Московский Физико-Технический Институт
(Национальный Исследовательский Университет)

Факультет Управления и Прикладной Математики
Кафедра «Интеллектуальные Системы»

ДИПЛОМНАЯ РАБОТА СТУДЕНТА 574 ГРУППЫ

«Адаптивность градиентных методов»

Выполнил:
студент 4 курса 574 группы
Плетнев Никита Вячеславович

Научный руководитель:
д. ф.-м. н.
Гасников Александр Владимирович

Москва, 2019

Оглавление

1 Аннотация

Работа посвящена построению эффективного метода выпуклой оптимизации первого порядка, то есть использующего только значения функции и ее производных. Предлагается адаптивный по константе сильной выпуклости алгоритм, основанный на рестартах быстрого градиентного метода OGM-G с обновлением оценки константы сильной выпуклости. При этом устраняется недостаток использованного метода, связанный с необходимостью знания данной константы для определения числа шагов. Доказываются оценки для сложности построенного алгоритма. Для проверки полученных результатов проводятся эксперименты на модельной функции.

Ключевые слова: выпуклая оптимизация, методы первого порядка, быстрые градиентные методы, адаптивность по константе сильной выпуклости.

2 Введение

Работа посвящена методам оптимизации первого порядка, то есть методам, использующим лишь значения функции и ее градиента.

Задачи оптимизации функций высокой размерности имеют многообразные приложения, например, в машинном обучении, управлении, экономике и энергетике. Методы первого порядка пользуются большой популярностью, потому что их реализация обладает относительно невысокой вычислительной сложностью: требует вычисления только значения функции, ее градиента и простейших векторных операций.

В настоящее время активно развиваются быстрые градиентные методы, основанные на следующей идее: задается число операций, строятся оптимальные для данного числа операций последовательности коэффициентов, которые используются для получения последовательности точек. Такой подход реализован в статье [1] (метод OGM-G), а общее описание можно найти в пособии [2].

Проблема данного подхода заключается в том, что требуемое для достижения заданного результата, например, уменьшения нормы градиента вдвое, число итераций неизвестно. Поэтому для эффективного применения подобных методов необходимо оценивать это число.

В пособии [2] предлагается способ оценки, но он требует знания константы сильной выпуклости μ. Также там указана предложенная Ю. Е. Нестеровым идея применения быстрого градиентного метода с оцениванием данного параметра и обновлением его значения при каждом рестарте.

Предлагается применить тот же подход к оцениванию параметра L.

Другим недостатком данных методов является фиксированный шаг $\frac{1}{L}$. Его наличие приводит к замедлению сходимости, хоть и гарантирует ее наличие. И этот параметр — константа Липшица для градиента — неизвестен, как и константа сильной выпуклости.

Основным содержанием работы являются реализация и экспериментальная проверка данных идей. Структура работы: в разделе 3 вводятся используемые определения и обозначения, раздел 4 содержит обзор текущего состояния литературы по теме, в разделе 5 описывается исходный алгоритм OGM-G; раздел 6 посвящен построению алгоритма ACGM, адаптивного по константе сильной выпуклости, а в разделе 7 строится ALGM, адаптивный по константе Липшица градиента. В разделе 8 проводится экспериментальная проверка полученных результатов, а раздел 9 — заключительный, в нем собраны основные выводы.

3 Определения и предположения

Решается задача безусловной минимизации:

$$\min_{x \in \mathrm{R}^d} f(x). \tag{1}$$

Предполагается, что решение

$$x^* = \arg\min_{x \in \mathrm{R}^d} f(x) \tag{2}$$

существует, а градиент функции $f(x)$ удовлетворяет условию Липшица с константой $L > 0$:

$$||\nabla f(x) - \nabla f(y)|| \leq L||x - y|| \ \forall x, y \in \mathrm{R}^d. \tag{3}$$

Также считается, что функция $f(x)$ является сильно выпуклой с неизвестной нам константой $\mu > 0$:

$$\frac{\mu}{2}||x - x^*||^2 \leq f(x) - f(x^*) \leq \frac{1}{2\mu}||\nabla f(x)||^2. \tag{4}$$

Первое неравенство напрямую следует из определения, второе доказывается в соответствии с [2]:

$$f(x^*) = \min_y f(y) \geq \min_y \left(f(x) + \langle \nabla f(x), y - x \rangle + \frac{\mu}{2}||x - y||^2 \right) =$$

$$= f(x) - \frac{1}{2\mu}||\nabla f(x)||^2.$$

В качестве невязки нахождения точки экстремума функции используется норма градиента. Критерий останова выглядит так:

$$||\nabla f(x)|| \leq \varepsilon. \tag{5}$$

Траекторией метода оптимизации называется последовательность порождаемых им точек.

Рестартом называется перезапуск метода с использованием результата предыдущего запуска в качестве начального значения.

Константа, с которой функция удовлетворяет определению сильной выпуклости в окрестности некоторой части траектории, превосходящая μ, обозначается μ^{loc}.

Алгоритм называется адаптивным по некоторому параметру, если его применение не требует никаких предположений о значении данного параметра.

4 Обзор литературы

Использованная в работе статья [1] посвящена построению оптимальной последовательности коэффициентов для быстрого градиентного метода. Построенный в ней метод OGM-G является оптимальным среди методов с фиксированным числом шагов, в статье доказаны оценки для его скорости сходимости. Изложению результатов [1] в части оценок, касающихся целей работы, посвящен раздел 5.

В пособии [2] излагается современное состояние быстрых градиентных методов. Среди прочего, в нем содержатся идеи адаптивного подбора неизвестных констант; на этих идеях построено основное содержание работы — разделы 6 и 7. В частности, в параграфе 5 пособия изложен придуманный Ю. Е. Нестеровым метод адаптивного подбора константы Липшица, известный как универсальный градиентный спуск. На основе данного метода в работе построен быстрый алгоритм, адаптивный как по константе сильной выпуклости, так и по константе Липшица для градиента.

В статье [3] разрабатываются численные методы оптимизации энтропии. Там применен подход, похожий на использованный в работе, в котором подбираемый параметр изменяется в одно и то же число раз β, и суммарное количество шагов оценивается с помощью суммы геометрической прогрессии. После этого из соображений минимизации данной оценки выбирается β. Тот же способ определения оптимального коэффициента для подбора используется в работе.

Пособие [4] посвящено изложению основ теории оптимизации и простых методов, которые служат основой для современных алгоритмов.

Статья [5] посвящена решению близкой задачи — построению адаптивного по константе сильной выпуклости метода стохастического градиентного спуска. Однако в ней цель полностью не достигнута, так как полученный алгоритм является эффективным лишь с точностью до логарифмического множителя.

В статье [6] также строится метод, адаптивный по константе сильной выпуклости, но оценка сложности полученного алгоритма тоже содержит логарифмический множитель.

5 Исходный алгоритм

5.1 OGM-G

В качестве базового алгоритма взят ускоренный градиентный метод с фиксированным шагом OGM-G. В [1] показана его оптимальность в классе методов с заданным числом шагов фиксированной длины.

Вход: $f \in \mathcal{F}_L(\mathbb{R}^d)$, $\mathbf{x}_0 = \mathbf{y}_0 \in \mathbb{R}^d$, $N \geq 1$.

Для $i = 0 \dots N-1$:

$\mathbf{y}_{i+1} = \mathbf{x}_i - \frac{1}{L}\nabla f(\mathbf{x}_i)$;

$\mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{y}_{i+1} + \beta_i(\mathbf{y}_{i+1} - \mathbf{y}_i) + \gamma_i(\mathbf{y}_{i+1} - \mathbf{x}_i)$.

