Стохастическая оптимизация (продолжение). Координатный спуск

Методы оптимизации

Александр Безносиков

Московский физико-технический институт

7 декабря 2023

В прошлый раз

- Рассматривали постановку вида (оффлайн, ERM):

$$\min_{x \in \mathbb{R}^d} \left[f(x) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} f_i(x) \right].$$

- Предполагаем, что вызывать полный градиент дорого, но можно, генерируя равномерно и независимо i_k, получить

$$\mathbb{E}_{i_k}[\nabla f_{i_k}(x^k)] = \nabla f(x^k).$$

В прошлый раз

- Рассматривали постановку вида (оффлайн, ERM):

$$\min_{x\in\mathbb{R}^d} \left[f(x) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} f_i(x) \right].$$

- Предполагаем, что вызывать полный градиент дорого, но можно, генерируя равномерно и независимо i_k, получить

$$\mathbb{E}_{i_k}[\nabla f_{i_k}(x^k)] = \nabla f(x^k).$$

- Идея – взять метод на подобии SGD:

$$x^{k+1} = x^k - \gamma g^k,$$

где
$$g^k \to \nabla f(x^*) = 0, \quad \text{при} \quad x^k \to x^*.$$

SAGA

Уже знакомы

Алгоритм 1 SAGA

Вход: размер шага $\gamma > 0$, стартовая точка $x^0 \in \mathbb{R}^d$, значения памяти $y_i^0 = 0$ для всех $i \in [n]$, количество итераций K

for $k = 0, 1, \ldots, K-1$ **do**

  Сгенерировать независимо i_k

  Вычислить $g^k = \nabla f_{i_k}(x^k) - y_{i_k}^k + \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n} y_j^k$

  Обновить $y_i^{k+1} = \begin{cases} \nabla f_i(x^k), & \text{если } i = i_k \\ y_i^k, & \text{иначе} \end{cases}$

  $x^{k+1} = x^k - \gamma g^k$

end for

Выход: x^K

SAGA

- Идея – если я считал когда-то градиент для f_i, то зачем его забывать? Сохраним!

SAGA

- Идея – если я считал когда-то градиент для f_i, то зачем его забывать? Сохраним!
- $\frac{1}{n}\sum\limits_{j=1}^{n} y_j^k$ – «запаздывающая» версия $\nabla f(x^k)$.

SAGA

- Идея – если я считал когда-то градиент для f_i, то зачем его забывать? Сохраним!
- $\frac{1}{n}\sum\limits_{j=1}^{n} y_j^k$ – «запаздывающая» версия $\nabla f(x^k)$.
- $\mathbb{E}\left[g^k \mid x^k\right] = \nabla f(x^k)$.

SAGA

- Идея – если я считал когда-то градиент для f_i, то зачем его забывать? Сохраним!
- $\frac{1}{n}\sum\limits_{j=1}^{n} y_j^k$ – «запаздывающая» версия $\nabla f(x^k)$.
- $\mathbb{E}\left[g^k \mid x^k\right] = \nabla f(x^k)$.
- При $x^k \to x^*$ имеем, что $y_j^k \to \nabla f_j(x^*)$, и $\frac{1}{n}\sum\limits_{j=1}^{n} y_j^k \to \nabla f(x^*) = 0$.

  А значит $g^k \to 0$.

SAGA

- Идея – если я считал когда-то градиент для f_i, то зачем его забывать? Сохраним!
- $\frac{1}{n}\sum\limits_{j=1}^{n} y_j^k$ – «запаздывающая» версия $\nabla f(x^k)$.
- $\mathbb{E}\left[g^k \mid x^k\right] = \nabla f(x^k)$.
- При $x^k \to x^*$ имеем, что $y_j^k \to \nabla f_j(x^*)$, и $\frac{1}{n}\sum\limits_{j=1}^{n} y_j^k \to \nabla f(x^*) = 0$.

  А значит $g^k \to 0$.
- Из минусов: лишняя $\mathcal{O}(nd)$ память.

SAGA: доказательство

- Все f_i являются L-гладкими и выпуклыми, а f – μ - сильно выпуклой.

$$\|x^{k+1}-x^*\|_2^2 = \|x^k-x^*\|_2^2 - 2\gamma\langle g^k; x^k-x^*\rangle + \gamma^2\|g^k\|_2^2$$

$$\mathbb{E}[\quad | x^k]$$

$$\mathbb{E}[\|x^{k+1}-x^*\|_2^2 | x^k] = \|x^k-x^*\|_2^2 - 2\gamma\langle \mathbb{E}[g^k|x^k]; x^k-x^*\rangle + \gamma^2\,\mathbb{E}[\|g^k-\nabla f(x^*)\|_2^2 | x^k]$$

тема SAGA

идея: $\tilde{g}^k = \frac{1}{n}\sum_{j=1}^n y_j^{k+1}$

$$\tilde{g}^k = \frac{1}{n}\sum_{j=1}^n y_j^k - \cancel{\frac{1}{n}}\left(y_{i_k}^k + \nabla f_{i_k}(x^k)\right)$$

