Условные градиентные методы. Метод проекции градиента. Метод Франк–Вульфа.

Семинар

Оптимизация для всех! ЦУ

Повтор лекции. Проекция

Проекция

Расстояние d от точки $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$ до замкнутого множества $S \subset \mathbb{R}^n$:

$$d(\mathbf{y}, S, \|\cdot\|) = \inf\{\|x - y\| \mid x \in S\}.$$

Мы будем фокусироваться на **евклидовой проекции** (возможны и другие варианты) точки $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$ на множество $S \subseteq \mathbb{R}^n$. Это точка $\text{proj}_S(\mathbf{y}) \in S$ такая, что

$$\text{proj}_S(\mathbf{y}) = \underset{\mathbf{x} \in S}{\operatorname{argmin}} \frac{1}{2}\|x - y\|_2^2.$$

- **Достаточное условие существования проекции.** Если $S \subseteq \mathbb{R}^n$ — замкнутое множество, то проекция на множество S существует для любой точки.

Проекция

Расстояние d от точки $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$ до замкнутого множества $S \subset \mathbb{R}^n$:

$$
d(\mathbf{y}, S, \|\cdot\|) = \inf\{\|x - y\| \mid x \in S\}.
$$

Мы будем фокусироваться на **евклидовой проекции** (возможны и другие варианты) точки $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$ на множество $S \subseteq \mathbb{R}^n$. Это точка $\text{proj}_S(\mathbf{y}) \in S$ такая, что

$$
\text{proj}_S(\mathbf{y}) = \underset{\mathbf{x} \in S}{\operatorname{argmin}} \frac{1}{2}\|x - y\|_2^2.
$$

- **Достаточное условие существования проекции.** Если $S \subseteq \mathbb{R}^n$ — замкнутое множество, то проекция на множество S существует для любой точки.
- **Достаточное условие единственности проекции.** Если $S \subseteq \mathbb{R}^n$ — замкнутое выпуклое множество, то проекция на множество S единственна для любой точки.

Проекция

Расстояние d от точки $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$ до замкнутого множества $S \subset \mathbb{R}^n$:

$$d(\mathbf{y}, S, \|\cdot\|) = \inf\{\|x - y\| \mid x \in S\}.$$

Мы будем фокусироваться на **евклидовой проекции** (возможны и другие варианты) точки $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$ на множество $S \subseteq \mathbb{R}^n$. Это точка $\text{proj}_S(\mathbf{y}) \in S$ такая, что

$$\text{proj}_S(\mathbf{y}) = \underset{\mathbf{x} \in S}{\text{argmin}} \frac{1}{2}\|x - y\|_2^2.$$

- **Достаточное условие существования проекции.** Если $S \subseteq \mathbb{R}^n$ — замкнутое множество, то проекция на множество S существует для любой точки.
- **Достаточное условие единственности проекции.** Если $S \subseteq \mathbb{R}^n$ — замкнутое выпуклое множество, то проекция на множество S единственна для любой точки.
- Если множество открыто, и точка лежит вне этого множества, то её проекция на это множество может не существовать.

Проекция

Расстояние d от точки $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$ до замкнутого множества $S \subset \mathbb{R}^n$:

$$d(\mathbf{y}, S, \|\cdot\|) = \inf\{\|x - y\| \mid x \in S\}.$$

Мы будем фокусироваться на **евклидовой проекции** (возможны и другие варианты) точки $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$ на множество $S \subseteq \mathbb{R}^n$. Это точка $\text{proj}_S(\mathbf{y}) \in S$ такая, что

$$\text{proj}_S(\mathbf{y}) = \underset{\mathbf{x} \in S}{\operatorname{argmin}} \frac{1}{2}\|x - y\|_2^2.$$

- **Достаточное условие существования проекции.** Если $S \subseteq \mathbb{R}^n$ — замкнутое множество, то проекция на множество S существует для любой точки.
- **Достаточное условие единственности проекции.** Если $S \subseteq \mathbb{R}^n$ — замкнутое выпуклое множество, то проекция на множество S единственна для любой точки.
- Если множество открыто, и точка лежит вне этого множества, то её проекция на это множество может не существовать.
- Если точка лежит внутри множества, то её проекция — это сама точка.