Коэффициенты β_i, γ_i вычисляются по формулам:

$\beta_i = \dfrac{(\theta_i - 1)(2\theta_{i+1} - 1)}{\theta_i(2\theta_i - 1)}$; $\gamma_i = \dfrac{2\theta_{i+1} - 1}{2\theta_i - 1}$,

где последовательность $\{\theta_i\}_{i=0}^N$ строится следующим образом:

$$\theta_i = \begin{cases} \frac{1+\sqrt{1+8\theta_1^2}}{2}, & i = 0; \\ \frac{1+\sqrt{1+4\theta_{i+1}^2}}{2}, & 1 \leq i < N; \\ 1, & i = N. \end{cases}$$

5.2 Оценки

По теореме 2 из [1], при применении OGM-G

$$||\nabla f(x^N)||^2 \leq \frac{4L(f(x^0) - f(x^*))}{N^2}. \tag{6}$$

Оттуда же,

$$f(x^N) - f(x^*) \leq \frac{L||x^0 - x^*||^2}{N^2}. \tag{7}$$

Из (4) и (6):

$$||\nabla f(x^N)||^2 \leq \frac{4L}{N^2}\frac{1}{2\mu}||\nabla f(x^0)||^2, \tag{8}$$

или

$$||\nabla f(x^N)|| \leq \sqrt{\frac{2L}{\mu N^2}}||\nabla f(x^0)||. \tag{9}$$

Таким образом, выполнение N итераций гарантирует уменьшение нормы градиента $f(x)$ как минимум вдвое, где

$$N = 2\sqrt{2\frac{L}{\mu}} \tag{10}$$

Согласно лемме 4 статьи [1], полученная оценка является неулучшаемой в худшем случае.

5.3 Недостатки метода

Полученная оценка показывает, что использование OGM-G неявно предполагает, помимо наличия известной константы Липшица, знание константы сильной выпуклости.

Практически во всех реальных случаях применения методов оптимизации ни одно из этих предположений не выполняется: свойства функции заранее неизвестны, а вычисление данных параметров требует нахождения минимума и максимума собственных значений матрицы Гессе, что значительно сложнее, чем исходная задача оптимизации.

Указанные соображения делают оптимальный теоретически метод неприменимым на практике. Решению данной проблемы посвящен следующий раздел.

6 Адаптивность по константе сильной выпуклости

6.1 ACGM

Ю. Е. Нестеровым в пособии [2] предложен способ построения адаптивного по μ алгоритма, основанного на рестартах OGM-G.

В этом разделе OGM-G используется в качестве «черного ящика», получающего на вход функцию f, начальную точку $\mathbf{x}_0$, константу Липшица L и константу сильной выпуклости μ. Число итераций N, используемое методом, вычисляется по формуле (10). В дальнейшем применение OGM-G как шага в алгоритмах будет обозначаться как $OGMG(f, \mathbf{x}_0, L, \mu)$.

ACGM — Adaptive by constant of strong Convexity Gradient Method — решает проблему неизвестности μ, инициализируя ее произвольным значением с последующим изменением.

На каждом шаге предполагаемое значение μ умножается на одно и то же $\beta > 1$.

ACGM

Вход: $f \in \mathcal{F}_L(\mathbb{R}^d)$, $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^d$, L, μ_0, β, ε.

Пока не выполнено условие остановки (5):

k — номер шага.

1 $\mu_k := \beta\mu_{k-1}$;

2 $\mathbf{x}_k = OGMG(f, \mathbf{x}_{k-1}, L, \mu_k)$;

3 Если выполнено условие $||\nabla f(x_k)|| \le \frac{1}{2}||\nabla f(x_{k-1})||$, то перейти к следующему шагу;

4 Иначе $\mu_k := \frac{\mu_k}{\beta}$ и вернуться к пункту 2. Если при этом выполнено условие $||\nabla f(x_k)|| < ||\nabla f(x_{k-1})||$, то x_{k-1} заменяется на x_k.

6.2 Оценки

В результате применения ACGM очередное уменьшение вдвое нормы градиента будет выполнено за

$$2\sqrt{2\frac{L}{\mu_k^{init}}} + 2\sqrt{2\frac{L}{\mu_k^{init}/\beta}} + \ldots + 2\sqrt{2\frac{L}{\mu_k^{init}/\beta^m}} = \sqrt{8\frac{L}{\mu_k}}\sum_{i=0}^{m}\frac{1}{\sqrt{\beta^i}} \lesssim \frac{\sqrt{8\beta}}{\sqrt{\beta}-1}\sqrt{\frac{L}{\mu_k}}$$

итераций метода OGM-G, где m — количество повторений цикла на шаге k, а индекс $init$ указывает на то, что в формуле используется не конечное значение переменной, а то, которым она была инициализирована.

При этом μ_k отличается не более чем в β раз от μ^{loc}. Использование значения μ, подходящего для всего пространства, могло бы повысить количество операций.

Действительно, если последовательные n точек траектории ACGM лежат в области, в которой $f(\mathbf{x})$ сильно выпукла с константой $\mu^{loc} \ge \beta^s\mu$, то в данных точках ACGM применяется с $\mu_0 \ge \dfrac{\mu^{loc}}{\beta} \ge \beta^{s-1}\mu$. Тогда количество обращений к вычислению градиента для каждого уменьшения его нормы вдвое оказывается не более $2\sqrt{2\frac{L}{\beta^{s-1}\mu}}$ — то есть, в $\beta^{\frac{s-1}{2}}$ раз меньше, чем при $\mu_k \equiv \mu$.

Суммарное количество итераций при работе ACGM с использованием критерия останова (5) оценивается следующим образом. Требуется выполнить $K = \log_2\frac{||\nabla f(x^0)||}{\varepsilon}$ шагов. Каждый шаг содержит $O\left(\sqrt{\frac{L}{\mu}}\right)$ итераций, поэтому алгоритм завершит работу, выполнив $O\left(\sqrt{\frac{L}{\mu}}\log_2\frac{||\nabla f(x^0)||}{\varepsilon}\right)$ итераций — то есть, вычислений $f(x)$ и $\nabla f(x)$.

Как показано выше, полученная оценка по порядку величины может быть уточнена. Если $\mu_k \ge \frac{\mu_k^{loc}}{\beta}$, то каждый шаг ACGM содержит не более $\frac{\sqrt{8\beta}}{\sqrt{\beta}-1}\sqrt{\frac{L}{\mu_k}} \le$

$\frac{\sqrt{8}\beta}{\sqrt{\beta}-1}\sqrt{\frac{L}{\mu_k^{loc}}}$ итераций, соответственно общее количество итераций не превосходит

$$\frac{\sqrt{8}\beta}{\sqrt{\beta}-1}\sum_{k=0}^{K-1}\sqrt{\frac{L}{\mu_k^{loc}}}.$$

Данное вычисление основано на идее оценки из [3].

Минимизация зависящего от β коэффициента дает $\beta = 4$.

Это значение является оптимальным лишь с точки зрения худшего случая, когда $\mu_k = \frac{\mu_k^{loc}}{\beta}$. В реальных случаях, поскольку данное равенство является лишь теоретически возможным предельным случаем, значение коэффициента может оказаться меньше данного, но в любом случае оно превосходит $\inf_{\beta>1}\frac{\sqrt{\beta}}{\sqrt{\beta}-1} = 1$

Таким образом, доказаны теоремы о сходимости построенного метода.