1) $\mathbb{E}[g^k|x^k] = \nabla f(x^k)$

$$\mathbb{E}[\tilde{g}^k|x^k] = \mathbb{E}\left[\cancel{\frac{1}{n}}\left(\nabla f_{i_k}(x^k) - y_{i_k}^k\right)\Big| x^k\right] + \frac{1}{n}\sum y^k$$

$$= \cancel{\frac{1}{n}}\sum_{j=1}^n \underset{p}{\frac{1}{n}}\left(\nabla f_j(x^k) - y_j^k\right) + \frac{1}{n}\sum y^k$$

$$= \nabla f(x^k)$$

2) $\mathbb{E}[\|g^k - \nabla f(x^*)\|_2^2 | x^k] =$

$$= \mathbb{E}\Big[\|\underbrace{\nabla f_{i_k}(x^k) - \nabla f_{i_k}(x^*)}_{a} + \underbrace{\nabla f_{i_k}(x^*) - y_{i_k}^k + \frac{1}{n}\sum_{j=1}^n y_j^k - \nabla f(x^*)}_{b}\|_2^2 \,|\, x^k\Big]$$

$$\overset{\text{КБШ}}{\leq} 2\mathbb{E}[\|\nabla f_{i_k}(x^k) - \nabla f_{i_k}(x^*)\|_2^2 | x^k] + 2\mathbb{E}\Big[\|\underbrace{\nabla f_{i_k}(x^*) - y_{i_k}^k}_{\xi} + \underbrace{\frac{1}{n}\sum(y_j^k - \nabla f_j(x^*))}_{\mathbb{E}[\xi|x^k]}\|_2^2\Big]$$

$$\mathbb{E}[\|\xi - \mathbb{E}[\xi|x^k]\|_2^2 | x^k] \leq \mathbb{E}[\|\xi\|_2^2 | x^k]$$

$$\leq 2\mathbb{E}[\|\nabla f_{i_k}(x^k) - \nabla f_{i_k}(x^*)\|_2^2 | x^k] + 2\mathbb{E}[\|\nabla f_{i_k}(x^*) - y_{i_k}^k\|_2^2 | x^k]$$

$$= 2\cdot\underset{p}{\frac{1}{n}}\sum \|\nabla f_i(x^k) - \nabla f_i(x^*)\|_2^2 + 2\cdot\frac{1}{n}\sum\|y_i^k - \nabla f_i(x^*)\|_2^2$$

SAGA: доказательство

- Все f_i являются L-гладкими и выпуклыми, а f – μ - сильно выпуклой.
- Уже привычно:

$$\|x^{k+1} - x^*\|_2^2 = \|x^k - x^*\|_2^2 - 2\gamma\langle g^k, x^k - x^*\rangle + \gamma^2\|g^k - \nabla f(x^*)\|_2^2.$$

SAGA: доказательство

- Все f_i являются L-гладкими и выпуклыми, а f – μ - сильно выпуклой.
- Уже привычно:

$$\|x^{k+1} - x^*\|_2^2 = \|x^k - x^*\|_2^2 - 2\gamma\langle g^k, x^k - x^*\rangle + \gamma^2\|g^k - \nabla f(x^*)\|_2^2.$$

- Берем условное мат.ожидание по случайности только на итерации k:

$$\begin{aligned}\mathbb{E}\left[\|x^{k+1} - x^*\|_2^2 \mid x^k\right] =& \|x^k - x^*\|_2^2 - 2\gamma\langle\mathbb{E}\left[g^k \mid x^k\right], x^k - x^*\rangle \\ &+ \gamma^2\mathbb{E}\left[\|g^k - \nabla f(x^*)\|_2^2 \mid x^k\right].\end{aligned}$$

SAGA: доказательство

- Работаем с $\mathbb{E}\left[g^k \mid x^k\right]$:

$$
\begin{aligned}
\mathbb{E}\left[g^k \mid x^k\right] &= \mathbb{E}\left[\nabla f_{i_k}(x^k) - y_{i_k}^k + \frac{1}{n}\sum_{j=1}^n y_j^k \mid x^k\right] \\
&= \mathbb{E}\left[\nabla f_{i_k}(x^k) - y_{i_k}^k \mid x^k\right] + \frac{1}{n}\sum_{j=1}^n y_j^k \\
&= \frac{1}{n}\sum_{j=1}^n \left[\nabla f_j(x^k) - y_j^k\right] + \frac{1}{n}\sum_{j=1}^n y_j^k \\
&= \nabla f(x^k)
\end{aligned}
$$

SAGA: доказательство

- Теперь работаем с $\mathbb{E}\left[\|g^k - \nabla f(x^*)\|_2^2 \mid x^k\right]$:

$$
\begin{aligned}
\mathbb{E}\left[\|g^k - \nabla f(x^*)\|_2^2 \mid x^k\right] =& \mathbb{E}\left[\|\nabla f_{i_k}(x^k) - y_{i_k}^k + \frac{1}{n}\sum_{j=1}^n y_j^k - \nabla f(x^*)\|_2^2 \mid x^k\right] \\
=& \mathbb{E}\Bigg[\|\nabla f_{i_k}(x^k) - \nabla f_{i_k}(x^*) + \nabla f_{i_k}(x^*) - y_{i_k}^k \\
& + \frac{1}{n}\sum_{j=1}^n y_j^k - \nabla f(x^*)\|_2^2 \mid x^k\Bigg] \\
\leq& 2\mathbb{E}\left[\|\nabla f_{i_k}(x^k) - \nabla f_{i_k}(x^*)\|_2^2 \mid x^k\right] \\
& + 2\mathbb{E}\left[\|\nabla f_{i_k}(x^*) - y_{i_k}^k + \frac{1}{n}\sum_{j=1}^n y_j^k - \nabla f(x^*)\|_2^2 \mid x^k\right]
\end{aligned}
$$

SAGA: доказательство

- Пользуемся тем, что $\mathbb{D}\xi \leq \mathbb{E}[\xi^2]$:

$$
\begin{aligned}
\mathbb{E}\left[\|g^k - \nabla f(x^*)\|_2^2 \mid x^k\right] \leq & 2\mathbb{E}\left[\|\nabla f_{i_k}(x^k) - \nabla f_{i_k}(x^*)\|_2^2 \mid x^k\right] \\
& + 2\mathbb{E}\left[\|\nabla f_{i_k}(x^*) - y_{i_k}^k + \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n} y_j^k - \nabla f(x^*)\|_2^2 \mid x^k\right] \\
\leq & 2\mathbb{E}\left[\|\nabla f_{i_k}(x^k) - \nabla f_{i_k}(x^*)\|_2^2 \mid x^k\right] \\
& + 2\mathbb{E}\left[\|\nabla f_{i_k}(x^*) - y_{i_k}^k\|_2^2 \mid x^k\right]
\end{aligned}
$$

