}$ získáme tak, že počáteční matici

$$(s_k^T y_k / y_k^T y_k)\, I$$

opakovaně aktualizujeme užitím aktualizace BFGS s korigovanými vektory $\bar{s}_i$, $\bar{y}_i$ místo s_i, y_i, $i \in [\max(k-m+1, 0), k]$, $k \geq 0$.

2. KORIGOVANÁ AKTUALIZACE BFGS

Abychom zjistili, jak volba α_k, β_k ovlivní matici $\bar{H}_{k+1}$, budeme vyšetřovat **vliv parametrů** α, β na vlastnosti aktualizace

$$(*) \qquad \bar{H}_+ = \frac{1}{\bar{b}} \bar{s}\,\bar{s}^T + \bar{V}\bar{H}\bar{V}^T, \qquad \bar{V} = I - \frac{1}{\bar{b}} \bar{s}\,\bar{y}^T, \qquad \bar{b} = \bar{s}^T\bar{y} > 0$$

pro **libovolnou** spd matici $\bar{H}$ splňující $\bar{H}\bar{y}_- = \bar{s}_-$ (zde $\bar{H} \neq \bar{H}_k$).

Je-li (*) poslední z aktualizací, které vytvářejí matici $\bar{H}_{k+1}$, je $\bar{H}\bar{y}_- = \bar{s}_-$ vždy splněno pro $m > 1$ (QNP s předchozími vektory).

Podmínky konjugovanosti $\bar{s}$, $\bar{s}_-$ vzhledem k $\bar{B} = \bar{H}^{-1}$, $\bar{B}_+ = \bar{H}_+^{-1}$:

$$\bar{s}_-^T \bar{B}_+ \bar{s} = \bar{s}_-^T \bar{B} \bar{s} = 0.$$

Protože $\bar{B}_+\bar{s} = \bar{y}$, $\bar{B}\bar{s}_- = \bar{y}_-$, lze psát: $\bar{s}_-^T\bar{y} = \bar{s}^T\bar{y}_- = 0 \;\Rightarrow\; \alpha$, β.

Jinak: kromě QNP $\bar H_+ \bar y = \bar s$ je splněna i podmínka pro $\bar y_-$, $\bar s_-$:

Lemma 1. *Buď $\bar H$ lib. spd matice s $\bar H \bar y_- = \bar s_-$, $\bar H_+$ z (*) a vektory $\bar s, \bar H \bar y$ lineárně nezávislé. Pak $\bar s_-^T \bar B_+ \bar s = \bar s_-^T \bar B \bar s = 0 \Leftrightarrow \bar H_+ \bar y_- = \bar s_-$.*

Tato formulace konjugovanosti umožňuje **odlišit** role $\bar s^T \bar y_-$, $\bar s_-^T \bar y$:

Lemma 2. *Buď $\bar H$ lib. spd matice s $\bar H \bar y_- = \bar s_-$ a $\bar H_+$ z (*). Pak*

$$\bar b (\bar H_+ \bar y_- - \bar s_-)^T \bar B_+ (\bar H_+ \bar y_- - \bar s_-) = (\bar s_-^T \bar y - \bar s^T \bar y_-)^2 + \omega (\bar s^T \bar y_-)^2,$$

kde $\omega = \bar y^T \bar H \bar y / \bar b - \bar b / \bar s^T \bar B \bar s \geq 0$, $\omega = 0$ jen při závislosti $\bar s$, $\bar H \bar y$.

ω může být velké, proto by mělo hlavně být $0 = \bar s^T \bar y_- = s^T \bar y_- - \alpha \bar b_-$, má-li být $\bar H_+ \bar y_- \approx \bar s_- \;\Rightarrow\; \alpha = s^T \bar y_- / \bar b_-$ ... užito všude v dalším.

Pro β je základní volba $\beta_Z = \bar{s}_-^T y / \bar{b}_- \;\Rightarrow\; \bar{s}_-^T \bar{y} = 0,\ \bar{H}_+ \bar{y}_- = \bar{s}_-$ podle lemmatu 2. Tato hodnota má další zajímavé vlastnosti:

Věta 1. *Buď $\bar{H}$ lib. spd matice s $\bar{H}\bar{y}_- = \bar{s}_-$ a $\bar{H}_+$ z (*). Je-li $\alpha = s^T \bar{y}_- / \bar{b}_-$, pak $\bar{s}^T \bar{y}_- = 0$, $\bar{b} = b - \alpha \beta_Z \bar{b}_-$ a volba $\beta = \beta_Z$ minimalizuje jak $\bar{y}^T \bar{H} \bar{y}$ tak* cond$(\bar{H}^{1/2} \bar{B}_+ \bar{H}^{1/2})$ *jako funkce β.*