Проекция

Нерастягивающее отображение

Отображение (функция) f называется **нерастягивающим**, если оно является L-Липшицевым с константой $L \leq 1$ [1]. То есть для любых двух точек $x, y \in \mathrm{dom} f$ выполнено

$$\|f(x) - f(y)\| \leq L\|x - y\|, \quad \text{где } L \leq 1.$$

Это означает, что расстояние между образами точек не больше (и может быть меньше), чем расстояние между исходными точками.

[1] Нерастягивающее становится сжимающим, если $L < 1$.

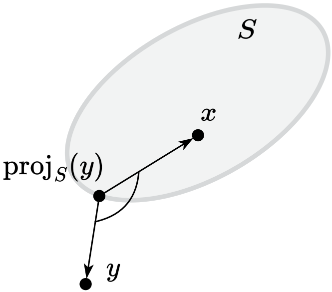


Рис. 1: Тупой или прямой угол должен получаться для любой точки $x \in S$

Задачи

Задача. Проекция на неотрицательный ортант

Пусть $\mathcal{S}$ — неотрицательный ортант. Найдите проекцию

$$\mathsf{proj}_{\mathcal{S}}(\mathbf{y}) = \arg\min_{\mathbf{x} \geq 0} \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|_2,$$

где $\mathbf{x} \geq 0$ означает, что $\mathbf{x}$ лежит в неотрицательном ортанге

$$\mathcal{S} = \{\mathbf{x} \mid x_i \geq 0 \ \forall i\}.$$

Что если $\mathcal{S} = \{x \mid l \leq x \leq u\}$ (покоординатные нижние и верхние границы)?

Задача. Проекция на множество 1-Липшицевых матриц

Скажем, что матрица $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ является L-**Липшицевой** (относительно евклидовой нормы), если для любых двух векторов $x, y \in \mathbb{R}^n$ выполнено

$$\|Ax - Ay\|_2 \leq L\|x - y\|_2.$$

Множество всех таких матриц обозначим

$$\mathcal{L}_L = \{A \in \mathbb{R}^{m \times n} \mid A \text{ — } L\text{-Липшицева}\}.$$

Теперь зафиксируем самый простой случай: $L = 1$ и будем мерить расстояние между матрицами в **норме Фробениуса**:

$$\|X - M\|_F^2 = \sum_{i,j} (X_{ij} - M_{ij})^2.$$

Задача. По данной матрице $M \in \mathbb{R}^{m \times n}$ найти матрицу $X \in \mathcal{L}_1$, которая ближе всего к M в норме Фробениуса для случая $L = 1$:

$$\min_{X \in \mathcal{L}_1} \frac{1}{2}\|X - M\|_F^2.$$

Решение

1. Для линейного отображения A константа Липшица по евклидовой норме равна **операторной норме**:

$$\|Ax - Ay\|_2 \leq L\|x - y\|_2 \;\; \forall x, y \quad \Longleftrightarrow \quad \|A\|_2 \leq L,$$

где $\|A\|_2$ — спектральная норма (наибольшее сингулярное значение).
В нашем случае $L = 1$, значит

$$\mathcal{L}_1 = \{A \mid \|A\|_2 \leq 1\}.$$

Решение

1. Для линейного отображения A константа Липшица по евклидовой норме равна **операторной норме**:

$$\|Ax - Ay\|_2 \leq L\|x - y\|_2 \;\; \forall x, y \quad \Longleftrightarrow \quad \|A\|_2 \leq L,$$

где $\|A\|_2$ — спектральная норма (наибольшее сингулярное значение).
В нашем случае $L = 1$, значит

$$\mathcal{L}_1 = \{A \mid \|A\|_2 \leq 1\}.$$

2. Запишеи сингулярное разложение матрицы M:
$M = U\Sigma V^\top$, где
$\Sigma = \operatorname{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_r), \; \sigma_1 \geq \dots \geq \sigma_r \geq 0.$

Решение

1. Для линейного отображения A константа Липшица по евклидовой норме равна **операторной норме**:

$$\|Ax - Ay\|_2 \leq L\|x - y\|_2 \;\; \forall x, y \quad \Longleftrightarrow \quad \|A\|_2 \leq L,$$