SAGA: доказательство

- Берем мат.ожидание, пользуемся гладкостью (с выпуклостью):

$$
\begin{aligned}
\mathbb{E}\left[\|g^k - \nabla f(x^*)\|_2^2 \mid x^k\right] \leq & 2\mathbb{E}\left[\|\nabla f_{i_k}(x^k) - \nabla f_{i_k}(x^*)\|_2^2 \mid x^k\right] \\
& + 2\mathbb{E}\left[\|\nabla f_{i_k}(x^*) - y_{i_k}^k\|_2^2 \mid x^k\right] \\
\leq & 4L \cdot \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left(f_i(x^k) - f_i(x^*) - \langle \nabla f_i(x^k), x^k - x^* \rangle\right) \\
& + 2 \cdot \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \|\nabla f_i(x^*) - y_i^k\|_2^2 \\
= & 4L \cdot \left(f(x^k) - f(x^*)\right) \\
& + 2 \cdot \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \|\nabla f_i(x^*) - y_i^k\|_2^2
\end{aligned}
$$

SAGA: доказательство

- Промежуточный итог:

$$\mathbb{E}\left[\|x^{k+1} - x^*\|_2^2 \mid x^k\right] = \|x^k - x^*\|_2^2 - 2\gamma\langle \mathbb{E}\left[g^k \mid x^k\right], x^k - x^*\rangle + \gamma^2 \mathbb{E}\left[\|g^k - \nabla f(x^*)\|_2^2 \mid x^k\right].$$

$$\mathbb{E}\left[g^k \mid x^k\right] = \nabla f(x^k)$$

$\|\nabla f(x^k)\|_2^2 + \|g^k - \nabla f(x^k)\|$

$$\mathbb{E}\left[\|g^k - \nabla f(x^*)\|_2^2 \mid x^k\right] \leq 4L \cdot (f(x^k) - f(x^*)) + 2 \cdot \frac{1}{n}\sum_{i=1}^n \|\nabla f_i(x^*) - y_i^k\|_2^2$$

$y_i^k \to \nabla f_i(x^*)$

SAGA: доказательство

- Промежуточный итог:

$$\mathbb{E}\left[\|x^{k+1} - x^*\|_2^2 \mid x^k\right] = \|x^k - x^*\|_2^2 - 2\gamma\langle \mathbb{E}\left[g^k \mid x^k\right], x^k - x^*\rangle + \gamma^2 \mathbb{E}\left[\|g^k - \nabla f(x^*)\|_2^2 \mid x^k\right].$$

$$\mathbb{E}\left[g^k \mid x^k\right] = \nabla f(x^k)$$

$$\mathbb{E}\left[\|g^k - \nabla f(x^*)\|_2^2 \mid x^k\right] \leq 4L \cdot (f(x^k) - f(x^*)) + 2 \cdot \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \|\nabla f_i(x^*) - y_i^k\|_2^2$$

- Собираем вместе:

$$\mathbb{E}\left[\|x^{k+1} - x^*\|_2^2 \mid x^k\right] \leq \|x^k - x^*\|_2^2 - 2\gamma\langle \nabla f(x^k), x^k - x^*\rangle + \gamma^2 \left(4L \cdot (f(x^k) - f(x^*)) + 2 \cdot \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \|\nabla f_i(x^*) - y_i^k\|_2^2\right)$$

SAGA: доказательство

- Сильная ввыпуклость функции f:

$$\mathbb{E}\left[\|x^{k+1} - x^*\|_2^2 \mid x^k\right] \leq (1 - \mu\gamma)\|x^k - x^*\|_2^2 - 2\gamma(1 - 2\gamma L)(f(x^k) - f(x^*))$$

$$+ 2\gamma^2 \cdot \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\|\nabla f_i(x^*) - y_i^k\|_2^2.$$

SAGA: доказательство

- Сильная ввыпуклость функции f:

$$\mathbb{E}\left[\|x^{k+1} - x^*\|_2^2 \mid x^k\right] \leq (1 - \mu\gamma)\|x^k - x^*\|_2^2 - 2\gamma(1 - 2\gamma L)(f(x^k) - f(x^*))$$
$$+ 2\gamma^2 \cdot \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \|\nabla f_i(x^*) - y_i^k\|_2^2.$$

- Более формально пришли к тому, что если $y_i^k \to f_i(x^*)$, то дисперсия «убивается», а значит будет линейная сходимость. Покажем, как это можно строго оформить.

$$\mathbb{E}\Big[\underbrace{\frac{1}{n}\sum \|y_i^{k+1} - \nabla f_i(x^*)\|_2^2}_{\sigma_{k+1}} \,\Big|\, x^k\Big] =$$

$$= \frac{1}{n}\sum \mathbb{E}\left[\|y_i^{k+1} - \nabla f_i(x^*)\|_2^2 \mid x^k\right] =$$

$$= \frac{1}{n}\sum \left[\left(1-\frac{1}{n}\right)\|y_i^{k} - \nabla f_i(x^*) + \frac{1}{n}\|\nabla f_i(x^k) - \nabla f_i(x^*)\|_2^2\right]$$

$$= \left(1-\frac{1}{n}\right)\cdot \underbrace{\frac{1}{n}\sum \|y_i^{k} - \nabla f_i(x^*)\|_2^2}_{\sigma_k}$$

$$+ \frac{1}{n}\cdot 2L\left(f(x^k) - f(x^*)\right)$$

$$\mathbb{E}\left[\sigma_{k+1} \mid x^k\right] \le \left(1-\frac{1}{n}\right)\sigma_k + \frac{2L}{n}\left(f(x^k) - f(x^*)\right)$$