Věta 2. *Buď $\bar{H}_-$ lib. spd matice, $\bar{H}$ aktualizace $(*)$ matice $\bar{H}_-$ s $\bar{s}_-, \bar{y}_-, \bar{b}_- > 0$ místo $\bar{s}, \bar{y}, \bar{b}$, $\bar{H}_+$ spd, $\bar{H}_+ \bar{y}_- = \bar{s}_-$, $W = \bar{B}_+^{1/2} \bar{H} \bar{B}_+^{1/2}$ a $W_- = \bar{B}_+^{1/2} \bar{H}_- \bar{B}_+^{1/2}$. Pak (Frobeniovy maticové normy)*

$$\|I - W_-\|_F^2 - \|I - W\|_F^2 = \|W - W_-\|_F^2 \geq (\bar{y}_-^T \bar{H}_- \bar{y}_- / \bar{b}_- - 1)^2.$$

$\Rightarrow$ matice $\bar{H}_+$ je k $\bar{H}$ v jistém smyslu vždy blíže, než k $\bar{H}_-$.

Ačkoliv volba β_Z dává dobré výsledky, není vždy nejlepší. Mělo by také být $\beta \approx \alpha$, má-li být přibližně splněna **i QNP s nekorigovanými** vektory s, y (L3). Často je lepší $\pm\sqrt{\beta_Z \alpha}$ – výhodné pro globální konvergenci – dále, navíc zajímavé vlastnosti (L4).

Lemma 3. *Buď $\bar{H}$ lib. spd matice s $\bar{H}\bar{y}_- = \bar{s}_-$ a $\bar{H}_+$ z (*). Je-li $\alpha = s^T\bar{y}_-/\bar{b}_-$, pak*

$$(\bar{H}_+ y - s)^T \bar{B}_+ (\bar{H}_+ y - s) = \bar{b}_- \left[\frac{(s^T\bar{y}_-)^2}{\bar{b}\,\bar{b}_-} (\beta - \beta_Z)^2 + (\beta - \alpha)^2 \right].$$

Lemma 4. *Buď $\bar{H}$ lib. spd matice s $\bar{H}\bar{y}_- = \bar{s}_-$ a $\bar{H}_+$ z (*). Je-li $\alpha = s^T\bar{y}_-/\bar{b}_-$, $\beta^2 = \beta_Z \alpha = \bar{s}_-^T y\, s^T\bar{y}_-/\bar{b}_-^2$, pak $y^T(\bar{H}_+ y - s) = 0$.*

3. VÝSLEDKY PRO KVADRATICKÉ FUNKCE

Zde předpokládáme $\beta = \alpha$, aby $\bar{y}_k = G\bar{s}_k$, G … Hessova matice. Věta říká, že zlepšení konvergence pomocí korekcí s, y je v jistém smyslu **nejlepší možné:** (Frobeniova maticová norma)

Věta 3. *Buď $\bar{H}$ lib. spd matice s $\bar{H}\bar{y}_- = \bar{s}_-$, $\bar{H}_+$ z (*) a f kvadratická funkce $f(x) = \frac{1}{2}(x - x^*)^T G(x - x^*)$ se spd maticí G, $x^* \in \mathcal{R}^N$. Jsou-li vektory s, $\bar{s}_-$ lineárně nezávislé, pak je vždy $\bar{b} > 0$ a volba $\alpha = \hat{\alpha} = s^T\bar{y}_-/\bar{b}_- = \bar{s}_-^T y/\bar{b}_-$ implikuje $\bar{H}_+ y = s$ a minimalizuje hodnoty $\bar{b}$, $\|G^{1/2}\bar{H}_+ G^{1/2} - I\|_F$ jako funkce α.*

L-BFGS s přesnými LS generuje konjugované směrové vektory a zachovává m QNP. Podobně i zde pro **jednotkové kroky**:

