Домашнее задание №3. Проксимальные стохастические методы. Практическое задание

Дедлайн: 30 апреля 2023 года, 23:59 по Москве

Действует система¹ мягких дедлайнов!

Это практическое домашнее задание. Для его выполнения нужно будет реализовать нужные методы, а затем поставить эксперименты и сделать выводы. Отчет об экспериментах принимается в формате Jupyter notebook. Также нужно прислать код реализованных вами методов (файл algorithms.py). Код с заготовками методов и пояснениями нужно скачать из репозитория. Просьба присылать задания на почту Горбунова Эдуарда: ed-gorbunov@yandex.ru. Кроме того, просьба указывать следующую тему письма: «Методы оптимизации в МL, весна 2023. Домашнее задание 3».

1 Постановка задачи

Задача логистической регрессии 2 формально определяется следующим образом. Пусть $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ — матрица признаков, $y \in \{-1,1\}^m$ — вектор ответов. Здесь m — число объектов в датасете, n — число признаков. Функцию потерь в логистической регрессии можно записать в следующем виде:

$$Loss_{logreg}(x) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} \log \left(1 + \exp\left(-y_i \cdot (Ax)_i\right)\right),\tag{1}$$

где $x \in \mathbb{R}^n$ — вектор параметров, которые мы и хотим подобрать, $(Ax)_i - i$ -я компонента вектора Ax. Как правило, на практике задачу минимизации функции (1) не решают в чистом виде³, а решают регуляризованную задачу

$$Loss_{logreg}(x) + \hat{R}(x) \to \min_{x \in \mathbb{R}^n},$$
 (2)

 $^{^1}$ Указанная дата — мягкий дедлайн, т.е. работы можно присылать некоторое время после дедлайна. Но количество дней просрочки влияет на финальное количество набранных баллов: если прислать задание на k-й день после дедлайна, то заработанные баллы будут домножены на коэффициент $\max\{0, 1-0.1\cdot k\}$. Таким образом, если прислать задание на первый день после дедлайна, то баллы будут домножены на 0.9, если на второй день — на 0.8 и так далее. Отсюда следует, что на 10-й день и позднее после дедлайна за задание можно набрать только 0 баллов. Задание можно присылать частями в разные дни. Тогда баллы за каждую часть, присланную после мягкого дедлайна, будут домножены на свой коэффициент.

 $^{^{2}}$ Вспомнить/познакомиться с тем, что такое логистическая регрессия, можно, например, на хабре или в википедии, но для выполнения задания это не обязательно.

 $^{^{3}}$ Кстати говоря, неплохое разминочное упражнение – подумайте, почему эту задачу не рекомендуется решать в чистом виде. При всех ли A данная задача имеет решение?

где функция $\hat{R}(x)$ — выпуклая, замкнутая и правильная функция. В частности, очень популярна ℓ_2/ℓ_1 -регуляризация $\hat{R}(x) = \frac{l_2}{2} \|x\|_2^2 + l_1 \|x\|_1$. Для простоты в численных методах оптимизации мы будем рассматривать $\frac{l_2}{2} \|x\|_2^2$ не как регуляризатор, а как часть исходной функции. Таким образом, задачу, которую мы будем решать в этом задании, можно переписать в следующем виде:

$$F(x) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} \underbrace{\left(\log\left(1 + \exp\left(-y_i \cdot (Ax)_i\right)\right) + \frac{l_2}{2} ||x||_2^2\right)}_{f_i(x)} + \underbrace{l_1 ||x||_1}_{R(x)} \to \min_{x \in \mathbb{R}^n}, \tag{3}$$

где
$$f(x) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} f_i(x)$$
.

2 Свойства задачи

Из лекции 5 мы знаем как вычислять $\mathrm{prox}_R(x)$:

$$\operatorname{prox}_{R}(x) = [|x| - l_{1}\mathbf{1}]_{+} \odot \operatorname{sign}(x),$$

где $\mathbf{1} \stackrel{\text{def}}{=} (1,\ldots,1)^{\top} \in \mathbb{R}^n$, модуль |x|, срезка⁴ $[|x|-l_1\mathbf{1}]_+$ и сигнум (знак) $\mathrm{sign}(x)$ применяются к векторам покомпонентно и $y\odot z\stackrel{\text{def}}{=} (y_1z_1,\ldots,y_nz_n)^{\top}$ обозначает произведение Адамара двух векторов (покомпонентное произведение).