SAGA: доказательство

- Рассмотрим, как ведет себя $\frac{1}{n}\sum\limits_{i=1}^{n}\|\nabla f_i(x^*) - y_i^k\|_2^2$:

$$
\begin{aligned}
\mathbb{E}\left[\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\|y_i^{k+1} - \nabla f_i(x^*)\|_2^2 \mid x^k\right] &= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\mathbb{E}\left[\|y_i^{k+1} - \nabla f_i(x^*)\|_2^2 \mid x^k\right] \\
&= \left(1 - \frac{1}{n}\right)\cdot\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\|y_i^k - \nabla f_i(x^*)\|_2^2 \\
&\quad + \frac{1}{n}\cdot\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\|f_i(x^k) - \nabla f_i(x^*)\|_2^2 \\
&\le \left(1 - \frac{1}{n}\right)\cdot\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\|y_i^k - \nabla f_i(x^*)\|_2^2 \\
&\quad + \frac{1}{n}\cdot 2L(f(x^k) - f(x^*)).
\end{aligned}
$$

SAGA: доказательство

- Итого (здесь сразу накинуто полное математическое ожидание):

$$\mathbb{E}\left[\|x^{k+1}-x^*\|_2^2\right] \leq (1-\mu\gamma)\mathbb{E}\left[\|x^k-x^*\|_2^2\right] - \cancel{2\gamma(1-2\gamma L)\mathbb{E}\left[f(x^k)-f(x^*)\right]}$$

лин. сход.

$\gamma \leq$

$$\cancel{+ 2\gamma^2 \cdot \mathbb{E}\left[\frac{1}{n}\sum_{i=1}^n \|\nabla f_i(x^*) - y_i^k\|_2^2\right]}$$

не растёт

$$\mathbb{E}\left[\frac{1}{n}\sum_{i=1}^n \|y_i^{k+1} - \nabla f_i(x^*)\|_2^2\right] \leq \left(1 - \frac{1}{n}\right) \cdot \mathbb{E}\left[\frac{1}{n}\sum_{i=1}^n \|y_i^k - \nabla f_i(x^*)\|_2^2\right]$$

лин сход

$$+ \frac{1}{n} \cdot 2L\mathbb{E}\left[f(x^k) - f(x^*)\right].$$

SAGA: доказательство

- Итого (здесь сразу накинуто полное математическое ожидание):

$$\mathbb{E}\left[\|x^{k+1} - x^*\|_2^2\right] \leq (1-\mu\gamma)\mathbb{E}\left[\|x^k - x^*\|_2^2\right] - 2\gamma(1-2\gamma L)\mathbb{E}\left[f(x^k) - f(x^*)\right] + 2\gamma^2 \cdot \mathbb{E}\left[\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\|\nabla f_i(x^*) - y_i^k\|_2^2\right]$$

$$\mathbb{E}\left[\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\|y_i^{k+1} - \nabla f_i(x^*)\|_2^2\right] \leq \left(1 - \frac{1}{n}\right)\cdot \mathbb{E}\left[\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\|y_i^k - \nabla f_i(x^*)\|_2^2\right] + \frac{1}{n}\cdot 2L\mathbb{E}\left[f(x^k) - f(x^*)\right].$$

- Получилось две «сходящиеся» последовательности, осталось их аккуратно «сшить».

SAGA: доказательство

- Пусть $M > 0$:

$$\mathbb{E}\left[\|x^{k+1} - x^*\|_2^2 + M\gamma^2 \cdot \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\|y_i^{k+1} - \nabla f_i(x^*)\|_2^2\right]$$

$$\le (1 - \mu\gamma)\mathbb{E}\left[\|x^k - x^*\|_2^2\right]$$

$$+ \left(1 + \frac{2}{M} - \frac{1}{n}\right)\mathbb{E}\left[M\gamma^2 \cdot \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\|y_i^k - \nabla f_i(x^*)\|_2^2\right]$$

$$- 2\gamma\left(1 - 2\gamma L - \frac{\gamma M L}{n}\right)\mathbb{E}\left[f(x^k) - f(x^*)\right]$$

$\left(1 + \frac{2}{M} - \frac{1}{n}\right) < 1$

$M = 4n$

SAGA: доказательство

- Возьмем $M = 4n$:

$$
\begin{aligned}
\mathbb{E}\left[\|x^{k+1} - x^*\|_2^2 + 4n\gamma^2 \cdot \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\|y_i^{k+1} - \nabla f_i(x^*)\|_2^2\right] \\
\leq & (1-\mu\gamma)\mathbb{E}\left[\|x^k - x^*\|_2^2\right] \\
& + \underline{\left(1 - \frac{1}{2n}\right)}\mathbb{E}\left[4n\gamma^2 \cdot \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\|y_i^k - \nabla f_i(x^*)\|_2^2\right] \\
& \cancel{- 2\gamma\left(1 - \underline{6\gamma L}\right)\mathbb{E}\left[f(x^k) - f(x^*)\right]}
\end{aligned}
$$