Теорема 1 *Алгоритм ACGM с оптимальным* $\beta = 4$ *и* $\mu_0 > \max_k \mu_k^{loc}$ *достигает точки* $\mathbf{x}$*, удовлетворяющей критерию останова (5), за не более чем* $C\sum_{k=0}^{K-1}\sqrt{\frac{L}{\mu_k^{loc}}}$ *вычислений градиента, где* $K = \log_2\frac{||\nabla f(\mathbf{x}^0)||}{\varepsilon}$, $C = \frac{\sqrt{8}\beta}{\sqrt{\beta}-1} = 8\sqrt{2}$.

Данная теорема имеет лишь теоретический смысл, поскольку оценка μ_k^{loc} крайне затруднительна. Следующая теорема содержит менее точную, но более удобно применимую оценку.

Так как $\mu_k^{loc} \geq \mu$ при всех k, каждое слагаемое в сумме из теоремы 1 не превосходит $\sqrt{\frac{L}{\mu}}$, откуда сразу следует

Теорема 2 *Алгоритм ACGM с оптимальным* $\beta = 4$ *и* $\mu_0 > \max_k \mu^{loc}$ *достигает точки* $\mathbf{x}$*, удовлетворяющей критерию останова (5), за не более чем* $CK\sqrt{\frac{L}{\mu}}$ *вычислений градиента, где* $K = \log_2\frac{||\nabla f(\mathbf{x}^0)||}{\varepsilon}$, $C = \frac{\sqrt{8}\beta}{\sqrt{\beta}-1} = 8\sqrt{2}$.

6.3 К выбору оптимального μ_0. Случай $\mu_0 < \mu^{loc}$

Для упрощения вычислений, пусть $\mu_0 = \frac{\mu^{loc}}{4^k}$. Тогда по формуле (10) на первом шаге ACGM будет выполнено $M = 2\sqrt{2\frac{L\cdot 4^k}{\mu^{loc}}} = 2^k N$ итераций. При этом, согласно (9), норма градиента умножится не более, чем на $\sqrt{\frac{2L}{\mu^{loc}M^2}} = \frac{1}{2^{k+1}}$.

Для достижения такого результата требуется $k+1$ рестартов, то есть $(k+1)N$ итераций при использовании OGM-G.

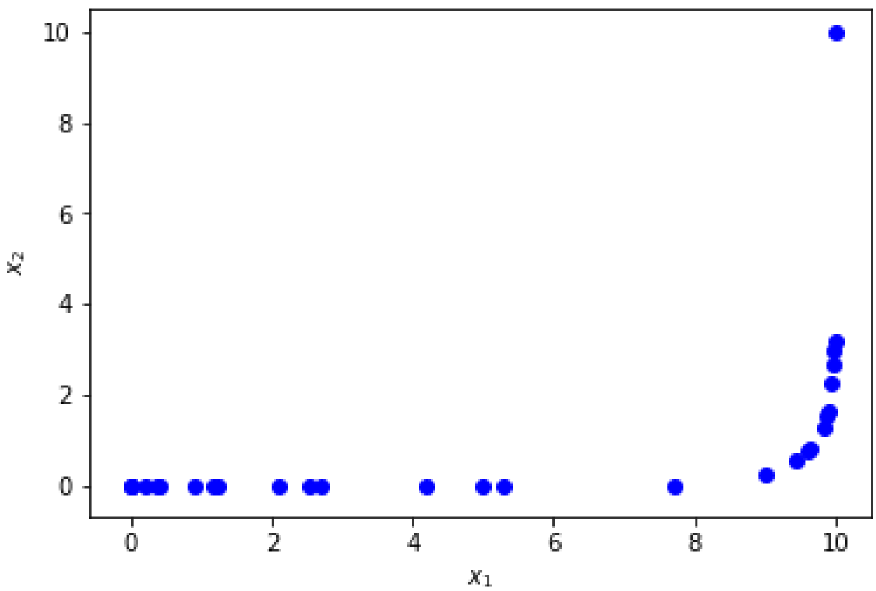
При использовании ACGM i-ый рестарт выполняется с $\mu = \mu_0\beta^i$, т. е. потребует $\frac{N}{2^i}$ итераций. Суммарное количество не превосходит $2N$.

Поскольку $2^k > 2$, применение заниженного значения константы сильной выпуклости приводит к значительному увеличению количества итераций.

Объединяя все сказанное о величине начального предполагаемого значения константы сильной выпуклости, оптимальным будет такой выбор μ_0, что $\mu_0 > \mu_k^{loc}$ при всех k. Таким является, например $\mu_0 = L$.

6.4 Иллюстрации

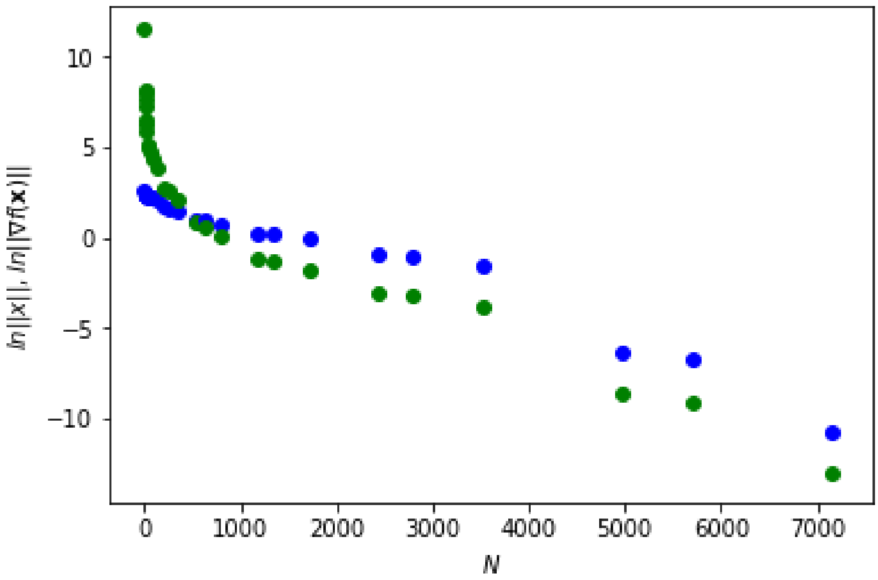
Для иллюстрации работы ACGM используется функция $f(x_1, x_2)$, свойства которой будут описаны в разделе 8 «Эксперименты».



Траектория ACGM(f, (10,10), L, L, 4)

Синим цветом отмечен натуральный логарифм $||\mathbf{x}||$, зеленым — $||\nabla f(\mathbf{x})||$.

Для изображения выбраны логарифмы, потому что норма стремится к нулю, и точки становятся неотделимы от оси координат и друг от друга.



Зависимость нормы переменной и градиента от номера итерации

Графики демонстрируют сходимость метода.

7 Адаптивность по константе Липшица

7.1 Универсальный градиентный спуск

Вход: $f \in \mathcal{F}(\mathcal{Q})$, $\mathbf{x}_0 \in \mathcal{Q}$, L_0, ε.
Пока не выполнено условие остановки (5):
k — номер шага.

1 $L_{k+1} := \frac{L_k}{2}$;

2 $\mathbf{x}_{k+1} = \arg\min_{\mathbf{x}\in\mathcal{Q}} \{f(\mathbf{x}_k) + \langle \nabla f(\mathbf{x}_k), \mathbf{x} - \mathbf{x}_k\rangle + L_{k+1}V(\mathbf{x}, \mathbf{x}_k)\}$;

3 Если выполнено условие

$$f(\mathbf{x}_{k+1}) \leq f(\mathbf{x}_k) + \langle \nabla f(\mathbf{x}_k), \mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k\rangle + L_{k+1}V(\mathbf{x}_{k+1}, \mathbf{x}_k) + \frac{\varepsilon}{2},$$

то перейти к следующему шагу;

4 Иначе $L_{k+1} := 2L_{k+1}$ и вернуться к пункту 2.