Разберёмся теперь, какими свойствами обладает функция f(x). Для этого вычислим градиенты и матрицы Гессе функций $f_i(x)$. Для удобства запишем A в следующем виде:

$$A = \begin{pmatrix} a_1^\top \\ \vdots \\ a_m^\top \end{pmatrix}, \quad a_1, \dots, a_m \in \mathbb{R}^n.$$

Тогда

$$\nabla f_{i}(x) = \nabla \left(\log \left(1 + \exp \left(-y_{i} \cdot (Ax)_{i} \right) \right) + \frac{l_{2}}{2} ||x||_{2}^{2} \right)$$

$$= \nabla \left(\log \left(1 + \exp \left(-y_{i} \cdot a_{i}^{\top} x \right) \right) + \frac{l_{2}}{2} ||x||_{2}^{2} \right)$$

$$= -\frac{y_{i} \exp(-y_{i} a_{i}^{\top} x)}{1 + \exp(-y_{i} a_{i}^{\top} x)} a_{i} + l_{2}x = -\frac{y_{i}}{1 + \exp(y_{i} a_{i}^{\top} x)} a_{i} + l_{2}x,$$

откуда

$$\nabla f(x) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} \nabla f_i(x) = -\frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} \frac{y_i}{1 + \exp(y_i a_i^{\top} x)} a_i + l_2 x$$
$$= -\frac{1}{m} \cdot \frac{A^{\top} y}{1 + \exp(y \odot Ax)} + l_2 x,$$

 $^{^4\}Pi$ о определению $[y]_+\stackrel{\mathrm{def}}{=} \max\{y,0\}$

где деление вектора на вектор и вычисление экспоненты от вектора производятся покомпонентно. Таким образом, используя матрично-векторные операции можно вычислять градиент функции f(x). На самом деле точно так же можно вычислять стох. градиенты по любым батчам. Действительно, пусть $S = \{i_1, i_2, \ldots, i_k\}$ — некоторый набор индексов из множества $\{1, 2, \ldots, m\}$ (возможно, с повторениями) и

$$A_S = \begin{pmatrix} a_{i_1}^\top \\ a_{i_2}^\top \\ \vdots \\ a_{i_k}^\top \end{pmatrix}, \quad y_S = \begin{pmatrix} y_{i_1} \\ y_{i_2} \\ \vdots \\ y_{i_k} \end{pmatrix}.$$

Тогда стох. градиент по батчу S равен

$$\frac{1}{k} \sum_{j=1}^{k} \nabla f_{i_j}(x) = -\frac{1}{k} \sum_{j=1}^{k} \frac{a_{i_j} y_{i_j}}{1 + \exp(y_{i_j} a_{i_j}^{\top} x)} + l_2 x$$

$$= -\frac{1}{k} \cdot \frac{A_S^{\top} y_S}{1 + \exp(y_S \odot A_S x)} + l_2 x,$$

то есть и для подсчёта стох. градиента достаточно выполнять матрично-векторные операции. Чтобы оценить параметр сильной выпуклости μ и константу Липшица градиента L функций f_i , вычислим их матрицы Гессе:

$$\nabla^{2} f_{i}(x) = \frac{y_{i}^{2} \exp(y_{i} a_{i}^{\top} x)}{\left(1 + \exp(y_{i} a_{i}^{\top} x)\right)^{2}} a_{i} a_{i}^{\top} + l_{2} I$$

$$= \frac{1}{\left(\exp\left(-\frac{1}{2} y_{i} a_{i}^{\top} x\right) + \exp\left(\frac{1}{2} y_{i} a_{i}^{\top} x\right)\right)^{2}} a_{i} a_{i}^{\top} + l_{2} I,$$