$\gamma \leq \frac{1}{6L}$

SAGA: доказательство

- Возьмем $M = 4n$:

$$\mathbb{E}\left[\|x^{k+1} - x^*\|_2^2 + 4n\gamma^2 \cdot \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \|y_i^{k+1} - \nabla f_i(x^*)\|_2^2\right]$$

$$\leq (1-\mu\gamma)\mathbb{E}\left[\|x^k - x^*\|_2^2\right]$$

$$+ \left(1 - \frac{1}{2n}\right)\mathbb{E}\left[4n\gamma^2 \cdot \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \|y_i^{k} - \nabla f_i(x^*)\|_2^2\right]$$

$$- 2\gamma\left(1 - 6\gamma L\right)\mathbb{E}\left[f(x^k) - f(x^*)\right]$$

- Теперь $\gamma \leq \frac{1}{6L}$:

$$\mathbb{E}\left[\|x^{k+1} - x^*\|_2^2 + 4n\gamma^2 \cdot \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \|y_i^{k+1} - \nabla f_i(x^*)\|_2^2\right]$$

$$\leq \max\left\{(1-\mu\gamma); \left(1 - \frac{1}{2n}\right)\right\}\mathbb{E}\left[\|x^k - x^*\|_2^2 + 4n\gamma^2 \cdot \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \|y_i^{k} - \nabla f_i(\right.$$

SAGA: сходимость

- Получили сходимость, но по необычному критерию. Суть критерия в отражении физики, как сходимости $x^k \to x^*$, так и $y_i^k \to \nabla f_i(x^*)$, что и закладывали в метод.

Теорема сходимость SAGA

Пусть задача безусловной стохастической оптимизации вида конечной суммы с L-гладкими, выпуклыми функциями f_i и μ-сильно выпуклой целевой функцией f решается с помощью SAGA с $\gamma \leq \frac{1}{6L}$. Тогда справедлива следующая оценка сходимости

$1-\frac{1}{n}$

n

$$\mathbb{E}\left[\|x^k - x^*\|_2^2\right] \le \mathbb{E}\left[V_k\right] \leq \max\left\{(1-\mu\gamma); \left(1 - \frac{1}{2n}\right)\right\}^k \mathbb{E}\left[V_0\right],$$

M

M $\quad i$

где $V_k = \|x^k - x^*\|_2^2 + 4n\gamma^2 \cdot \frac{1}{n}\sum\limits_{i=1}^{n} \|y_i^k - \nabla f_i(x^*)\|_2^2.$

$\|\nabla f_i(x^*)\|_2^2$

$\|x^k - x^*\|_2^2 \le V_k \to 0$

SAGA: сходимость

- Получили сходимость, но по необычному критерию. Суть критерия в отражении физики, как сходимости $x^k \to x^*$, так и $y_i^k \to \nabla f_i(x^*)$, что и закладывали в метод.

Теорема сходимость SAGA

Пусть задача безусловной стохастической оптимизации вида конечной суммы с L-гладкими, выпуклыми функциями f_i и μ-сильно выпуклой целевой функцией f решается с помощью SAGA с $\gamma \leq \frac{1}{6L}$. Тогда справедлива следующая оценка сходимости

$$\mathbb{E}\left[V_k\right] \leq \max\left\{(1-\mu\gamma); \left(1 - \frac{1}{2n}\right)\right\}^k \mathbb{E}\left[V_0\right],$$

где $V_k = \|x^k - x^*\|_2^2 + 4n\gamma^2 \cdot \frac{1}{n}\sum\limits_{i=1}^{n} \|y_i^k - \nabla f_i(x^*)\|_2^2$.

- Легко заметить, что из сходимости по $\mathbb{E}[V_k]$ следует и сходимость по $\mathbb{E}[\|x^k - x^*\|_2^2]$: $\mathbb{E}[\|x^k - x^*\|_2^2] \leq \mathbb{E}[V_k]$

SAGA: сходимость

- **Вопрос:** почему не взять M огромным, тогда сходимость будет лучше?

SAGA: сходимость

- **Вопрос:** почему не взять M огромным, тогда сходимость будет лучше? M еще влияете на критерий сходимости, который так же будет расти с ростом M. При этом сходимости лучше, чем $\left(1 - \frac{1}{n}\right)$ не добиться.

SAGA: сходимость

- **Вопрос:** почему не взять M огромным, тогда сходимость будет лучше? M еще влияете на критерий сходимости, который так же будет расти с ростом M. При этом сходимости лучше, чем $\left(1 - \frac{1}{n}\right)$ не добиться.
- Получаем следующую (уже анонсированную в прошлый раз) оценку на число итераций для достижения точности ε:

$$\left(1 - \frac{\mu}{6L}\right)$$

$$\left(1 - \frac{1}{2n}\right)$$

$$\mathcal{O}\left(\left[n + \frac{L}{\mu}\right] \log \frac{1}{\varepsilon}\right)$$

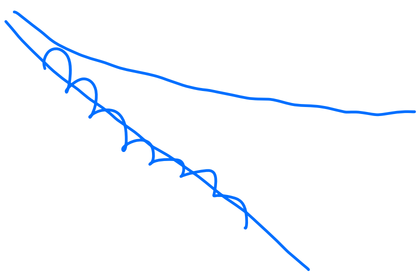
$$\max\left(2n; \frac{6L}{\mu}\right) \log \frac{1}{\varepsilon}$$

$$\leq \left(2n + \frac{6L}{\mu}\right) \log \frac{1}{\varepsilon}$$

$$O\left(n + \frac{L}{\mu}\right) \log \frac{1}{\varepsilon}$$

SAGA: сходимость

- **Вопрос:** почему не взять M огромным, тогда сходимость будет лучше? M еще влияете на критерий сходимости, который так же будет расти с ростом M. При этом сходимости лучше, чем $\left(1 - \frac{1}{n}\right)$ не добиться.
- Получаем следующую (уже анонсированную в прошлый раз) оценку на число итераций для достижения точности ε:



$$\mathcal{O}\left(\left[n + \frac{L}{\mu}\right] \log \frac{1}{\varepsilon}\right)$$

$f(x) - f(x^*) + \|x^k - x^*\|_2^2$

- У классического градиентного спуска оценка:

$$\mathcal{O}\left(n\frac{L}{\mu} \log \frac{1}{\varepsilon}\right),$$

$n\left(1 + \frac{L}{\mu}\right)$

но оракульная сложность (подсчет градиентов ∇f_i) у градиетного спуска в n раз больше.