   где $\|A\|_2$ — спектральная норма (наибольшее сингулярное значение).
   В нашем случае $L = 1$, значит

$$\mathcal{L}_1 = \{A \mid \|A\|_2 \leq 1\}.$$

2. Запишеи сингулярное разложение матрицы M:
   $M = U\Sigma V^\top$, где
   $\Sigma = \mathrm{diag}(\sigma_1, \ldots, \sigma_r), \;\; \sigma_1 \geq \ldots \geq \sigma_r \geq 0.$
3. Так как норма в минимизируемой функции является инвариантной к умножению на ортогональную матрицу, то можем искать X в виде $X = U\Sigma' V^\top$ и подбираем новые сингулярные числа σ_i' так, чтобы

$$\|X\|_2 = \max_i \sigma_i' \leq 1$$

Решение

1. Для линейного отображения A константа Липшица по евклидовой норме равна **операторной норме**:

$$\|Ax - Ay\|_2 \leq L\|x - y\|_2 \;\; \forall x, y \quad \Longleftrightarrow \quad \|A\|_2 \leq L,$$

   где $\|A\|_2$ — спектральная норма (наибольшее сингулярное значение).
   В нашем случае $L = 1$, значит

$$\mathcal{L}_1 = \{A \mid \|A\|_2 \leq 1\}.$$

2. Запишеи сингулярное разложение матрицы M:
   $M = U\Sigma V^\top$, где
   $\Sigma = \mathrm{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_r),\;\; \sigma_1 \geq \dots \geq \sigma_r \geq 0.$
3. Так как норма в минимизируемой функции является инвариантной к умножению на ортогональную матрицу, то можем искать X в виде $X = U\Sigma' V^\top$ и подбираем новые сингулярные числа σ_i' так, чтобы

$$\|X\|_2 = \max_i \sigma_i' \leq 1$$

4. Тогда минимизируемая функция:

$$\begin{aligned}
&\|X - M\|_F^2 = \langle X - M, X - M\rangle \\
&= \langle U\Sigma' V^\top - U\Sigma V^\top, U\Sigma' V^\top - U\Sigma V^\top\rangle = \\
&= \langle U(\Sigma' - \Sigma)V^\top, U(\Sigma' - \Sigma)V^\top\rangle = \\
&= V(\Sigma' - \Sigma)^T U^T U(\Sigma' - \Sigma)V^\top = \\
&= V(\Sigma' - \Sigma)^2 V^\top = \\
&= \|(\Sigma' - \Sigma)V^\top\|_F^2 = \\
&= \|(\Sigma' - \Sigma)\|_F^2 = \\
&= \sum_i (\sigma_i' - \sigma_i)^2 \to \min.
\end{aligned}$$

Решение

1. Для линейного отображения A константа Липшица по евклидовой норме равна **операторной норме**:

$$\|Ax - Ay\|_2 \leq L\|x - y\|_2 \ \ \forall x, y \quad \Longleftrightarrow \quad \|A\|_2 \leq L,$$

где $\|A\|_2$ — спектральная норма (наибольшее сингулярное значение).
В нашем случае $L = 1$, значит

$$\mathcal{L}_1 = \{A \mid \|A\|_2 \leq 1\}.$$

2. Запишеи сингулярное разложение матрицы M:
$M = U\Sigma V^\top$, где
$\Sigma = \operatorname{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_r),\ \ \sigma_1 \geq \dots \geq \sigma_r \geq 0.$
3. Так как норма в минимизируемой функции является инвариантной к умножению на ортогональную матрицу, то можем искать X в виде $X = U\Sigma' V^\top$ и подбираем новые сингулярные числа σ_i' так, чтобы

$$\|X\|_2 = \max_i \sigma_i' \leq 1$$

4. Тогда минимизируемая функция:

$$\begin{aligned}
&\|X - M\|_F^2 = \langle X - M, X - M\rangle \\
&= \langle U\Sigma' V^\top - U\Sigma V^\top, U\Sigma' V^\top - U\Sigma V^\top\rangle = \\
&= \langle U(\Sigma' - \Sigma)V^\top, U(\Sigma' - \Sigma)V^\top\rangle = \\
&= V(\Sigma' - \Sigma)^T U^T U(\Sigma' - \Sigma)V^\top = \\
&= V(\Sigma' - \Sigma)^2 V^\top = \\
&= \|(\Sigma' - \Sigma)V^\top\|_F^2 = \\
&= \|(\Sigma' - \Sigma)\|_F^2 = \\
&= \sum_i (\sigma_i' - \sigma_i)^2 \to \min .
\end{aligned}$$