где I — единичная матрица. Заметим, что матрица $a_i a_i^{\top}$ неотрицательно определена и

$$\frac{1}{\left(\exp\left(-\frac{1}{2}y_i a_i^\top x\right) + \exp\left(\frac{1}{2}y_i a_i^\top x\right)\right)^2} \ge 0$$

для всех $x \in \mathbb{R}^n$. Следовательно,⁵

$$\nabla f_i(x) \succeq l_2 I \quad \forall i \in \{1, \dots, m\},$$

а значит, $\nabla f(x) \succeq l_2 I$, то есть функции $f_1(x), f_2(x), \ldots, f_m(x), f(x)$ являются сильно выпуклыми с константой сильной выпуклости $\mu = l_2$ (см. Теорему 2.1.11 из книги Нестерова). Оценим теперь константы гладкости функций $f_i(x)$ и f(x). Введём обозначение $z_i = \exp\left(-\frac{1}{2}y_ia_i^{\top}x\right)$. Тогда

$$\frac{1}{\left(\exp\left(-\frac{1}{2}y_{i}a_{i}^{\top}x\right) + \exp\left(\frac{1}{2}y_{i}a_{i}^{\top}x\right)\right)^{2}} = \frac{1}{\left(z_{i} + \frac{1}{z_{i}}\right)^{2}} \le \frac{1}{4},$$

 $^{^5}$ Обозначение $B\succeq C$, определённое для квадратных матриц B и C, означает, что матрица B-C является положительно полуопределённой.

где мы воспользовались тем, что для любого положительного числа z выполняется неравенство $z+\frac{1}{z}\geq 2$ (это неравенство следует, например, из неравенства межу средним арифметическим и средним геометрическим, применённым для чисел z и $\frac{1}{z}$). Отсюда следует, что

$$\nabla^2 f_i(x) \preceq \frac{a_i a_i^{\top}}{4} + l_2 I$$

И

$$\nabla^2 f(x) \le \frac{1}{4m} \sum_{i=1}^m a_i a_i^{\top} + l_2 I = \frac{1}{4m} A^{\top} A + l_2 I.$$

Максимальное собственное число матрицы $a_i a_i^{\mathsf{T}}$ равняется

$$4\hat{L}_i \stackrel{\text{def}}{=} \lambda_{\max}(a_i a_i^{\top}) = \max_{\|x\|_2 = 1} x^{\top} a_i a_i^{\top} x = \max_{\|x\|_2 = 1} (a_i^{\top} x)^2$$

$$= \begin{cases} \left(a_i^{\top} \frac{a_i}{\|a_i\|_2}\right)^2, & \text{если } a_i \neq 0, \\ 0, & \text{иначе} \end{cases} = \|a_i\|_2^2.$$

Тогда константа гладкости функции f_i равняется

$$L_i = \hat{L}_i + l_2 = \frac{\|a_i\|_2^2}{4} + l_2.$$

Отсюда видно, что для разных $f_i(x)$ у нас своя константа гладкости, а в лекциях мы предполагали, что эти константы одинаковы. В качестве общей константы гладкости для всех f_i нам придётся взять «худшую», т.е. максимальную, из них:

$$L_{\text{worst}} = \max_{i \in \{1, \dots, m\}} L_i = \max_{i \in \{1, \dots, m\}} \frac{\|a_i\|_2^2}{4} + l_2.$$

Заметим, что мы автоматически показали, что функция f(x) является L_{worst} -гладкой, но для функции f(x) эта оценка может оказаться очень грубой. Во-первых, из имеющихся фактов мы на самом деле можем утверждать, что f(x) является L_{average} -гладкой, где

$$L_{\text{average}} = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} L_i = \frac{1}{4m} \sum_{i=1}^{m} ||a_i||_2^2 + l_2.$$

Константа L_{average} может оказаться существенно меньше, чем L_{worst} , что в свою очередь означает, что для таких методов, как prox-GD и FISTA, мы можем использовать шаги бОльших размеров, что улучшает скорость сходимости как в теории, так и на практике. Во-вторых, мы можем уточнить оценку для константы гладкости f, если воспользуемся уже доказанным неравенством $\nabla^2 f(x) \preceq \frac{A^\top A}{4m} + l_2 I$. Действительно, отсюда следует, что мы можем взять в качестве константы гладкости f следующую оценку:

$$L = \frac{1}{4m} \lambda_{\max}(A^{\top}A) + l_2 = \frac{1}{4m} \sigma_{\max}^2(A) + l_2,$$

где $\sigma_{\rm max}$ — максимальное сингулярное ⁶ число матрицы A.