Поворот на 90 градусов

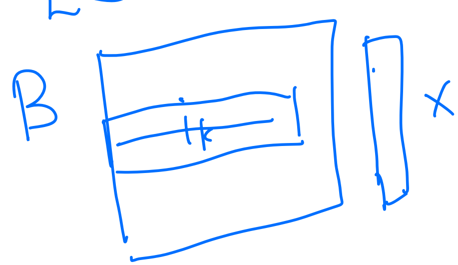
- Простой пример:

$$\min_{x \in \mathbb{R}^d} \left[f(x) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \|a_i^T x - b_i\|_2^2 \right],$$

где $\{a_i, b_i\}_{i=1}^n$ – обучающая выборка.

$$A = \begin{pmatrix} a_1 & \text{———} \\ a_i & \text{———} \\ & \end{pmatrix}$$

$$\nabla g(x) = \left[Bx - C \right]_{i_k}$$



d^2 d

Поворот на 90 градусов

- Простой пример:

$$\min_{x \in \mathbb{R}^d} \left[f(x) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \|a_i^T x - b_i\|_2^2 \right],$$

где $\{a_i, b_i\}_{i=1}^n$ – обучающая выборка.

- До этого, мы брали не всю выборку для подсчета градиента, чтобы быть более эффективными. Т.е. использовали только часть строк матрицы A, составленной из a_i **Вопрос:** а как по-другому можно добиться эффективности?

Поворот на 90 градусов

- Простой пример:

$$\min_{x\in\mathbb{R}^d}\left[f(x) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\|a_i^T x - b_i\|_2^2\right],$$

где $\{a_i, b_i\}_{i=1}^n$ – обучающая выборка.

- До этого, мы брали не всю выборку для подсчета градиента, чтобы быть более эффективными. Т.е. использовали только часть строк матрицы A, составленной из a_i **Вопрос:** а как по-другому можно добиться эффективности? если до этого был выбор строк матрицы A, то теперь можно попробовать как-то завязаться на столбцы. **Вопрос:** а что означает «выбор столбцов»?

Поворот на 90 градусов

- Простой пример:

$$\min_{x \in \mathbb{R}^d} \left[f(x) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \|a_i^T x - b_i\|_2^2 \right],$$

  где $\{a_i, b_i\}_{i=1}^n$ – обучающая выборка.
- До этого, мы брали не всю выборку для подсчета градиента, чтобы быть более эффективными. Т.е. использовали только часть строк матрицы A, составленной из a_i **Вопрос:** а как по-другому можно добиться эффективности? если до этого был выбор строк матрицы A, то теперь можно попробовать как-то завязаться на столбцы. **Вопрос:** а что означает «выбор столбцов»? Выбор координат вектора x.

Производная по направлению

- Часто для более сложных задач к подсчету производных по координатам/направлениям прибегают не из-за удешевления процесса, а из-за доступности только оракула нулевого порядка (значения функции). Потому что производную по направлению $e \in \{e \in \mathbb{R}^d \mid \|e\|_2 \leq 1\}$ можно аппроксимировать через конечную разность:

$$[\nabla f(x)]_e \approx \frac{f(x+\tau e) - f(x-\tau e)}{2\tau} \qquad \tau \to 0$$

(таким образом можно «собрать» и весь «градиент»).

Координатный метод

Алгоритм 2 Координатный метод

Вход: размер шага $\gamma > 0$, стартовая точка $x^0 \in \mathbb{R}^d$, ~~значения памяти~~ $\cancel{y_i^0 = 0}$ ~~для всех~~ $\cancel{i \in [n]}$, количество итераций K

for $k = 0, 1, \ldots, K-1$ **do**

  Сгенерировать независимо i_k из $[d]$

  Вычислить $[\nabla f(x^k)]_{i_k}$

  $x^{k+1} = x^k - \gamma \cdot d[\nabla f(x^k)]_{i_k} e_{i_k}$

end for

Выход: x^K

Здесь e_{i_k} – iый базисный вектор

Координатный метод

Алгоритм 3 Координатный метод

Вход: размер шага $\gamma > 0$, стартовая точка $x^0 \in \mathbb{R}^d$, значения памяти $y_i^0 = 0$ для всех $i \in [n]$, количество итераций K

1: **for** $k = 0, 1, \ldots, K-1$ **do**

2: Сгенерировать независимо i_k из $[d]$

3: Вычислить $[\nabla f(x^k)]_{i_k}$

4: $x^{k+1} = x^k - \gamma \cdot d[\nabla f(x^k)]_{i_k} e_{i_k}$

5: **end for**

Выход: x^K

Здесь e_{i_k} – iый базисный вектор

- Зачем в шаге метода есть домножение на d?

Координатный метод

Алгоритм 4 Координатный метод

Вход: размер шага $\gamma > 0$, стартовая точка $x^0 \in \mathbb{R}^d$, значения памяти $y_i^0 = 0$ для всех $i \in [n]$, количество итераций K

for $k = 0, 1, \ldots, K-1$ **do**

    Сгенерировать независимо i_k из $[d]$

    Вычислить $[\nabla f(x^k)]_{i_k}$

    $x^{k+1} = x^k - \gamma \cdot d[\nabla f(x^k)]_{i_k} e_{i_k}$

end for

Выход: x^K

Здесь e_{i_k} – iый базисный вектор

- Зачем в шаге метода есть домножение на d? Для несмещенности того, что мы используем вместо градиента.

Координатный метод: доказательство

- f является L-гладкой и μ - сильно выпуклой.