В замечании 2.1 пособия [2] показано, что в качестве $V(x, y)$ подходит функция $V(x, y) = \frac{1}{2}||x - y||^2$.

Поскольку рассматривается задача безусловной оптимизации, $\mathcal{Q} = \mathbb{R}^d$. Градиент минимизируемого выражения равен $\nabla f(\mathbf{x}_k) + L_{k+1}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_k)$, поэтому формула шага 2 преобразуется к виду $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \frac{1}{L_{k+1}}\nabla f(\mathbf{x}_k)$.

7.2 ALGM

Метод универсального градиентного спуска решает проблему неизвестности константы Липшица, но обладает недостатками простейшего градиентного метода, так как для функций с большим числом обусловленности матрицы Гессе направление градиента значительно отличается от направления на экстремум.

Для устранения этого недостатка предлагается следующий способ. Значение $\mathbf{x}_{k+1}$, получаемое в шаге 2 универсального градиентного спуска, используется только при оценке L. Для обновления значения переменной применяется построенный в предыдущем разделе алгоритм ACGM с уже доказанной эффективностью.

ALGM

Вход: $f \in \mathcal{F}_L(\mathbb{R}^d)$, $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^d$, L_0, β, M, ε.
Пока не выполнено условие остановки (5):
k — номер шага.

1 $L_{k+1} := \frac{L_k}{2}$;

2 $\mathbf{x}_{k+1}^{try} = \mathbf{x}_k - \frac{1}{L_{k+1}} \nabla f(\mathbf{x}_k)$;

3 Если выполнено условие

$$f(\mathbf{x}_{k+1}^{try}) \leq f(\mathbf{x}_k) + \langle \nabla f(\mathbf{x}_k), \mathbf{x}_{k+1}^{try} - \mathbf{x}_k \rangle + L_{k+1} V(\mathbf{x}_{k+1}^{try}, \mathbf{x}_k) + \frac{\varepsilon}{2},$$

то $\mathbf{x}_{k+1} = ACGM(f, \mathbf{x}_k, 2L_{k+1}, 2L_{k+1}, \beta, \frac{||\nabla f(\mathbf{x}_k)||}{M})$ и перейти к следующему шагу;

4 Иначе $L_{k+1} := 2L_{k+1}$ и вернуться к пункту 2.

Смысл параметра M в том, что он определяет, во сколько раз уменьшается норма градиента при каждом запуске ACGM. При $M < 10$ $ACGM$ не является эффективным из-за малого количества запусков OGM-G и отсутствия подбора μ. При слишком больших M делается много запусков OGM-G с одним значением L.

ACGM запускается с $\mu_0 = L$, поскольку в разделе 6.3 показано, что это значение является оптимальным.

7.3 Оценки

Алгоритм подбора L гарантирует, согласно комментарию к алгоритму универсального градиентного спуска в пособии [2], что $L_{k+1} \geq \dfrac{L^{loc}}{2}$, то есть $L^{loc} \leq 2L_{k+1}$. Поскольку при $L' < L''$ $\mathcal{F}_{L'}(\mathbb{R}^d) \subset \mathcal{F}_{L''}(\mathbb{R}^d)$, ACGM гарантированно сходится при не слишком больших значениях M ($M \sim 10$).

Количество запусков ACGM не превышает $\log_M \frac{||\nabla f(\mathbf{x}_0)||}{\varepsilon}$, поскольку каждый запуск уменьшает норму градиента как минимум в M раз.

При этом количество итераций, согласно теореме 2, составляет при оптимальном $\beta = 4$ не более $CK^{step}\sqrt{\frac{2L}{\mu}} \times \log_M \frac{||\nabla f(\mathbf{x}_0)||}{\varepsilon} = C\sqrt{\frac{2L}{\mu}} \log_2 \frac{||\nabla f(\mathbf{x}^0)||}{\varepsilon}$, где $C = \frac{\sqrt{8}\beta}{\sqrt{\beta}-1} = 8\sqrt{2}$, $K^{step} = \log_2 \frac{||\nabla f(\mathbf{x}^k)||}{||\nabla f(\mathbf{x}^k)||/M} = \log_2 M$.

Кроме вычислений градиента при запусках ACGM, на каждом шаге при подборе L вычисляются значения функции во всех точках $\mathbf{x}_k$ и $\mathbf{x}_k^{try}$. Их количество за один шаг не превосходит $O(|\log_2 \frac{L}{L_k}|) \leq O(|\log_2 \frac{L}{L_0}|)$. Количество шагов, как отмечено выше, оценивается сверху как $\log_M \frac{||\nabla f(\mathbf{x}_0)||}{\varepsilon}$.

Вычисления градиента в точках $\mathbf{x}_k$ во время подбора отдельно не учитываются, поскольку учтены при подсчете итераций ACGM.

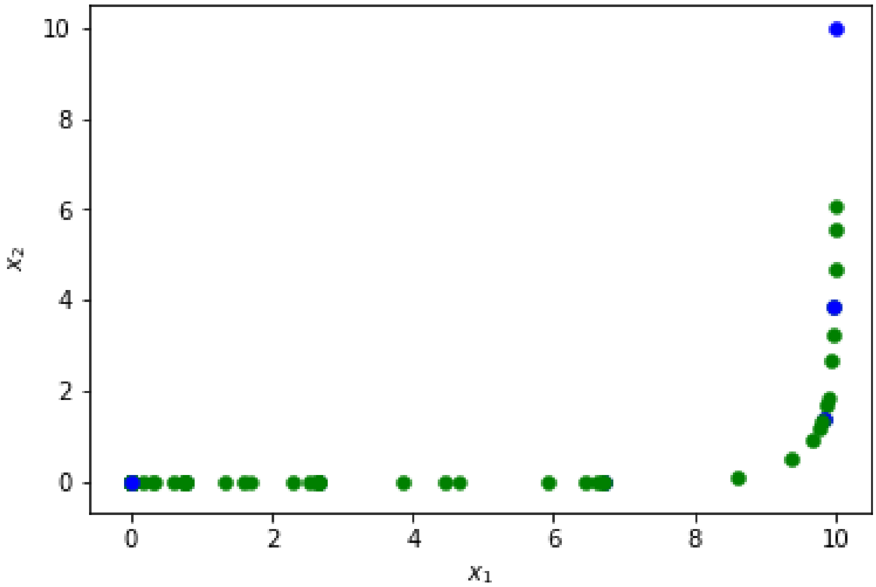
Данные оценки составляют следующую теорему.

Теорема 3 *Алгоритм ALGM с оптимальным $\beta = 4$ и $M \sim 10$ достигает точки $\mathbf{x}$, удовлетворяющей критерию останова (5), за $O(\sqrt{\frac{L}{\mu}} \log_2 \frac{||\nabla f(\mathbf{x}^0)||}{\varepsilon})$ вычислений градиента и $O(\log_M \frac{||\nabla f(\mathbf{x}_0)||}{\varepsilon} |\log_2 \frac{L}{L_0}|)$ вычислений функции.*

7.4 Иллюстрации

Для иллюстрации работы ALGM используется функция $f(x_1, x_2)$, свойства которой будут описаны в разделе 8 «Эксперименты».