 $^{^6}$ Если вдруг кто-то забыл, что это такое, то почитайте статью в Википедии про сингулярное разложение матрицы (SVD).

Как вы скоро в этом убедитесь, константа L_{worst} может быть заметно больше L. Однако в методах (и даже стохастических) часто (но не всегда) можно использовать константу L вместо L_{worst} , поэтому далее в этом задании используйте именно константу L для выбора размера шага в методах.

3 Задания (20 баллов)

Вам предлагается выполнить несколько заданий, связанных с имплементацией изученных методов и тестированием их на задаче логистической регрессии. Все детали и тесты корректности работы (для каждого метода обязательно нужно, чтобы он проходил тест корректности) можно найти в jupyter notebook'е. Если в задании вас просят объяснить полученные результаты, то нужно прокомментировать, как они соотносятся с теорией (с указанием теоремы или слайда с лекции, где этот вопрос обсуждался) и почему те или иные методы работают быстрее/медленнее и с чем это на ваш взгляд связано. При сравнении методов нужно выбирать одну и ту же точку старта. Если в задании требуется сравнить работу разных методов или работу одного метода, но с разным выбором размера шага/размера батча, то необходимо строить кривые сходимости для каждого метода на одном графике.

- 1. (1 балл) Как мы уже убедились, чтобы посчитать градиент функции f(x) необходимо умножить матрицу A^{\top} на вектор и матрицу A на вектор (аналогично в случае, когда нужно посчитать стох. градиент по батчу). Скорость вычисления этих произведений иногда очень существенно зависит от того, в каком формате хранится матрица A (детали см. в jupyter notebook'e). Проанализируйте для 5-ти различных датасетов (обязательно рассмотрите a9a, gisette и australian, остальные 2 датасета выберите сами), в каком формате лучше хранить A, чтобы итерации методов, которые вы будете имплементировать, работали быстрее (рассмотрите батчи размера 1, 10, 100 и случай, когда батч равен размеру датасета). Кроме того, оцените константы гладкости $L_{\rm worst}$, $L_{\rm average}$ и L из формул выше (при $l_2 = 0$) для выбранных датасетов. Везде далее (если не оговорено обратное) будем считать, что L это константа гладкости функции f(x) при $l_2 = 0$.
- 2. (1 балл) Имплементируйте функцию, вычисляющую $\operatorname{prox}_R(x)$ для $R(x) = l_1 x$.
- 3. (1 балл) Имплементируйте prox-SVRG с мини-батчингом (см. Алгоритм 1).

Algorithm 1 prox-SVRG с мини-батчингом

```
Require: размер шага \gamma>0, стартовая точка x^0\in\mathbb{R}^d, количество эпох S, длина внутреннего цикла
     M, размер батча r
 1: Пусть w = x^0
 2: for s = 0, 1, \dots, S - 1 do
          Вычислить \nabla f(w)
 3:
          for k = 0, 1, ..., M - 1 do
 4:
 5:
              Случайно равновероятно и независимо друг от друга выбрать индексы J = \{j_1, j_2, \dots, j_r\}
     (возможно, с повторениями) из множества \{1, 2, \dots, m\}
             g^{k} = \frac{1}{r} \sum_{l=1}^{r} \nabla f_{j_{l}}(x^{k}) - \frac{1}{r} \sum_{l=1}^{r} \nabla f_{j_{l}}(w) + \nabla f(w)x^{k+1} = \operatorname{prox}_{\gamma R} (x^{k} - \gamma g^{k})
 6:
 7:
          end for
 8:
          w = x^0 := x^M
 9:
10: end for
```

