Regularized Nonlinear Acceleration

Марк Тюков, группа Б05-923 осень 2021г.

Содержание

1	Anderson acceleration	2
2	Regularized nonlinear acceleration	4
3	Список литературы	Ę

1. Anderson acceleration

Пусть необходимо решить задачу оптимизации:

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x),$$

где f(x) сильно выпукла с константой μ , а её градиент липшецев с константой L. Будем искать решение с помощью метода неподвижной точки:

$$x_{i+1} = g(x_i), \quad i = \overline{0, k} \tag{1}$$

Пусть g(x) дифференцируема и G — матрица Якоби функции g в точке x^* . Далее считаем G симметричной положительно определённой матрицей, $G \leq \sigma I$, где $\sigma < 1$. Тогда из (1) получаем линейный метод неподвижной точки:

$$x_{i+1} = g(x^*) + G(x_i - x^*) + O(\|x_i - x^*\|_2^2), \quad i = \overline{1, n}$$
(2)

Пренебрегая вторым порядком малости и учитывая, что x^* — неподвижная точка g(x), то есть $g(x^*) = x^*$, получаем

$$x_{i+1} - x^* = G(x_i - x^*)$$

В силу того, что $||G||_2 \leqslant \sigma < 1$, получаем линейную скорость сходимости:

$$||x_i - x^*||_2 \le \sigma ||x_{i-1} - x^*||_2 \le \sigma^i ||x_0 - x^*||_2$$

Рассмотрим линейную комбинацию x_i после k итераций:

$$\sum_{i=0}^{k} c_i x_i = \sum_{i=0}^{k} c_i x^* + \sum_{i=0}^{k} c_i G(x_i - x^*) = \left(\sum_{i=0}^{k} c_i\right) x^* + \left(\sum_{i=0}^{k} c_i G^i\right) (x_0 - x^*)$$

и определим многочлен

$$p(z) := \sum_{i=0}^{k} c_i z^i$$

Теперь линейную комбинацию можно записать с помощью матричного многочлена p(G), добавив ограничение $p(1) = \sum_{i=0}^{k} c_i = 1$:

$$\sum_{i=0}^{k} c_i x_i = x^* + \underbrace{p(G)(x_0 - x^*)}_{\text{ошибка}}$$
 (3)

Будем искать коэффициенты c (или p соответственно), которые минимизируют ошибку:

$$c^{\star} = \underset{\{c \in \mathbb{R}^{k+1} : c^{\mathsf{T}} \mathbf{1} = 1\}}{\operatorname{arg \, min}} \left\| \sum_{i=0}^{k} c_{i} G^{i}(x_{0} - x^{*}) \right\|_{2} = \underset{\{p \in \mathbb{R}_{k}[x] : p(1) = 1\}}{\operatorname{arg \, min}} \left\| p(G)(x_{0} - x^{*}) \right\|_{2}$$

где $\mathbb{R}_k[x]$ — пространство многочленов степени не выше k.

Следующее предложение даёт оценку сверху на размер ошибки:

Предложение 1.1. Пусть

- 1. последовательность x_i , $i = \overline{0, n}$, получена из (2);
- 2. G симметричная матрица Якоби g, для которой выполнено $0 \leq G \leq \sigma I$, $\sigma < 1$;
- 3. x^* неподвижная точка g.

Тогда l_2 норма ошибки (3) ограничена:

$$\left\| \sum_{i=0}^{k} c_i^{\star} x_i - x^* \right\|_2 \leqslant \begin{cases} \frac{2\beta^k}{1 + \beta^{2k}} \|x_0 - x^*\|_2, & \text{если } k < m \\ 0 & \text{иначе,} \end{cases}$$
 (4)

где m — число различных собственных значений G и

$$\beta = \frac{1 - \sqrt{1 - \sigma}}{1 + \sqrt{1 - \sigma}} < 1$$

Данная оценка получена из полу-итерационного метода Чебышёва, после преобразования получаем

$$\left\| \sum_{i=0}^{k} c_i^* x_i - x^* \right\|_2 \leqslant \left(1 - \sqrt{1 - \sigma} \right)^k \|x_0 - x^*\|_2 \ll \sigma^k \|x_0 - x^*\|_2,$$

так что достигнуто ускорение. В то же время, для применения этого метода требуется знание оценки σ матрицы Якоби G в точке x^* , кроме того, коэффициенты в линейной комбинации могут быть очень большими, что влияет на численную стабильность алгоритма.

В связи с перечисленными выше проблемами далее сосредоточимся на методе, который будет приближённо минимизировать ошибку (3). В силу того, что G и x^* неизвестны, будем работать с невязкой:

$$r_i = x_{i+1} - x_i = g(x_i) - x_i,$$

тогда линейный метод неподвижной точки (2) принимает вид

$$r_i = x_{i+1} - x_i = (G - I)(x_i - x^*),$$

а линейная комбинация записывается как

$$\sum_{i=0}^{k} c_i r_i = (G-I) \sum_{i=0}^{k} c_i (x_i - x^*) = (G-I) p(G) (x_0 - x^*),$$

что равно ошибке $p(G)(x_0 - x^*)$, умноженной на (G - I), то есть использование этих коэффициентов будет приближённо минимизировать ошибку.