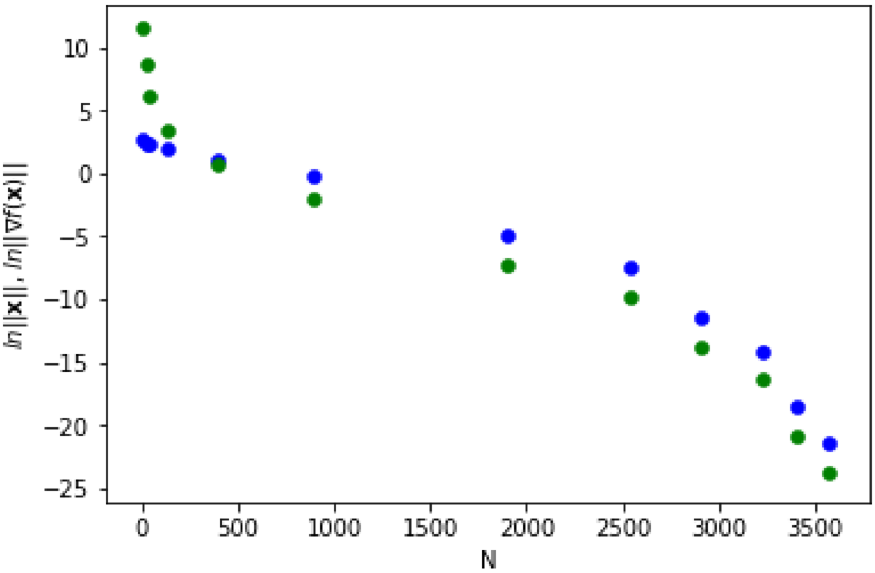
Синие точки — это последовательность $\mathbf{x}_k$, порожденная ALGM. Зеленые точки порождены промежуточными запусками ACGM.



Траектория ALGM(f, (10,10), 1, 4, 10)

Синим цветом отмечен натуральный логарифм $||\mathbf{x}||$, зеленым — $||\nabla f(\mathbf{x})||$.

Для изображения выбраны логарифмы, потому что норма стремится к нулю, и точки становятся неотделимы от оси координат и друг от друга.



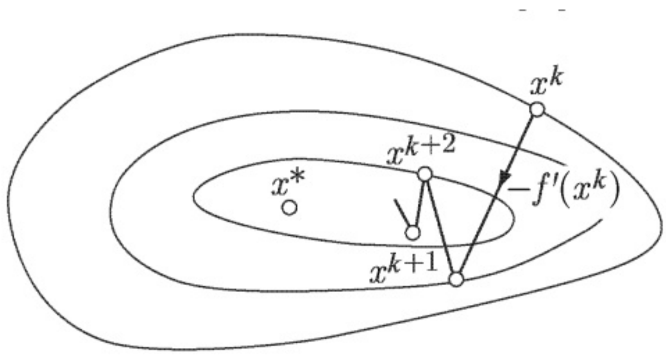
Зависимость нормы переменной и градиента от номера итерации

Графики демонстрируют сходимость метода.

8 Эксперименты

8.1 Выбор функций

Известно, что недостатком градиентных методов является медленная сходимость на так называемых «овражных» функциях, то есть функциях с большим значением $\dfrac{\lambda_{max}}{\lambda_{min}}$ (λ — собственные значения матрицы Гессе).



Траектория градиентного метода при оптимизации «овражной» функции

Использован рисунок из пособия [4].

Поэтому в качестве тестовой функции взята нелинейная функция:

$$f(x_1, x_2) = a(\frac{x_1^2}{2} + \frac{x_1^4}{4}) + b(\frac{x_2^2}{2} + \frac{x_2^4}{4}),$$

где $a = 0.1, b = 100$. Матрица Гессе имеет вид

$$\begin{Vmatrix} a(1+3x_1^2) & 0 \\ 0 & b(1+3x_2^2) \end{Vmatrix}$$

Соответственно, в каждой области $\mu^{loc} = \min\{a(1+3{x_1}^2_{min}), b(1+3{x_2}^2_{min})\}$, $L^{loc} = \max\{a(1+3{x_1}^2_{max}), b(1+3{x_2}^2_{max})\}$, где наименьшие и наибольшие значения координат берутся для данной области.

Минимум данной функции достигается в точке $\mathbf{x}^* = (0, 0)$, в ее окрестности $\frac{L}{\mu} = \frac{b}{a} = 1000$.

8.2 Проверка ACGM

Проверка теоремы 2

Выполнены запуски ACGM для f с начальной точкой $\mathbf{x}_0 = (10, 10)$ ($L = 30100$) и $\beta \in \{2, 3, 4, \ldots, 16\}$, $\mu_0 \in \{0.1, 1, 10, 100, 1000, 10000, L = 30100, 100000\}$,

$\varepsilon \in \{\frac{\nabla f(\mathbf{x}_0)}{10}, \frac{\nabla f(\mathbf{x}_0)}{100}, \dots, \frac{\nabla f(\mathbf{x}_0)}{10^{11}}\}$, зафиксировано количество итераций. Для каждого набора параметров расчитана верхняя оценка количества итераций из теоремы 2. Проверено, что во всех рассмотренных случаях эта оценка не превышается.

В таблице 1 представлены измеренные количества итераций при $\beta = 2$ и est — оценки по теореме 2.

Таблица 1: f, $\beta = 2$

$\varepsilon \backslash \mu_0$	0.1	1	10	10^2	10^4	L	10^5	est	$\frac{max}{est}$
$\frac{\nabla f(\mathbf{x}_0)}{10}$	1098	347	110	35	4	2	2	24889	0.044
$\frac{\nabla f(\mathbf{x}_0)}{10^2}$	1098	347	110	35	4	13	14	49779	0.022
$\frac{\nabla f(\mathbf{x}_0)}{10^3}$	1098	347	110	60	47	78	66	74669	0.015
$\frac{\nabla f(\mathbf{x}_0)}{10^4}$	1098	347	188	357	382	375	348	99559	0.011
$\frac{\nabla f(\mathbf{x}_0)}{10^5}$	1098	593	674	1001	954	1086	1000	124449	0.009
$\frac{\nabla f(\mathbf{x}_0)}{10^6}$	1098	2198	2550	2540	2855	2836	2557	149339	0.019
$\frac{\nabla f(\mathbf{x}_0)}{10^7}$	4297	4365	5548	5224	5891	5822	5271	174229	0.034
$\frac{\nabla f(\mathbf{x}_0)}{10^8}$	6171	7717	8546	8232	8927	8296	8314	199119	0.045
$\frac{\nabla f(\mathbf{x}_0)}{10^9}$	8045	10087	11544	10129	11963	11069	10233	224009	0.053
$\frac{\nabla f(\mathbf{x}_0)}{10^{10}}$	8821	11069	11544	10129	11963	11069	10233	248889	0.048
$\frac{\nabla f(\mathbf{x}_0)}{10^{11}}$	8045	11069	11544	10129	11963	11069	10233	273789	0.044

В таблице 2 представлены измеренные количества итераций при $\beta = 4$ и est — оценки по теореме 2.