Věta 4. *Buď* $x_0, x^* \in \mathcal{R}^N$, $\bar{k} > 0$, $m \geq 1$, f *kvadratická funkce* $f(x) = \frac{1}{2}(x-x^*)^T G(x-x^*)$ *se spd maticí* G *a pro* $0 \leq k \leq \bar{k}$ *buďte iterace* $x_{k+1} = x_k + s_k$ *generovány metodou* $s_k = -t_k \bar{H}_k g_k$, $t_k > 0$, $g_k = \nabla f(x_k)$, *s těmito maticemi* $\bar{H}_k$: $\bar{H}_0 = I$ *a matice* $\bar{H}_{k+1}$, $0 \leq k < \bar{k}$, *jsou dány opakovanou BFGS aktualizací s vektory* $(\bar{s}_{k-\tilde{m}}, \bar{y}_{k-\tilde{m}}), \ldots, (\bar{s}_k, \bar{y}_k)$ *a počáteční maticí* $(s_k^T y_k / y_k^T y_k) I$, *kde* $\tilde{m} = \min(k, m-1)$, $y_k = g_{k+1} - g_k$, *a veličiny* $\bar{s}_j$, $\bar{y}_j$, $\bar{b}_j$, $j \geq 0$, *jsou formálně definovány* $\bar{s}_0 = s_0$, $\bar{y}_0 = y_0$, $\bar{s}_{j+1} = s_{j+1} - \alpha_{j+1} \bar{s}_j$, $\bar{y}_{j+1} = y_{j+1} - \alpha_{j+1} \bar{y}_j$, $\alpha_{j+1} = s_{j+1}^T \bar{y}_j / \bar{b}_j$, $\bar{b}_j = \bar{s}_j^T \bar{y}_j$.

Je-li každý generovaný vektor s_k *lineárně nezávislý na* $\bar{s}_{k-1}$, $0 < k \leq \bar{k}$, *je metoda dobře definována. Je-li navíc* $t_{k+1} = 1$ *pro nějaké* k, $0 \leq k < \bar{k}$, *platí*

$$\bar{H}_{k+i} \bar{y}_k = \bar{s}_k, \;\; \bar{s}_k^T G \bar{s}_{k+i} = 0, \;\; \bar{s}_k^T g_{k+i+1} = 0, \;\; i \in [1, \min(\tilde{m}+1, \bar{k}-k)].$$

4. IMPLEMENTACE

Podle předchozí teorie bychom měli korigovat, kdykoliv se účelová funkce blíží **kvadratické**. Jako míru odchylky lze vzít např. $|s_k^T y_{k-1} - s_{k-1}^T y_k|$ (0 pro kvadratické funkce). Zde bereme

$$\delta = |s_k^T \bar{y}_{k-1} - \bar{s}_{k-1}^T y_k| = \bar{b}_{k-1} |\alpha_k - \beta_k|$$

– snáze použitelné, velmi podobné výsledky. Nekorigujeme, je-li $\delta \geq \bar{b}_{k-1}^2 / b_k$, mají-li čísla $s_k^T \bar{y}_{k-1}$, $\bar{s}_{k-1}^T y_k$ různá znaménka nebo je-li $\bar{b}_k \leq 10^{-6} b_k$.

Za těchto podmínek je $0 \leq \beta_Z \alpha \leq b/\bar{b}_-$ (V1: $\bar{b} = b - \alpha \beta_Z \bar{b}_-$) $\Rightarrow$ volba $\beta = \pm\sqrt{\beta_Z \alpha}$ výhodná pro globální konvergenci; navíc je obvykle pro $\bar{b}_k > 10^{-2} b_k$ lepší.

Ostatní úpravy nevýznamné, jen pro globální konvergenci.

Algoritmus 4.1

Data: Počet m BFGS aktualizací na iteraci, parametry pro určení délky kroku ε_1, ε_2, $0 < \varepsilon_1 < \frac{1}{2}$, $\varepsilon_1 < \varepsilon_2 < 1$ a korekční parametr $\Delta > 1$.

Krok 0: **Inicializace**. Definujeme startovací bod $x_0 \in \mathcal{R}^N$, matici $\bar{H}_0 = I$, směrový vektor $d_0 = -g_0$ a čítač iterací $k = 0$.

Krok 1: **Jednorozměrná minimalizace**. Vypočteme $x_{k+1} = x_k + t_k d_k$ (WP), $s_k = x_{k+1} - x_k$, $g_{k+1} = \nabla f(x_{k+1})$, $y_k = g_{k+1} - g_k$ a $b_k = s_k^T y_k$. Pro $k = 0$ položíme $\bar{s}_k = s_k$, $\bar{y}_k = y_k$ a přejdeme na krok 4.

Krok 2: **Příprava korekce**. Položíme $\alpha_k = s_k^T \bar{y}_{k-1} / \bar{b}_{k-1}$, $\beta_k = \bar{s}_{k-1}^T y_k / \bar{b}_{k-1}$. Je-li $\alpha_k \beta_k \le 0$ nebo $\bar{b}_k \le 10^{-6} b_k$ nebo $|\alpha_k - \beta_k| \ge \bar{b}_{k-1}/b_k$, položíme $\alpha_k = \beta_k = 0$ a přejdeme na krok 3. Je-li $|\beta_k|^2 > 4 b_k / \bar{b}_{k-1}$ nebo $\bar{b}_k > 10^{-2} b_k$, nahradíme β_k číslem $\beta_k \sqrt{\alpha_k / \beta_k}$.