Предложение 1.2. Пусть

$$c^{\star} = \operatorname*{arg\,min}_{\{c \in \mathbb{R}^{k+1}: c^{\mathsf{T}}\mathbf{1} = 1\}} \left\| \sum_{i=0}^{k} c_i r_i \right\|_2$$

Тогда последовательность x_i , $i = \overline{0,k}$, усреднённая с помощью коэффициентов c^* , удовлетворяет соотношению

$$\left\| \sum_{i=0}^{k} c_i^* x_i - x^* \right\|_2 \leqslant \frac{1}{1 - \sigma} \operatorname*{arg\,min}_{\{c \in \mathbb{R}^{k+1} : c^\mathsf{T} \mathbf{1} = 1\}} \left\| \sum_{i=0}^{k} c_i G^i(x_0 - x^*) \right\|_2, \tag{5}$$

где $0 \leq G \leq \sigma I$, $\sigma < 1$.

Отсюда получаем ускорение Андерсона:

Data: Последовательность $x_0, x_1, \ldots, x_{k+1} \in \mathbb{R}^d$.

- 1 Составить матрицу $R = [r_0, \dots, r_k];$
- 2 Решить задачу

$$c^* = \operatorname*{arg\,min}_{\{c \in \mathbb{R}^{k+1} : c^{\mathsf{T}} \mathbf{1} = 1\}} \left\| \sum_{i=0}^k c_i r_i \right\|_2$$

Result: Аппроксимация $\widehat{x^*} = \sum_{i=0}^k c_i^* x_i$, удовлетворяющая (5). **Algorithm 1:** Anderson acceleration

Из ККТ можно вывести, что решение получается в 2 шага:

- 1. Решить $R^{\mathsf{T}}Rz = \mathbf{1}$
- 2. $c^* = z/(\mathbf{1}^T z)$

2. Regularized nonlinear acceleration

Чтобы повысить численную стабильность алгоритма и обеспечить его работу, если функция g содержит шум вида $x_{i+1}-x_i=g(x_i)-x_i=G(x_i-x^*)+e_i$, добавим регуляризацию в предложенный выше алгоритм:

Data: Последовательность $x_0, x_1, \dots, x_{k+1} \in \mathbb{R}^d$, полученная из метода неподвижной точки, и регуляризационный параметр $\lambda > 0$.

- 1 Составить матрицу $R = [r_0, \dots, r_k]$, где $r_i = x_{i+1} x_i$;
- 2 Решить задачу

шага:

$$c^* = \underset{c^\mathsf{T} \mathbf{1} = 1}{\arg\min} \|Rc\|_2^2 + \lambda \|c\|_2^2,$$

или, что эквивалентно, решить $(R^{\mathsf{T}}R + \lambda I)z = \mathbf{1}$ и взять $c_{\lambda}^* = z/\mathbf{1}^{\mathsf{T}}z$. **Result:** Аппроксимация $\widehat{x^*} = \sum_{i=0}^k (c_{\lambda}^*)_i x_i$, удовлетворяющая (5). **Algorithm 2:** Regularized Nonlinear Acceleration (RNA)

Наконец, добавим поиск по сетке для выбора λ и backtracking для выбора размера

$$\min_{t>0} f(x_0 + t(x_{extr}(\lambda) - x_0))$$

```
Data: Последовательность x_0, x_1, \dots, x_{k+1} \in \mathbb{R}^d, полученная из метода
            неподвижной точки, границы [\lambda_{\min}, \lambda_{\max}] и целевая функция f(x).
 1 Разбить отрезок [\lambda_{\min}, \lambda_{\max}] на k частей, используя логарифмический
     масштаб;
 2 Составить матрицу R = [r_0, \dots, r_k], где r_i = x_{i+1} - x_i;
 з Построить матрицу M = R^{\mathsf{T}} R / \|R^{\mathsf{T}} R\|_2;
 4 for j = \overline{1, k} do
        Решить систему (M + \lambda_j)z = 1;
        Нормировать решение: c_{\lambda_j}^* = z/\mathbf{1}^\mathsf{T} z;
        Вычислить x_{extr}(\lambda_j) = \sum_{i=0}^{\tilde{k}} (c_{\lambda_j}^*)_i x_i;
 8 end
 9 Выбрать x_{extr}^* = \arg\min_{j=\overline{1,k}} f(x_{extr}(\lambda_j));
10 Задать F_t = f(x_0 + t(x_{extr}^* - x_0));
11 t := 1;
12 while F_{2t} < F_t do
13 | t = 2t;
14 end
   Result: Аппроксимация (x_0 + t(x_{extr}^* - x_0))
       Algorithm 3: Adaptive Regularized Nonlinear Acceleration (ARNA)
```

3. Список литературы

- [1] Scieur, D., d'Aspremont, A., and Bach, F. (2016). "Regularized Nonlinear Acceleration". ArXiv e-prints, arXiv:1606.04133.
- [2] Huan He, Shifan Zhao, Yuanzhe Xi, Joyce C Ho, Yousef Saad. "Solve Minimax Optimization by Anderson Acceleration". ArXiv e-prints, arXiv:2110.02457.