Используйте заготовку, которая есть в файле algorithms.py. Обратите внимание, что есть возможность передать массив индексов indices, который содержит случайно сгенерированную выборку из равномерного распределения на множестве $\{1, 2, \dots, m\}$ и которую можно использовать для контроля правильности работы вашей имплементации. Запустите вашу имплементацию для $\gamma=\frac{1}{6(L+l_2)}$ на датасете a9a. Возьмите $l_2=\frac{L}{10000}$ и $l_1=rac{L}{1000}$. Если взять $S=50,\ M=rac{2*m}{r},\ r=10$ и $l_1=0,$ то значение функции F(x)в найденной точке должно быть примерно таким же, как и значение, которые находит стандартный солвер из scipy. Обратите внимание, как зависит число ненулевых элементов у точек, генерируемых prox-SVRG, от l_1 . Многие знают, что ℓ_1 -регуляризацию применяют в частности для того, чтобы производить отбор признаков. Таким образом добиваются того, что точка минимума функции F(x) имеет разреженную структуру (это контролируется выбором l_1). Так вот оказывается, что проксимальные методы для такой задачи генерируют последовательности точек, которые тоже обладают разреженной структурой, начиная с некоторого момента. Для этого сравните точку, которую выдаёт prox-SVRG, с точкой, которую находит стандартный солвер. Для хотя бы одного датасета рассмотрите 2 случая: $l_1 = 0$ и такое l_1 , что процент ненулевых координат в решении лежит между 10% и 30%. Для всех остальных датасетов достаточно рассматривать только второй случай. Решение можно находить приближённо, используя prox-SVRG: запустите метод с размером батча 10 или 100 с таким S, чтобы метод работал примерно 10-20минут ($S \approx 1000$ для а9а и r = 10).

Сравните работу prox-SVRG для батчей размера r=1,10,100 (при этом выбирайте $M=\frac{2m}{r}$) для датасета a9a (параметр indices выставляйте равным None). При этом не нужно запускать метод на слишком большое число эпох, достаточно, чтобы он достигал $\frac{\|x^k-x^*\|_2^2}{\|x^0-x^*\|_2^2}$ порядка 10^{-8} . Здесь и везде далее значение l_2 выбирайте равным $l_2=\frac{L}{10000}$.

Для корректного сравнения, Вам потребуется проделать действия ниже и ответить на вопросы.

• Для каждого значения ℓ_1 постройте графики сравнения работы метода по числу

итераций, по числу эпох (число подсчётов градиентов слагаемых, делённое на размер датасета) и по времени. В итоге у Вас должно получится для каждого значения ℓ_1 по 3 гарфика, на каждом графике – 3 траектории метода (каждая траектория соответствует конкретному размеру батча).

- Для какого размера батча метод сходится быстрее по числу итераций? По числу эпох? По затраченному времени? Почему так получается и как это связано (и связано ли) с теоретическими гарантиями рассмотренными в лекции 6?
- 4. (4 балла) Имплементируйте prox-SGD с мини-батчингом и постоянным шагом. Имплементируйте prox-SGD с мини-батчингом и периодически уменьшающимся шагом.

Algorithm 2 prox-SGD с мини-батчингом и постоянным шагом

```
Require: размер шага \gamma > 0, стартовая точка x^0 \in \mathbb{R}^d, количество эпох S, размер батча r
1: for k = 0, 1, \ldots, S \cdot m - 1 do
2: Случайно равновероятно и независимо друг от друга выбрать индексы J = \{j_1, j_2, \ldots, j_r\} (возможно, с повторениями) из множества \{1, 2, \ldots, m\}
3: g^k = \frac{1}{r} \sum_{l=1}^r \nabla f_{j_l}(x^k)
4: x^{k+1} = \operatorname{prox}_{\gamma R} \left( x^k - \gamma g^k \right)
5: end for
```