Таблица 2: f, $\beta = 4$

$\varepsilon \backslash \mu_0$	0.1	1	10	10^2	10^4	L	10^5	est	$\frac{max}{est}$
$\frac{\nabla f(\mathbf{x}_0)}{10}$	776	246	78	25	3	2	2	20619	0.038
$\frac{\nabla f(\mathbf{x}_0)}{10^2}$	776	246	78	25	3	14	15	41239	0.019
$\frac{\nabla f(\mathbf{x}_0)}{10^3}$	776	246	78	63	43	76	80	61858	0.013
$\frac{\nabla f(\mathbf{x}_0)}{10^4}$	776	246	410	361	469	350	380	82478	0.009
$\frac{\nabla f(\mathbf{x}_0)}{10^5}$	776	246	955	854	1021	1168	878	103097	0.011
$\frac{\nabla f(\mathbf{x}_0)}{10^6}$	1164	1843	2043	2623	2123	2438	2668	123717	0.022
$\frac{\nabla f(\mathbf{x}_0)}{10^7}$	1164	4298	4217	5373	4324	4975	5451	144336	0.038
$\frac{\nabla f(\mathbf{x}_0)}{10^8}$	4074	7244	6080	5373	6210	4975	5451	164956	0.044
$\frac{\nabla f(\mathbf{x}_0)}{10^9}$	4074	10190	7943	7730	8096	7149	7836	185575	0.055
$\frac{\nabla f(\mathbf{x}_0)}{10^{10}}$	4850	10190	7943	7730	8096	7149	7836	206195	0.049
$\frac{\nabla f(\mathbf{x}_0)}{10^{11}}$	4850	10190	7943	7730	8096	7149	7836	226814	0.045

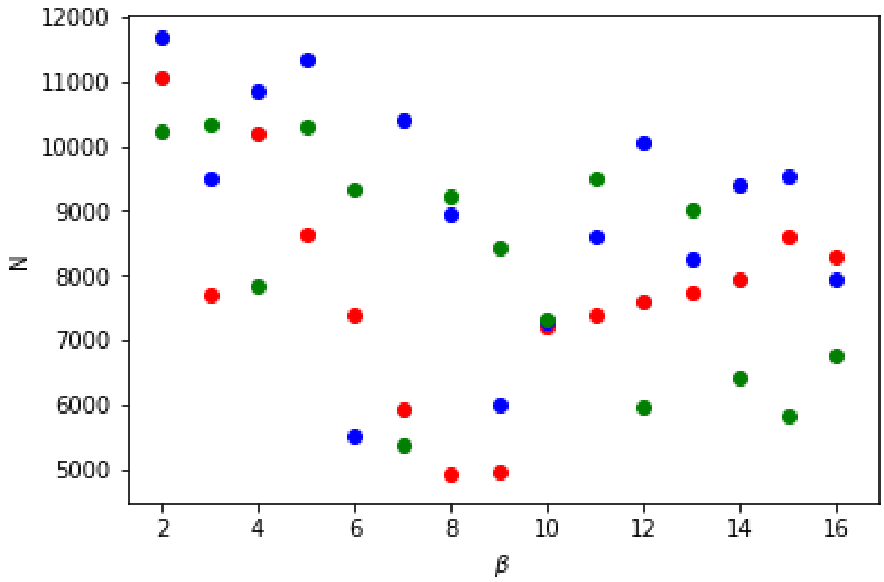
В таблице 3 представлены измеренные количества итераций при $\beta = 8$ и est — оценки по теореме 2.

Таблица 3: f, $\beta = 8$

$\varepsilon \backslash \mu_0$	0.1	1	10	10^2	10^4	L	10^5	est	$\frac{max}{est}$
$\frac{\nabla f(\mathbf{x}_0)}{10}$	549	174	55	18	2	2	2	22554	0.024
$\frac{\nabla f(\mathbf{x}_0)}{10^2}$	549	174	55	18	10	18	17	45108	0.012
$\frac{\nabla f(\mathbf{x}_0)}{10^3}$	549	174	75	93	90	52	84	67663	0.008
$\frac{\nabla f(\mathbf{x}_0)}{10^4}$	549	236	361	300	202	416	320	90217	0.006
$\frac{\nabla f(\mathbf{x}_0)}{10^5}$	549	258	1011	882	669	1174	601	112771	0.010
$\frac{\nabla f(\mathbf{x}_0)}{10^6}$	1486	1650	2848	2525	1985	1868	1777	135326	0.021
$\frac{\nabla f(\mathbf{x}_0)}{10^7}$	3587	3038	2848	2525	3504	3317	3929	157880	0.025
$\frac{\nabla f(\mathbf{x}_0)}{10^8}$	5688	3038	4529	5533	6801	5278	6177	180435	0.038
$\frac{\nabla f(\mathbf{x}_0)}{10^9}$	5688	4917	6210	8541	10413	5278	9220	202989	0.051
$\frac{\nabla f(\mathbf{x}_0)}{10^{10}}$	6237	4917	6210	8541	10413	5278	9220	225543	0.046
$\frac{\nabla f(\mathbf{x}_0)}{10^{11}}$	6237	4917	6210	8541	10413	5278	9220	248098	0.042

Экспериментальные данные показывают, что теорема 2 выполняется, причем условие остановки выполняется после значительно меньшего числа итераций, чем следует из теоретических оценок. Это объясняется тем, что все оценки в доказательстве теоремы сделаны для наихудших случаев и не достигаются.

Выбор оптимального β



Зависимость числа итераций от параметра β

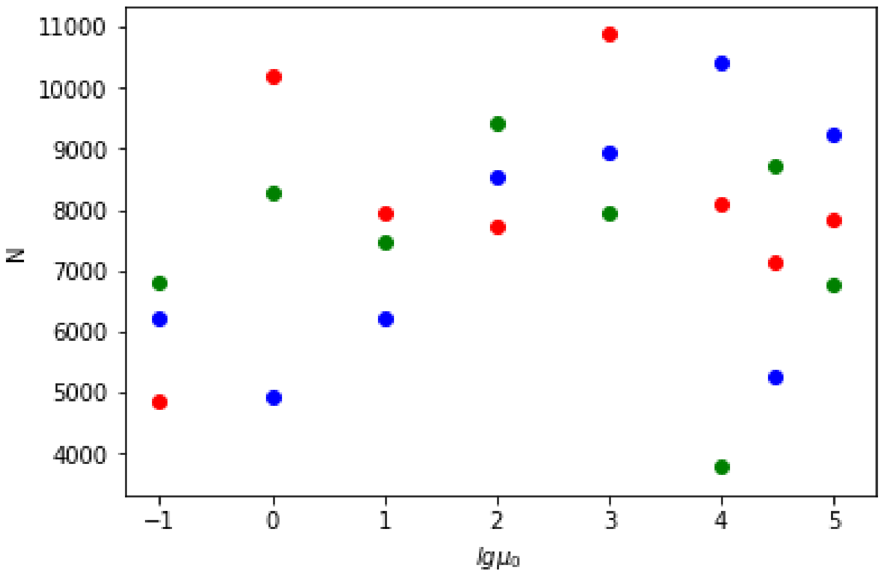
На графике показана зависимость числа итераций при работе ACGM от β при $\varepsilon = \frac{||\nabla f(\mathbf{x}_0)||}{10^{10}}$ для $\mu_0 = 1$ (красные точки), $\mu_0 = 1000$ (синие точки), $\mu_0 = 100000$ (зеленые точки).

Из графика видно, что четко выраженный минимум не наблюдается ни в одном из случаев; полученное в разделе 6.2 значение β ни в одном из случаев не является оптимальным.

Это связано с тем, что минимизация зависящего от β коэффициента выполнялась в предположении о достижении всех верхних, наихудших оценок. Поскольку данное предположение не выполняется, то и количество итераций оказывается минимальным при других значениях β.

Однако именно $\beta = 4$ дает наименьшее гарантированное значение коэффициента в оценке скорости сходимости.

Выбор оптимального μ_0



Зависимость числа итераций от параметра μ_0

На графике показана зависимость числа итераций при работе ACGM от μ_0 при $\varepsilon = \frac{||\nabla f(\mathbf{x}_0)||}{10^{10}}$ для $\beta = 4$ (красные точки), $\beta = 8$ (синие точки), $\beta = 16$ (зеленые точки).