Координатный метод: доказательство

- f является L-гладкой и μ - сильно выпуклой.
- Уже привычно:

$$
\begin{aligned}
\|x^{k+1} - x^*\|_2^2 = &\|x^k - x^*\|_2^2 - 2\gamma\langle d[\nabla f(x^k)]_{i_k} e_{i_k}, x^k - x^*\rangle \\
&+ \gamma^2\|d[\nabla f(x^k)]_{i_k} e_{i_k}\|_2^2.
\end{aligned}
$$

$$\mathbb{E}\left[d\,[\nabla f(x^k)]_{i_k} e_{i_k} \mid x_k\right] = d \cdot \sum_{j=1}^{d} \frac{1}{d}\,[\nabla f(x^k)]_j\, e_j =$$

$$\mathbb{E}\left[\|d\,[\nabla f(x^k)]_{i_k} e_{i_k}\|_2^2 \mid x^k\right] = d^2 \cdot \sum_{j=1}^{d} \underbrace{\frac{1}{d}}_{p_k} \|[\nabla f(x^k)]_j\, e_j\|_2^2$$

$$= d \sum_{j=1}^{d} [\nabla f(x^k)]_j^2 = d\,\|\nabla f(x^k)\|_2^2$$

Координатный метод: доказательство

- f является L-гладкой и μ - сильно выпуклой.
- Уже привычно:

$$\|x^{k+1} - x^*\|_2^2 = \|x^k - x^*\|_2^2 - 2\gamma\langle d[\nabla f(x^k)]_{i_k} e_{i_k}, x^k - x^*\rangle \\ + \gamma^2 \|d[\nabla f(x^k)]_{i_k} e_{i_k}\|_2^2.$$

- Берем условное мат.ожидание по случайности только на итерации k:

$$\mathbb{E}\left[\|x^{k+1} - x^*\|_2^2 \mid x^k\right] = \|x^k - x^*\|_2^2 - 2\gamma\langle \mathbb{E}\left[d[\nabla f(x^k)]_{i_k} e_{i_k} \mid x^k\right], x^k - x^*\rangle \\ + \gamma^2 \mathbb{E}\left[\|d[\nabla f(x^k)]_{i_k} e_{i_k}\|_2^2 \mid x^k\right].$$

Координатный метод: доказательство

- Работаем с $\mathbb{E}\left[d[\nabla f(x^k)]_{i_k} e_{i_k} \mid x^k\right]$:

$$\mathbb{E}\left[d[\nabla f(x^k)]_{i_k} e_{i_k} \mid x^k\right] = \frac{1}{d}\sum_{j=1}^{d} d[\nabla f(x^k)]_i e_i$$
$$= \nabla f(x^k)$$

Координатный метод: доказательство

- Теперь работаем с $\mathbb{E}\left[\|d[\nabla f(x^k)]_{i_k} e_{i_k}\|_2^2 \mid x^k\right]$:

$$
\begin{aligned}
\mathbb{E}\left[\|d[\nabla f(x^k)]_{i_k} e_{i_k}\|_2^2 \mid x^k\right] &= \mathbb{E}\left[\|d[\nabla f(x^k)]_{i_k} e_{i_k}\|_2^2 \mid x^k\right] \\
&= d^2 \mathbb{E}\left[\|[\nabla f(x^k)]_{i_k} e_{i_k}\|_2^2 \mid x^k\right] \\
&= d^2 \cdot \frac{1}{d} \sum_{j=1}^{d} \|[\nabla f(x^k)]_j e_j\|_2^2 \\
&= d \|\nabla f(x^k)\|_2^2
\end{aligned}
$$

Координатный метод: доказательство

- Промежуточный итог:

$$\mathbb{E}\left[\|x^{k+1} - x^*\|_2^2 \mid x^k\right] = \|x^k - x^*\|_2^2 - 2\gamma\langle\mathbb{E}\left[d[\nabla f(x^k)]_{i_k} e_{i_k} \mid x^k\right], x^k - x^*\rangle$$
$$+ \gamma^2\mathbb{E}\left[\|d[\nabla f(x^k)]_{i_k} e_{i_k}\|_2^2 \mid x^k\right].$$

$$\mathbb{E}\left[d[\nabla f(x^k)]_{i_k} e_{i_k} \mid x^k\right] = \underline{\nabla f(x^k)}$$

$$\mathbb{E}\left[\|d[\nabla f(x^k)]_{i_k} e_{i_k}\|_2^2 \mid x^k\right] = \underline{d\|\nabla f(x^k)\|_2^2}$$

Координатный метод: доказательство

- Промежуточный итог:

$$\mathbb{E}\left[\|x^{k+1} - x^*\|_2^2 \mid x^k\right] = \|x^k - x^*\|_2^2 - 2\gamma\langle \mathbb{E}\left[d[\nabla f(x^k)]_{i_k} e_{i_k} \mid x^k\right], x^k - x^*\rangle$$
$$+ \gamma^2 \mathbb{E}\left[\|d[\nabla f(x^k)]_{i_k} e_{i_k}\|_2^2 \mid x^k\right].$$

$$\mathbb{E}\left[d[\nabla f(x^k)]_{i_k} e_{i_k} \mid x^k\right] = \nabla f(x^k)$$

$$\mathbb{E}\left[\|d[\nabla f(x^k)]_{i_k} e_{i_k}\|_2^2 \mid x^k\right] = d\|\nabla f(x^k)\|_2^2$$

- Собираем вместе:

$$\mathbb{E}\left[\|x^{k+1} - x^*\|_2^2 \mid x^k\right] \leq \|x^k - x^*\|_2^2 - 2\gamma\langle \nabla f(x^k), x^k - x^*\rangle$$
$$+ d\gamma^2\|\nabla f(x^k)\|_2^2.$$