Krok 3: **Korekce**. Položíme $\bar{s}_k = s_k - \alpha_k \bar{s}_{k-1}$, $\bar{y}_k = y_k - \beta_k \bar{y}_{k-1}$.

Krok 4: **Definice aktualizací**. Buď $\tilde{m} = \min(k, m-1)$. Je-li $|\bar{s}_{k-\tilde{m}}| / |s_{k-\tilde{m}}| > \Delta$ nebo $|\bar{y}_{k-\tilde{m}}| / |y_{k-\tilde{m}}| > \Delta$, položíme $\bar{s}_{k-\tilde{m}} = s_k$, $\bar{y}_{k-\tilde{m}} = y_k$ a $\bar{b}_{k-\tilde{m}} = b_k$. Definujeme matici $\bar{H}_{k+1}$ opakovanou aktualizací BFGS s vektory $(\bar{s}_{k-\tilde{m}}, \bar{y}_{k-\tilde{m}}), \dots, (\bar{s}_k, \bar{y}_k)$ a počáteční maticí $(s_k^T y_k / y_k^T y_k) I$.

Krok 5: **Směrový vektor**. Vypočteme $d_{k+1} = -\bar{H}_{k+1} g_{k+1}$ pomocí Strangových rekurencí, položíme $k := k+1$ a přejdeme na krok 1.

5. GLOBÁLNÍ KONVERGENCE

Předpoklad 1. *Účelová funkce* $f : \mathcal{R}^N \rightarrow \mathcal{R}$ *je zdola omezená a stejnoměrně konvexní a má omezené druhé derivace (tj.* $0 < \underline{G} \leq \underline{\lambda}(G(x)) \leq \overline{\lambda}(G(x)) \leq \overline{G} < \infty$, $x \in \mathcal{R}^N$, *kde* $\underline{\lambda}(G(x))$, $\overline{\lambda}(G(x))$ *jsou nejmenší a největší vlastní čísla Hessovy matice* $G(x)$*).*

Věta 5. *Nechť účelová funkce* f *splňuje předpoklad 1. Pak algoritmus 4.1 generuje posloupnost* $\{g_k\}$*, která buď terminuje s* $g_k = 0$ *pro nějaké* k*, nebo platí* $\lim_{k \rightarrow \infty} |g_k| = 0$.

6. NUMERICKÉ VÝSLEDKY

Porovnáme počty vyčíslení a doby výpočtu pro 3 kolekce úloh: **test 11** (Lukšan et al. 2010, 55 úloh, $N = 1000$-5000 -upravená CUTE, Bongartz et al. 1995), **test 12** (Andrei 2008, 73 úloh, $N = 5000$) a **test 25** (Lukšan et al. 2010, 68 úloh, $N = 10\,000$).

Parametry: $m = 5$, přesnost $\|g(x^\star)\|_\infty \le 10^{-6}$,

$$\Delta = 100, \qquad \varepsilon_1 = 10^{-4}, \ \varepsilon_2 = 0.8.$$

Porovnáváme s **metodami:** L-BFGS a metoda z PANM 15.

Výsledky jsou uvedeny v tabulce 1, kde 'NFE' je celkový počet vyčíslení hodnot funkcí a rovněž gradientů pro všechny úlohy a 'Čas' celková doba výpočtu ve vteřinách.

Metoda	Test 11		Test 12		Test 25	
	NFE	Čas	NFE	Čas	NFE	Čas
L-BFGS	80539	32.50	43648	46.17	462104	519.40
Algorithm 4.1	64395	30.20	34472	37.57	296321	381.08
Alg. PANM 15	80328	34.52	43182	56.67	512880	649.15

Tabulka 1. Porovnání s L-BFGS a metodou z PANM 15.