5. Задача распадается **покоординатно**:

$$\min_{\sigma_i' \leq 1} (\sigma_i' - \sigma_i)^2 \quad \Longrightarrow \quad \sigma_i' = \min(\sigma_i, 1).$$

Задача. Проекция на спектраплекс

Спектраплекс — это спектраэдр, определённый как множество

$$
\mathcal{S} := \{X \in \mathbb{S}^n_+ : \operatorname{Tr} X = 1\},
$$

где $\mathbb{S}^n_+$ — множество симметричных положительно полуопределённых матриц размера $n \times n$.

Spectraplex = «spectra» + «simplex», в смысле «собственные значения лежат в симплексе». Спектраплекс — это «полуопределённый» аналог симплекса.

Вопрос. По данной матрице $Z \in \mathbb{R}^{n \times n}$, как найти проекцию Z на множество $\mathcal{S}$?

Иными словами, нужно решить задачу

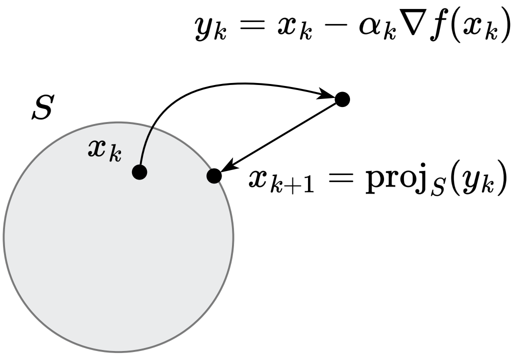
$$
\operatorname*{arg\,min}_{X \succeq 0,\, \operatorname{Tr} X = 1} \frac{1}{2}\|X - Z\|_F^2.
$$

Повтор лекции. Метод проекции градиента (PGD)

Идея метода проекции градиента

$$
x_{k+1} = \text{proj}_S\left(x_k - \alpha_k \nabla f(x_k)\right) \qquad \Leftrightarrow \qquad \begin{aligned} y_k &= x_k - \alpha_k \nabla f(x_k), \\ x_{k+1} &= \text{proj}_S\left(y_k\right). \end{aligned}
$$

Ниже можно найти пример использования этого метода для атаки нейросети (adversarial attack):
Adversarial Attacks.



Повтор лекции. Метод Франк–Вульфа

Метод Франк–Вульфа (FWM). Идея

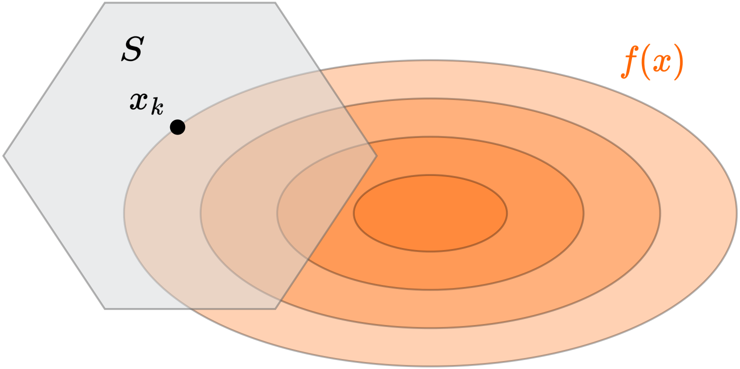


Рис. 3: Иллюстрация метода Франк–Вульфа (метод условного градиента)