Координатный метод: доказательство

- Сильная выпуклость и гладкость функции f:

$$\mathbb{E}\left[\|x^{k+1} - x^*\|_2^2 \mid x^k\right] \leq (1-\mu\gamma)\|x^k - x^*\|_2^2 - 2\gamma(1 - d\gamma L)(f(x^k) - f(x^*)).$$

$\gamma \leq \frac{1}{dL}$

$\min(x_1^2 + x_2^2 + x_d^2)$

$(1; 0; 0 \ldots 0)$

$d \begin{pmatrix} 2x_1 \\ 0 \end{pmatrix}$

$\frac{2}{L}$

Координатный метод: доказательство

- Сильная выпуклость и гладкость функции f:

$$\mathbb{E}\left[\|x^{k+1} - x^*\|_2^2 \mid x^k\right] \leq (1-\mu\gamma)\|x^k - x^*\|_2^2 - \cancel{2\gamma(1 - d\gamma L)(f(x^k) - f(x^*))}.$$

- Пусть $\gamma \leq \frac{1}{dL}$:

$$\mathbb{E}\left[\|x^{k+1} - x^*\|_2^2 \mid x^k\right] \leq (1-\mu\gamma)\|x^k - x^*\|_2^2.$$

Координатный метод: сходимость

$\frac{1}{d}$

$x_1^2 + x_2^2 + \dots x_d^2$

$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$

Теорема сходимость SAGA

Пусть задача безусловной оптимизации с L-гладкой и μ-сильно выпуклой целевой функцией f решается с помощью координатного метода с $\gamma \le \frac{1}{dL}$. Тогда справедлива следующая оценка сходимости

$$\mathbb{E}\left[\|x^k - x^*\|_2^2\right] \le (1 - \mu\gamma)^k \mathbb{E}\left[\|x^0 - x^*\|_2^2\right]$$

$\left(1 - \frac{\mu}{dL}\right)^k$

$\frac{dL}{\mu} \log \frac{1}{\varepsilon}$

Координатный метод: сходимость

- Подставив $\gamma = \frac{1}{dL}$, получаем следующую итерационную сложность

$$\mathcal{O}\left(\frac{dL}{\mu}\log\frac{1}{\varepsilon}\right).$$

Координатный метод: сходимость

- Подставив $\gamma = \frac{1}{dL}$, получаем следующую итерационную сложность

$$\mathcal{O}\left(\frac{dL}{\mu}\log\frac{1}{\varepsilon}\right).$$

Вопрос: есть ли улучшения по сравнению с обычным градиентным спуском?

Координатный метод: сходимость

- Подставив $\gamma = \frac{1}{dL}$, получаем следующую итерационную сложность

$$\mathcal{O}\left(\frac{dL}{\mu}\log\frac{1}{\varepsilon}\right).$$

Вопрос: есть ли улучшения по сравнению с обычным градиентным спуском? В общем случае нет. Это доказуемо так.

Координатный метод: сходимость

- Подставив $\gamma = \frac{1}{dL}$, получаем следующую итерационную сложность

$$\mathcal{O}\left(\frac{dL}{\mu}\log\frac{1}{\varepsilon}\right).$$

  Вопрос: есть ли улучшения по сравнению с обычным градиентным спуском? В общем случае нет. Это доказуемо так.
- Если есть дополнительная информация о задаче (например, свойства констант Липшица градиента по направлению), то улучшения можно получить.

Координатный метод: сходимость

- Подставив $\gamma = \frac{1}{dL}$, получаем следующую итерационную сложность

$$\mathcal{O}\left(\frac{dL}{\mu}\log\frac{1}{\varepsilon}\right).$$

  Вопрос: есть ли улучшения по сравнению с обычным градиентным спуском? В общем случае нет. Это доказуемо так.
- Если есть дополнительная информация о задаче (например, свойства констант Липшица градиента по направлению), то улучшения можно получить.
- Еще координатный метод часто хорошо себя проявляет на практике.

Координатный метод: сходимость

- Подставив $\gamma = \frac{1}{dL}$, получаем следующую итерационную сложность

$$\mathcal{O}\left(\frac{dL}{\mu}\log\frac{1}{\varepsilon}\right).$$

$d\sqrt{\frac{L}{\mu}}$

  Вопрос: есть ли улучшения по сравнению с обычным градиентным спуском? В общем случае нет. Это доказуемо так.
- Если есть дополнительная информация о задаче (например, свойства констант Липшица градиента по направлению), то улучшения можно получить.
- Еще координатный метод часто хорошо себя проявляет на практике.
- Результат обобщается и на случай выбора нескольких координат.
- Возможно ускорение с помощью двух моментумов.

SEGA

$y \in \mathbb{R}^d \qquad y^0 = 0$

i_k – равн. и нез.

$[\nabla f(x^k)]_{i_k}$

$y^{k+1} = y^k - y^k_{i_k} + [\nabla f(x^k)]_{i_k}$

$g^{k+1} = y^k - d\left(y^k_{i_k} + [\nabla f(x^k)]_{i_k}\right) \leftarrow$ SEGA

$x^{k+1} = x^k - \gamma g^{k+1}$

$x^{k+1} = x^k - \gamma \underline{y^{k+1}} \leftarrow$ JAGUAR

$$\mathbb{E}[y^{k+1} | x^k] \neq \nabla f(x^k)$$

$$\mathbb{E}[g^{k+1} | x^k] = y^k - d\,\mathbb{E}\left[y^k_{i_k} - [\nabla f(x^k)]_{i_k} \,\middle|\, x^k\right]$$

$$= y^k - \cancel{d} \sum_{j=1}^{d} \frac{1}{\cancel{d}} \left(y_j - [\nabla f(x^k)]_j\right) e_j$$

$$= \nabla f(x^k)$$

$\nabla f(x^*) \to 0 \qquad \nabla f_i(x^*) \to 0 \qquad \frac{dL}{\mu}$