Pro lepší znázornění efektivity a spolehlivosti porovnáme metody u testu 25 i pomocí **výkonnostních profilů** (Dolan, Moré 2002):

$$\pi_M(\tau) = \frac{\text{počet úloh s } \ldots \ \log_2(\tau_{\acute{U},M}) \leq \tau}{\text{celkový počet úloh}},$$

kde

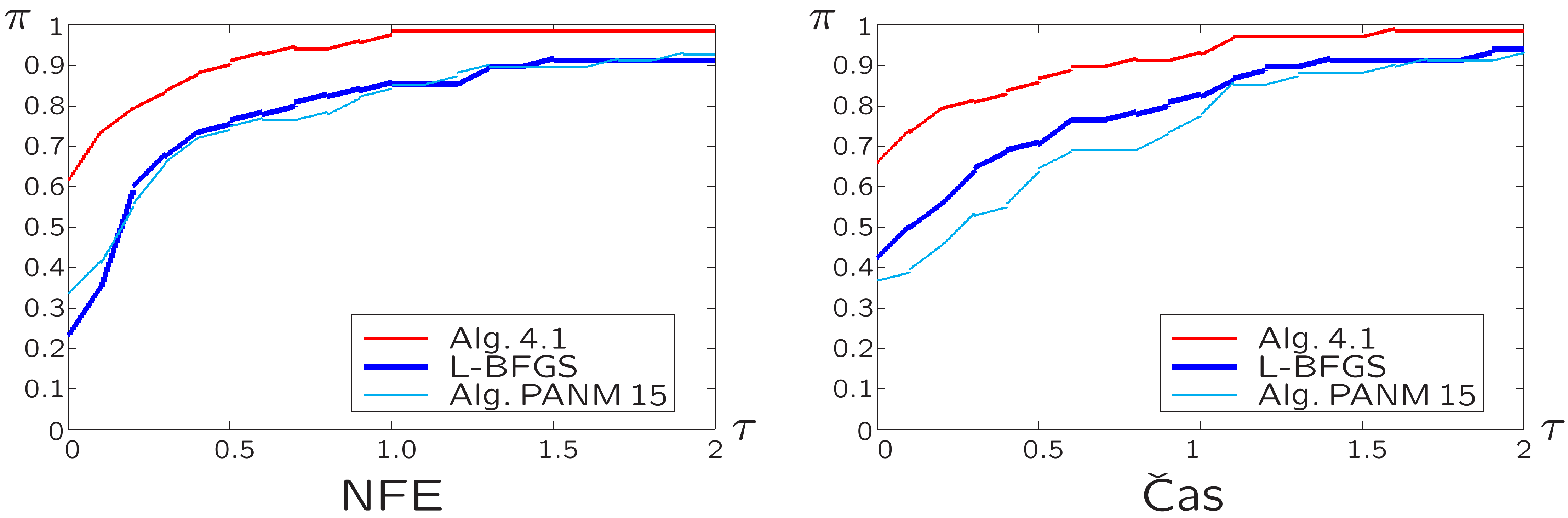
$$\tau_{\acute{U},M} = P_{\acute{U},M} / \min_M P_{\acute{U},M},$$

resp.

$$\tau_{\acute{U},M} = \infty \ \ldots \text{ když metoda } M \ \textbf{selže} \text{ při řešení úlohy } \acute{U},$$

$P_{\acute{U},M}$ je počet funkčních vyčíslení | čas potřebný k vyřešení úlohy $\acute{U}$ metodou M, $\tau \geq 0$.

Hodnota $\pi_M(0)$ dává procentní počet úloh, kdy je metoda M nejlepší a $\pi_M(\tau)$ pro τ velká je procentní počet úloh, které metoda M vyřeší; čím výše je křivka, tím lepší metodě odpovídá.



Obrázek 1 (Test 25, 68 úloh, $m = 5$, $N = 10\,000$).

Literatura

[1] N. Andrei, *An unconstrained optimization test functions collection*, Advanced Modeling and Optimization, 10 (2008) 147-161.

[2] I. Bongartz, A.R. Conn, N. Gould, P.L. Toint: *CUTE: constrained and unconstrained testing environment*, ACM Transactions on Mathematical Software 21 (1995), 123-160.

[3] E.D.Dolan, J.J.Moré: *Benchmarking optimization software with performance profiles*, Mathematical Programming 91 (2002) 201-213.

[4] Y.F.Hu, C.Storey: *Motivating Quasi-Newton Updates by Preconditioned Conjugate Gradient Methods*, Math. Report A 150, Department of Mathematical Sciences, Loughborough University of Technology, England, 1991.

[5] D.C. Liu, J. Nocedal: *On the limited memory BFGS method for large scale optimization*, Math. Programming 45 (1989) 503-528.

[6] L. Lukšan, C. Matonoha, J. Vlček: *Sparse test problems for unconstrained optimization*, Report V-1064, Praha, ICS ASCR, 2010.

[7] L. Lukšan, C. Matonoha, J. Vlček: *Modified CUTE problems for sparse unconstrained optimization*, Report V-1081, Prague, ICS AS CR, 2010.

[8] J. Nocedal: *Updating quasi-Newton matrices with limited storage*, Math. Comp. 35 (1980) 773-782.

DĚKUJI ZA POZORNOST !