Закономерность в расположении точек не обнаруживается, для каждого из рассмотренных значений β выделяется два минимума: в окрестности L и в окрестности истинного значения μ, что частично подтверждает полученные выводы об оптимальном значении μ_0.

Сравнение ACGM с OGM-G

OGM-G принимает количество итераций на вход, а ACGM работает до достижения условия остановки. Для сравнения эффективности используется модификация OGM-G, которая повторяет выполнение алгоритма с теми же заданными L и μ до выполнения условия остановки.

OGM-Gtest

Вход: $f \in \mathcal{F}_L(\mathbb{R}^d)$, $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^d$, L, μ_0.

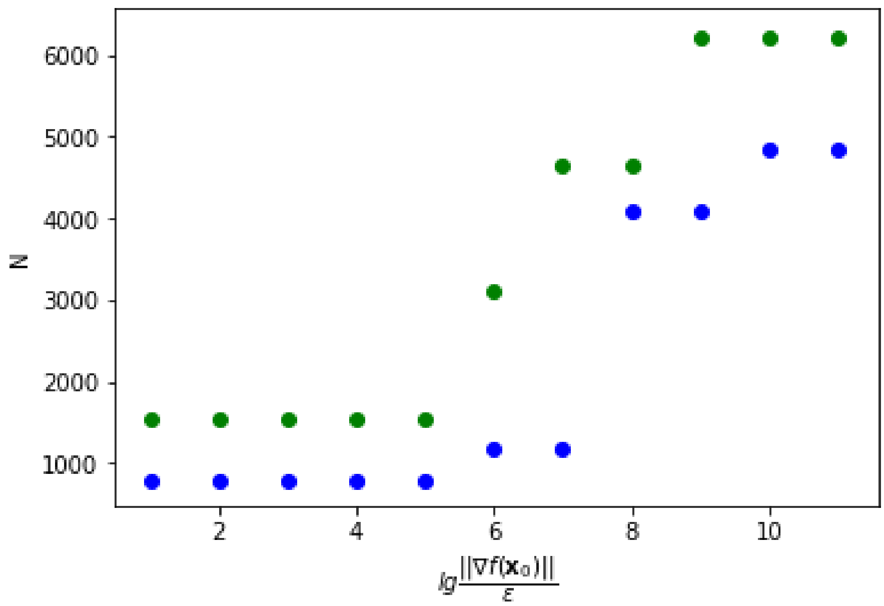
Пока не выполнено условие остановки (5): $\mathbf{x}_k = OGMG(f, \mathbf{x}_{k-1}, L, \mu_0)$.

Результаты ACGM ($\beta = 4$) находятся в таблице 3; таблица 4 содержит результаты OGM-Gtest.

Таблица 4: f, OGM-G

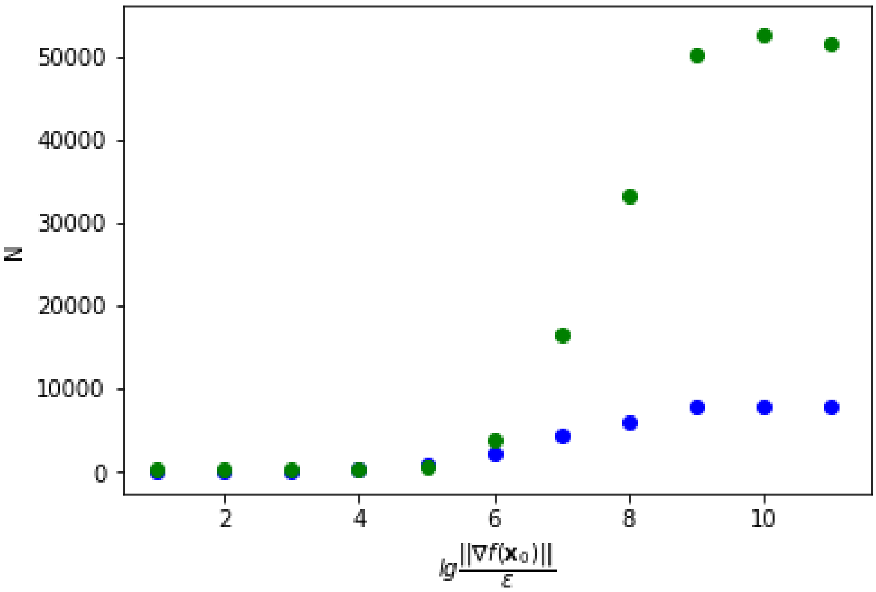
$\varepsilon \backslash \mu_0$	0.1	1	10	10^2	10^4	L	10^5
$\frac{\nabla f(\mathbf{x}_0)}{10}$	1552	491	156	50	5	3	2
$\frac{\nabla f(\mathbf{x}_0)}{10^2}$	1552	491	156	50	5	3	14
$\frac{\nabla f(\mathbf{x}_0)}{10^3}$	1552	491	156	50	55	108	134
$\frac{\nabla f(\mathbf{x}_0)}{10^4}$	1552	491	312	400	2120	2688	3106
$\frac{\nabla f(\mathbf{x}_0)}{10^5}$	1552	491	468	2250	12300	15582	18000
$\frac{\nabla f(\mathbf{x}_0)}{10^6}$	3104	982	3744	11900	65575	83082	95976
$\frac{\nabla f(\mathbf{x}_0)}{10^7}$	4656	982	16380	48700	267600	339040	391660
$\frac{\nabla f(\mathbf{x}_0)}{10^8}$	4656	3437	33228	97150	533500	675910	780810
$\frac{\nabla f(\mathbf{x}_0)}{10^9}$	6208	8347	50076	145850	801080	1014900	1172400
$\frac{\nabla f(\mathbf{x}_0)}{10^{10}}$	6208	9329	52572	153150	841020	1065500	1230900
$\frac{\nabla f(\mathbf{x}_0)}{10^{11}}$	6208	8838	51480	150000	823790	1043700	1205700

Графики показывают количество итераций до остановки в зависимости от требуемой точности при использовании ACGM (синие точки) и OGM-Gtest (зеленые точки).



Зависимость числа итераций от ε, $\mu_0 = 0.1$

В данном случае, когда начальное значение μ_0 совпадает с истинным значением константы сильной выпуклости, ACGM требует несколько меньше итераций, чем OGM-G.



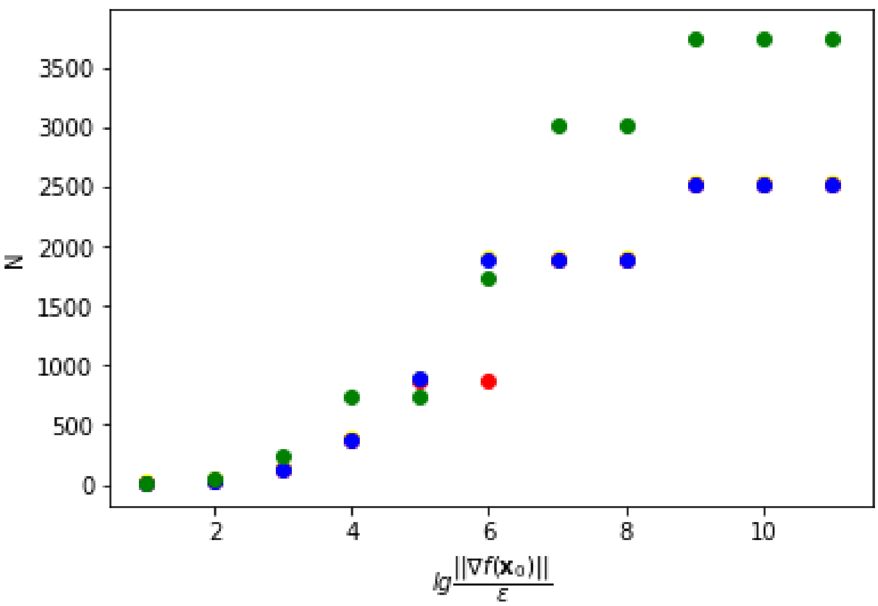
Зависимость числа итераций от ε, $\mu_0 = 10$

Когда начальное значение μ_0 превышает на порядок истинное значение константы сильной выпуклости, ACGM требует значительно меньше итераций, чем OGM-G.