Метод Франк–Вульфа (FWM). Идея

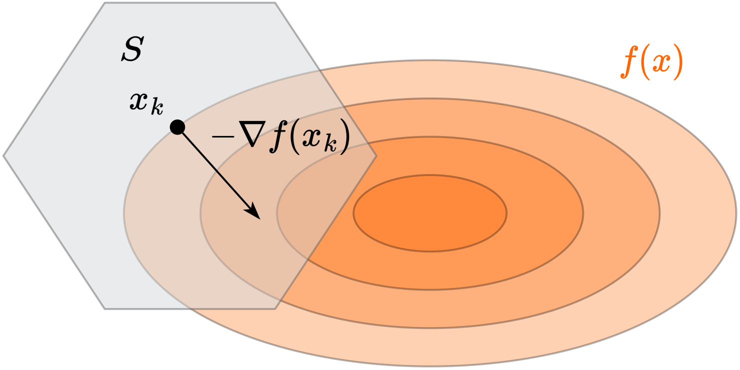


Рис. 4: Иллюстрация метода Франк–Вульфа (метод условного градиента)

Метод Франк–Вульфа (FWM). Идея

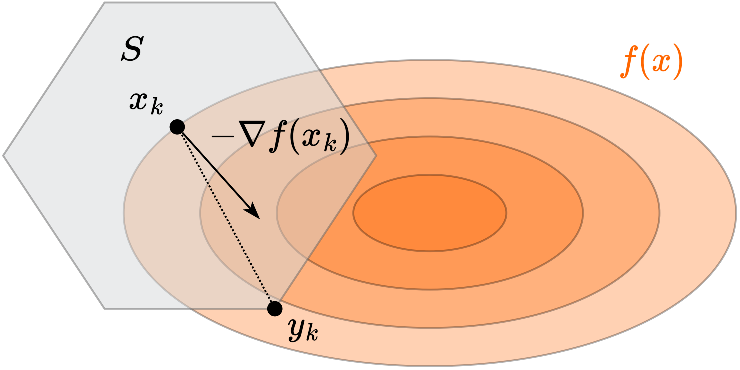


Рис. 5: Иллюстрация метода Франк–Вульфа (метод условного градиента)

Метод Франк–Вульфа (FWM). Идея

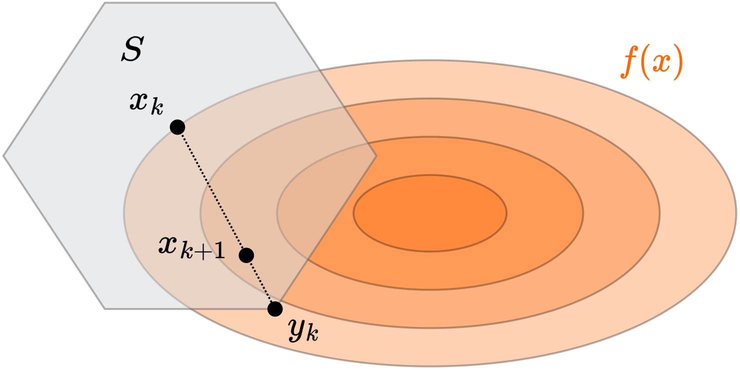


Рис. 6: Иллюстрация метода Франк–Вульфа (метод условного градиента)

Метод Франк–Вульфа (FWM). Идея

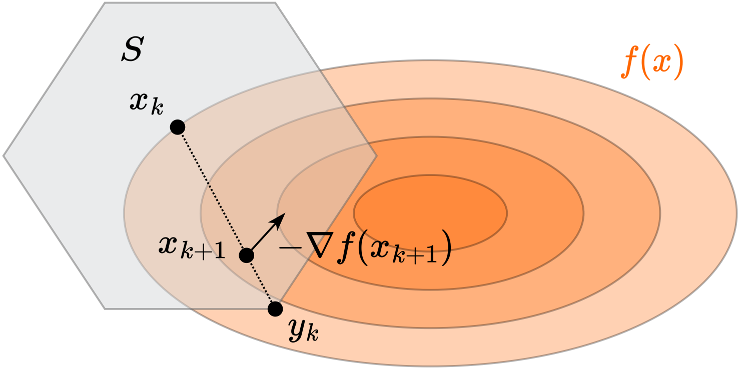


Рис. 7: Иллюстрация метода Франк–Вульфа (метод условного градиента)