Algorithm 3 prox-SGD с мини-батчингом и уменьшающимся шагом

```
Require: стартовый размер шага \gamma > 0, стартовая точка x^0 \in \mathbb{R}^d, количество эпох S, размер батча
     r, период уменьшения шага (в эпохах) T, коэффициент уменьшения шага \beta
 1: c = 1
 2: d = 0
 3: for k = 0, 1, \dots, S \cdot m - 1 do
         if d \geq T \cdot c then
 4:
             \gamma := \gamma \cdot \beta
 5:
             c := c + 1
 6:
 7:
         Случайно равновероятно и независимо друг от друга выбрать индексы J = \{j_1, j_2, \dots, j_r\}
     (возможно, с повторениями) из множества \{1, 2, ..., m\}
         d := d + \frac{r}{m}
 9:
        g^k = \frac{1}{r} \sum_{l=1}^r \nabla f_{j_l}(x^k)
10:
         x^{k+1} = \operatorname{prox}_{\gamma R} \left( x^k - \gamma g^k \right)
11:
12: end for
```

Проверьте правильность имплементации, используя подготовленные тесты. Сравните (постройте графики) prox-SGD с постоянным шагом при разных γ (удобно выбирать $\gamma = \alpha \cdot \frac{1}{L+l_2}$ и пробовать разные значения α ; нужно попробовать α разного порядка; достаточно взять $\alpha = 1, 0.1, 0.01$) и prox-SGD с уменьшающимся шагом при разных политиках выбора T и β . Рассмотрите размеры батчей r = 1, 10, 100. Не обязательно строить

все графики в одной картинке, важно, чтобы построенные графики для разных методов можно было легко отличить. Объясните полученные результаты по аналогии с предыдущим пунктом.

Для корректного сравнения, Вам потребуется проделать действия ниже и ответить на вопросы.

- Сначала рассмотрите prox-SGD с мини-батчингом и постоянным шагом. Для каждого размера батча r=1,10,100 запустите prox-SGD с размером шага $\gamma=\alpha\cdot\frac{1}{L+l_2}$ с $\alpha=1,0.1,0.01$. Для каждого значения r постройте графики сходимости prox-SGD с разными α (по числу итераций, эпох и времени работы). Какое α лучше выбирать? Зависит ли ответ от желаемой точности? Зависит ли ответ от r?
- Теперь рассмотрите prox-SGD с мини-батчингом и уменьшающимся шагом. Для каждого размера батча r=1,10,100 запустите prox-SGD со стартовым размером шага $\gamma=\frac{1}{L+l_2}$. Попробуйте T=1,2 и $\beta=0.5,0.9$ (4 варианта). Для каждого значения r постройте графики сходимости prox-SGD с разными политиками выбора T,β . Какая политика выбора шага лучше? Зависит ли ответ от желаемой точности? Зависит ли ответ от r?
- Теперь для обоих вариантов prox-SGD для каждого r выберите лучшие параметры $(\alpha$ в первом случае, T, β во втором случае) для достижения точности $\varepsilon = 10^{-3}$. Они понадобятся для предпоследнего пункта.
- 5. (2 балла) Имплементируйте методы prox-GD, FISTA (вариант для сильно выпуклого случая, см. лекцию 4), а также обычный субградиентный спуск (GD)⁷. Для prox-GD и FISTA параметры выбирайте согласно лекции 4, для GD размер шага попробуйте подбирать как $\gamma = \alpha \cdot \frac{1}{L+l_2}$ с $\alpha = 1, 0.1, 0.01$. Постройте графики сходимости и объясните полученные результаты по аналогии с предыдущими пунктами.
- 6. (2 балла) Выберите для каждого метода его лучшие параметры (в случае prox-SGD лучшие параметры для достижения точности $\varepsilon = 10^{-3}$ для каждого r), которые вы для него тестировали, и постройте на одной картинке 9 траекторий сходимости рассмотренных методов. Сравните методы по времени работы и по числу проходов по датасету. Объясните полученные результаты, опираясь на теоретические результаты рассмотренные в лекциях.
- 7. (9 баллов) Повторите эксперименты из предыдущих пунктов для ещё одного датасета на Ваш выбор. Вызывать тесты корректности работы не нужно.

⁷Контрольный вопрос: в чём разница между prox-GD и GD для рассматриваемой задачи?