Из таблицы 4 очевидно, что если $\mu_0 >> \mu$, то OGM-G требует на несколько порядков больше итераций, чем ACGM.

8.3 Проверка ALGM

Проверка сходимости при разных L_0

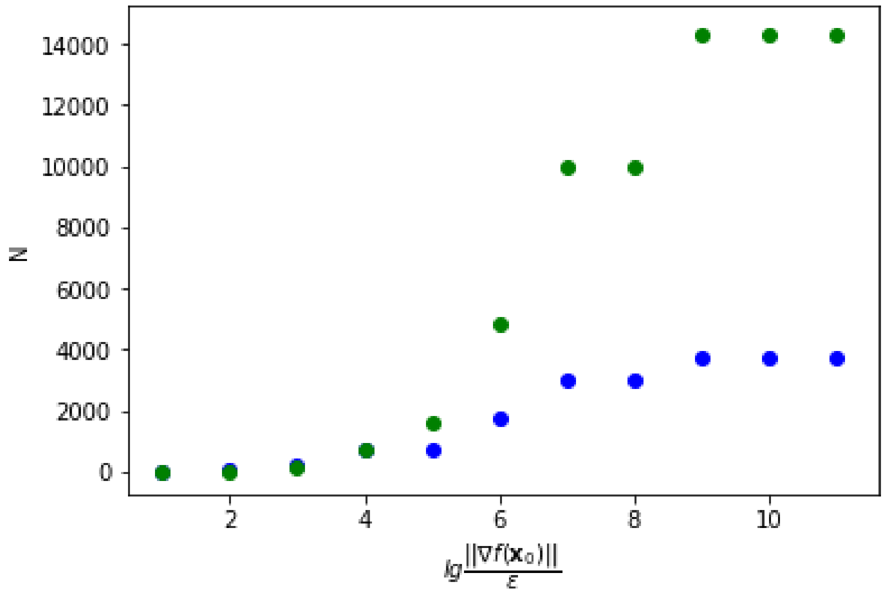


Зависимость числа итераций от ε, L_0

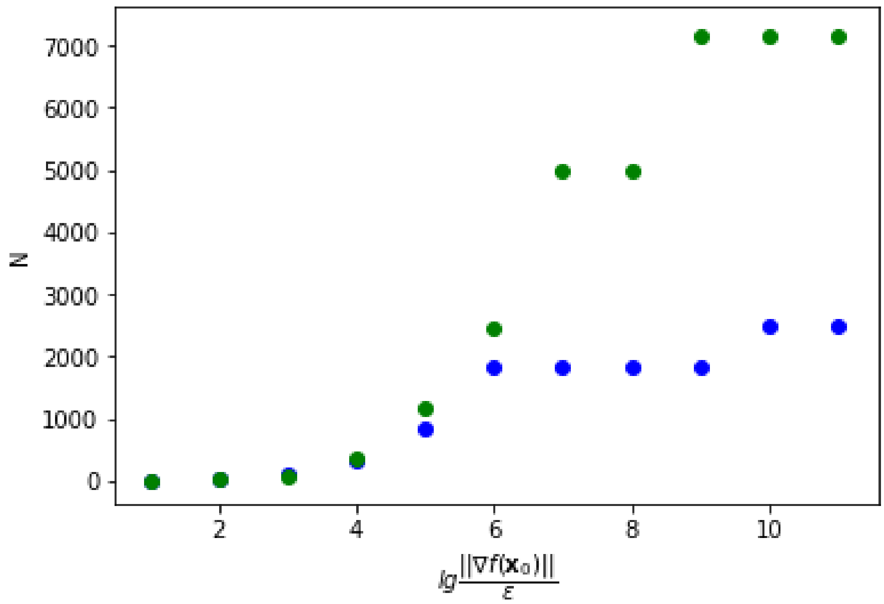
Зеленые точки соответствуют $L_0 = 100000$, синие — $L_0 = 1000$, красные — $L_0 = 100$. При $\varepsilon \neq \frac{||\nabla f(\mathbf{x}_0)}{10^6}$ красные точки совпадают с синими.

График подтверждает линейный характер зависимости числа итераций от логарифма требуемой погрешности.

Сравнение ALGM с ACGM



Зависимость числа итераций от ε, $L_0 = 100000 \approx 3L^{true}$



Зависимость числа итераций от ε, $L_0 = L^{true}$

Графики показывают, что ALGM в данном случае требует примерно в 3 раза меньше итераций, чем ACGM.

9 Заключение

Работа посвящена построению адаптивных по константе сильной выпуклости и константе Липшица для градиента методов оптимизации первого порядка.

Построен алгоритм выпуклой оптимизации первого порядка ACGM, адаптивный по константе сильной выпуклости. Доказана теоретически и проверена экспериментально его эффективность по сравнению с базовым алгоритмом OGM-G (статья [1]), не обладающим свойством адаптивности. Доказаны теоремы 1 и 2, гарантирующие, что сложность построенного алгоритма составляет не более $O\left(\sqrt{\frac{L}{\mu}}\log_2\frac{||\nabla f(\mathbf{x}^0)||}{\varepsilon}\right)$ вычислений градиента функции.

Построен алгоритм ALGM, адаптивный по константе Липшица. Доказана теоремы 3 о том, что его сложность не превышает $O(\sqrt{\frac{L}{\mu}}\log_2\frac{||\nabla f(\mathbf{x}^0)||}{\varepsilon})$ вычислений градиента и $O(\log_M\frac{||\nabla f(\mathbf{x}_0)||}{\varepsilon}|\log_2\frac{L}{L_0}|)$ вычислений функции. Проведена экспериментальная проверка полученных результатов.

10 Ссылки

[1] Optimizing the Efficiency of First-order Methods for Decreasing the Gradient of Smooth Convex Functions, Donghwan Kim, Jeffrey A. Fessler, 2018, 14 с., arXiv:1803.06600v2;

[2] Современные численные методы оптимизации. Метод универсального градиентного спуска. Учебное пособие, Гасников А. В., 2018, 238 с., ISBN 978-5-7417-0667-1;

[3] Об эффективных численных методах решения задач энтропийно-линейного программирования, Гасников А. В., Гасникова Е. В., Нестеров Ю. Е., Чернов А. В., Журнал вычислительной математики и математической физики. 2016. Т. 56. № 4;

[4] Курс методов оптимизации: Учебное пособие, Сухарев А. Г., Тимохов А. В., Федоров В. В., ФИЗМАТЛИТ, 2005, 368 с., ISBN 5-9221-0559-0;

[5] On the Adaptivity of Stochastic Gradient-Based Optimization, Lihua Lei, Michael I. Jordan, 2019, 46 с., arXiv:1904.04480v2;

[6] Restarting accelerated gradient methods with a rough strong convexity estimate, Olivier Fercoq, Zheng Qu, 2016, 23 с., arXiv:1609.07358