Метод Франк–Вульфа (FWM). Идея

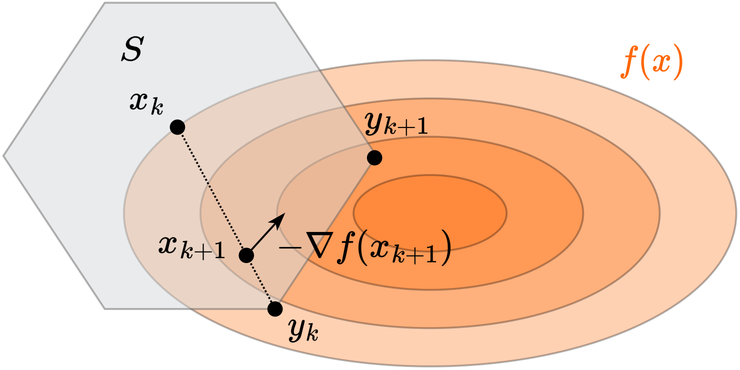


Рис. 8: Иллюстрация метода Франк–Вульфа (метод условного градиента)

Метод Франк–Вульфа (FWM). Идея

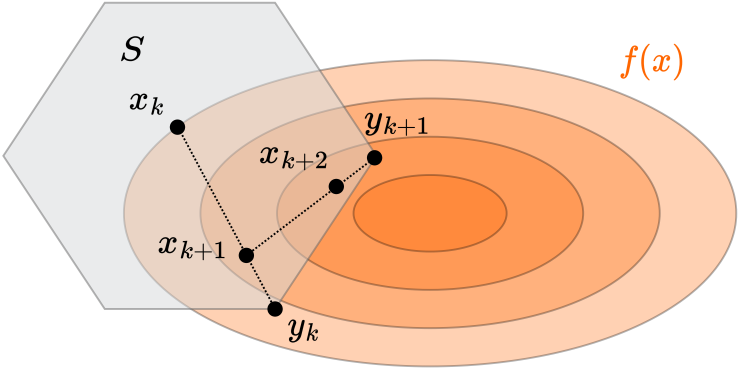


Рис. 9: Иллюстрация метода Франк–Вульфа (метод условного градиента)

Метод Франк–Вульфа (FWM). Идея

$$
\begin{aligned}
y_k &= \arg\min_{x \in S} f^I_{x_k}(x) = \arg\min_{x \in S} \langle \nabla f(x_k), x \rangle, \\
x_{k+1} &= \gamma_k x_k + (1 - \gamma_k) y_k.
\end{aligned}
$$

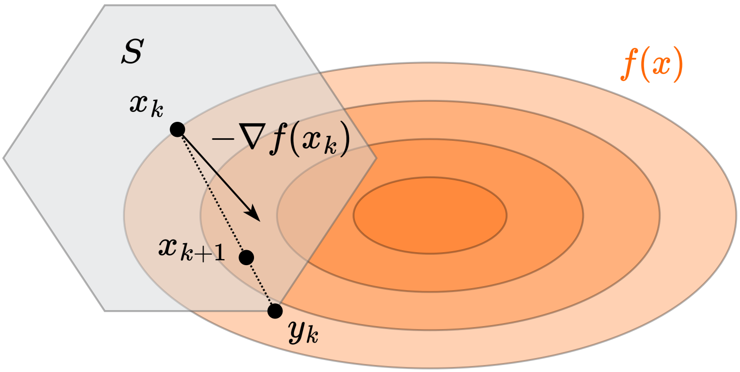


Рис. 10: Иллюстрация метода Франк–Вульфа (метод условного градиента)

Скорости сходимости

Скорость сходимости в гладком выпуклом случае

Theorem

Пусть $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ — выпуклая L-гладкая функция. Пусть $S \subseteq \mathbb{R}^n$ — замкнутое выпуклое множество, и пусть существует минимизатор x^* функции f на S.

- **Метод проекции градиента** с шагом $\frac{1}{L}$ достигает следующей оценки после итерации $k > 0$:

$$
f(x_k) - f^* \leq \frac{L\|x_0 - x^*\|_2^2}{2k}.
$$

Скорость сходимости в гладком выпуклом случае

Theorem

Пусть $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ — выпуклая L-гладкая функция. Пусть $S \subseteq \mathbb{R}^n$ — замкнутое выпуклое множество, и пусть существует минимизатор x^* функции f на S.

- **Метод проекции градиента** с шагом $\frac{1}{L}$ достигает следующей оценки после итерации $k > 0$:

$$
f(x_k) - f^* \leq \frac{L\|x_0 - x^*\|_2^2}{2k}.
$$

- **Метод Франк–Вульфа** достигает следующей оценки после итерации $k > 0$:

$$
f(x_k) - f^* \leq \frac{2L\|x_0 - x^*\|_2^2}{k+1}.
$$

Особенности метода Франк–Вульфа

- Скорость сходимости метода Франк–Вульфа для μ-сильно выпуклых функций — $\mathcal{O}\left(\frac{1}{k}\right)$.

Особенности метода Франк–Вульфа

- Скорость сходимости метода Франк–Вульфа для μ-сильно выпуклых функций — $\mathcal{O}\left(\dfrac{1}{k}\right)$.
- В базовой форме метод не работает для негладких функций. Но существуют модификации, которые с этим справляются.

Особенности метода Франк–Вульфа

- Скорость сходимости метода Франк–Вульфа для μ-сильно выпуклых функций — $\mathcal{O}\left(\frac{1}{k}\right)$.
- В базовой форме метод не работает для негладких функций. Но существуют модификации, которые с этим справляются.
- Метод Франк–Вульфа корректно работает для любой нормы.

Бонус: Зеркальный спуск

Метод субградиентного спуска: линейная аппроксимация + проксимальность

Вспомним шаг SubGD с субградиентом g_k:

$$
x_{k+1} = x_k - \alpha_k g_k \quad \Leftrightarrow \quad
\begin{aligned}
x_{k+1} &= \operatorname*{argmin}_x \underbrace{f(x_k) + g_k^\top (x - x_k)}_{\text{линейная аппроксимация } f} + \underbrace{\frac{1}{2\alpha}\|x - x_k\|_2^2}_{\text{проксимальный член}} \\
&= \operatorname*{argmin}_x \alpha g_k^\top x + \frac{1}{2}\|x - x_k\|_2^2.
\end{aligned}
$$

Идея зеркального спуска: заменить евклидову проксимальность $\|x - x_k\|_2^2$ на другую, более подходящую для задачи меру близости.

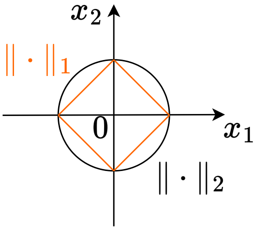


Рис. 11: $\|\cdot\|_1$ не сферически симметрична

Пример. Плохая обусловленность

Рассмотрим функцию

$$f(x_1, x_2) = x_1^2 \cdot \frac{1}{100} + x_2^2 \cdot 100.$$

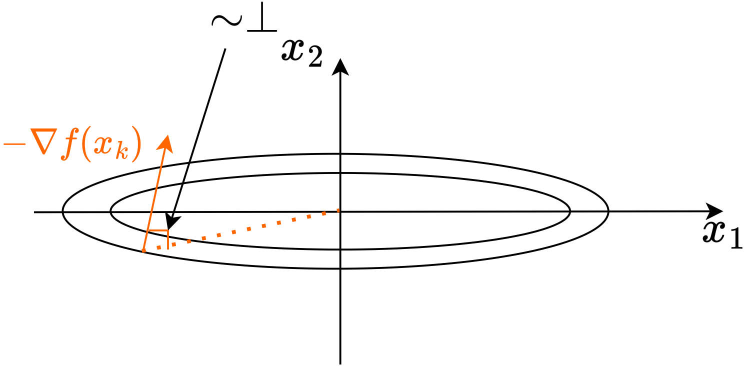


Рис. 12: Плохо обусловленная задача в норме $\|\cdot\|_2$

Пример. Плохая обусловленность

Пусть мы находимся в точке $x_k = (-10 \quad -0.1)^\top$. Метод градиентного спуска: $x_{k+1} = x_k - \alpha \nabla f(x_k)$, где

$$
\nabla f(x_k) = \begin{pmatrix} \dfrac{2x_1}{100} & 2x_2 \cdot 100 \end{pmatrix}^\top \Bigg|_{(-10\ -0.1)^\top} = \begin{pmatrix} -\dfrac{1}{5} & -20 \end{pmatrix}^\top.
$$

Проблема: из-за сильной вытянутости линий уровня направление движения $(x_{k+1} - x_k)$ оказывается почти перпендикулярно вектору $(x^* - x_k)$. **Решение:** поменять проксимальный член:

$$
x_{k+1} = \operatorname*{argmin}_x \underbrace{f(x_k) + g_k^\top (x - x_k)}_{\text{линейная аппроксимация } f} + \underbrace{\frac{1}{2\alpha}(x - x_k)^\top I (x - x_k)}_{\text{проксимальный член}}
$$

на другой:

$$
x_{k+1} = \operatorname*{argmin}_x \underbrace{f(x_k) + g_k^\top (x - x_k)}_{\text{линейная аппроксимация } f} + \underbrace{\frac{1}{2\alpha}(x - x_k)^\top Q (x - x_k)}_{\text{проксимальный член}},
$$

где в этом примере

$$
Q = \begin{pmatrix} \dfrac{1}{50} & 0 \\ 0 & 200 \end{pmatrix}.
$$

Более общая идея — заменить квадратичную форму на произвольную функцию $B_\phi(x, y)$, измеряющую «близость» x и y.

Пример. Плохая обусловленность

Найдём x_{k+1} для **нового** алгоритма:

$$\alpha \nabla f(x_k) + \begin{pmatrix} \frac{1}{50} & 0 \\ 0 & 200 \end{pmatrix} (x - x_k) = 0.$$

Решая это уравнение относительно x, получаем

$$x_{k+1} = x_k - \alpha \begin{pmatrix} 50 & 0 \\ 0 & \frac{1}{200} \end{pmatrix} \nabla f(x_k) = (-10 \ -0.1)^\top - \alpha(-10 \ -0.1)^\top.$$

Наблюдение. Меняя проксимальный член, мы **меняем направление** приращения $x_{k+1} - x_k$.
Иначе говоря, если мы измеряем расстояние «по-новому», мы тем самым **меняем Липшицевость** функции (константу Липшица относительно новой нормы).

Question

Чему равна константа Липшица функции f в точке $(1\ 1)^\top$ относительно нормы

$$\|z\|_A^2 = z^\top \begin{pmatrix} 50 & 0 \\ 0 & \frac{1}{200} \end{pmatrix} z?$$

Пример. Robust Regression (устойчивая регрессия)

Квадратичная ошибка $\|Ax - b\|_2^2$ очень чувствительна к выбросам.

Вместо этого можно рассматривать

$$\min_x \|Ax - b\|_1.$$

Эта задача тоже **выпуклая**.

Посчитаем константу Липшица L для $f(x) = \|Ax - b\|_1$:

$$\big|\|Ax - b\|_1 - \|Ay - b\|_1\big| \leq L\|x - y\|_2.$$

Для упрощения возьмём $A = I$, $b = 0$, то есть $f(x) = \|x\|_1$.

Возьмём $x = \mathbf{1}_d$, $y = (1 + \varepsilon)\mathbf{1}_d$:

$$\big|\|x\|_1 - \|y\|_1\big| = \big|n - (1 + \varepsilon)n\big| = \varepsilon n \leq L\|x - y\|_2 = L\| - \varepsilon\mathbf{1}_d\|_2 = L\sqrt{n\varepsilon^2} = L\varepsilon\sqrt{n}.$$

Итак, получаем $L = \sqrt{n}$. Видно, что L **зависит от размерности**.

> **Question**
>
> Покажите, что если $\|\nabla f(x)\|_\infty \leq 1$, то $\|\nabla f(x)\|_2 \leq \sqrt{n}$.

Литература

Литература

Примеры для зеркального спуска были взяты из лекции.