Методы оптимизации
Лекция 10: Введение в стохастическую оптимизацию

Александр Катруца

Московский физико-технический институт

7 апреля 2021 г.

На прошлой лекции

- Метод сопряжённых градиентов
- Метод тяжёлого шарика
- Ускоренный градиентный метод Нестерова

Что нам известно?

- Детерминированные методы первого порядка

Что нам известно?

- Детерминированные методы первого порядка
- Нижние оценки для методов первого порядка

Что нам известно?

- Детерминированные методы первого порядка
- Нижние оценки для методов первого порядка
- Методы, которые достигают этих оценок

Что нам известно?

- Детерминированные методы первого порядка
- Нижние оценки для методов первого порядка
- Методы, которые достигают этих оценок

Вопросы

- Как изменятся методы при введении стохастичности в задачу?
- Как оценивать сходимость в таком случае?

Зачем вводить стохастику?

- Для большого числа переменных может быть очень долго вычислять точный градиент

Зачем вводить стохастику?

- Для большого числа переменных может быть очень долго вычислять точный градиент
- Стохастического градиента может быть достаточно для решения задачи

Зачем вводить стохастику?

- Для большого числа переменных может быть очень долго вычислять точный градиент
- Стохастического градиента может быть достаточно для решения задачи
- Иногда параметры задачи измеряются с естественной погрешностью

Как ввести случайность в задачу?

- Известные параметры задачи – случайные величины с известным распределением

$$
\begin{aligned}
&\min x_1 + x_2 \\
\text{s.t. } & w_1 x_1 + x_2 \geq 0 \\
& w_2 x_1 + x_2 \geq 0 \\
& x_{1,2} \geq 0,
\end{aligned}
$$

где $w_1 \sim \mathcal{U}[0, 4]$, $w_2 \sim \mathcal{U}[2, 3]$

Как ввести случайность в задачу?

- Известные параметры задачи – случайные величины с известным распределением

$$\begin{aligned} & \min x_1 + x_2 \\ \text{s.t. } & w_1 x_1 + x_2 \geq 0 \\ & w_2 x_1 + x_2 \geq 0 \\ & x_{1,2} \geq 0, \end{aligned}$$

  где $w_1 \sim \mathcal{U}[0,4]$, $w_2 \sim \mathcal{U}[2,3]$
- Целевая функция – матожидание некоторой другой функции

$$\min f(x) := \mathbb{E}_\omega[F(x,\omega)]$$

Как ввести случайность в задачу?

- Известные параметры задачи – случайные величины с известным распределением

$$\begin{aligned} \min x_1 + x_2 \\ \text{s.t. } w_1 x_1 + x_2 \geq 0 \\ w_2 x_1 + x_2 \geq 0 \\ x_{1,2} \geq 0, \end{aligned}$$

  где $w_1 \sim \mathcal{U}[0,4]$, $w_2 \sim \mathcal{U}[2,3]$
- Целевая функция – матожидание некоторой другой функции

$$\min f(x) := \mathbb{E}_\omega[F(x,\omega)]$$

  - Частный случай

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f_i(x)$$

SAA vs SA

- Стохастическая аппроксимация (SA)

SAA vs SA

- Стохастическая аппроксимация (SA)
  - Сгенерировать ω^k i.i.d.

SAA vs SA

- Стохастическая аппроксимация (SA)
  - Сгенерировать ω^k i.i.d.
  - Вычислить стохастический градиент $G(x, \omega^k)$

SAA vs SA

- Стохастическая аппроксимация (SA)
  - Сгенерировать ω^k i.i.d.
  - Вычислить стохастический градиент $G(x, \omega^k)$
  - Использовать его в стохастическом градиентном спуске

SAA vs SA

- Стохастическая аппроксимация (SA)
  - Сгенерировать ω^k i.i.d.
  - Вычислить стохастический градиент $G(x, \omega^k)$
  - Использовать его в стохастическом градиентном спуске
- Усреднённая по сэмплам аппроксимация (SAA)

SAA vs SA

- Стохастическая аппроксимация (SA)
  - Сгенерировать ω^k i.i.d.
  - Вычислить стохастический градиент $G(x, \omega^k)$
  - Использовать его в стохастическом градиентном спуске
- Усреднённая по сэмплам аппроксимация (SAA)
  - Сгенерировать N сэмплов $\omega_1, \ldots, \omega_N$

SAA vs SA

- Стохастическая аппроксимация (SA)
  - Сгенерировать ω^k i.i.d.
  - Вычислить стохастический градиент $G(x, \omega^k)$
  - Использовать его в стохастическом градиентном спуске
- Усреднённая по сэмплам аппроксимация (SAA)
  - Сгенерировать N сэмплов $\omega_1, \ldots, \omega_N$
  - Вычислить эмпирическую оценку целевой функции $\hat{f}_N = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} F(x, \omega_i)$

SAA vs SA

- Стохастическая аппроксимация (SA)
  - Сгенерировать ω^k i.i.d.
  - Вычислить стохастический градиент $G(x, \omega^k)$
  - Использовать его в стохастическом градиентном спуске
- Усреднённая по сэмплам аппроксимация (SAA)
  - Сгенерировать N сэмплов $\omega_1, \dots, \omega_N$
  - Вычислить эмпирическую оценку целевой функции $\hat{f}_N = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} F(x, \omega_i)$
  - Минимизировать $\hat{f}_N$ вместо исходной функции f

Постановка задачи

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} f_i(x)$$

- $f_i(x)$ могут быть невыпуклыми
- n может быть порядка 10^6 и больше
- N также может быть очень большим

Пример 1

- Стохастическая оценка следа матрицы

$$trace(A) = trace(AI) = trace(A\mathbb{E}_z zz^\top) = \mathbb{E}_z(z^\top Az),$$

  где z – вектор из стандартного нормального распределения или распределения Радемахера
- Матожидание заменим на несмещённую оценку $\hat{f}_N$ как в SAA подходе
- Минимизируем $\hat{f}_N$ для фиксированных z_i из предыдущего пункта

Пример 2

- Задача классификации
- Функция ошибки ℓ аддитивна по объектам обучающей выборки
$$\min_w \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \ell(w|x_i)$$
- Интерпретация через эмпирический риск и приближение истинного распределения данных

Стохастический градиентный спуск (SGD)

$$x_{k+1} = x_k - \alpha_k h_k,$$

где

- $h_k = f'_{i_k}(x_k)$, $i_k \in \{1, \ldots, N\}$ выбирается случайно
- $h_k = \frac{1}{|\mathcal{I}_k|} \sum\limits_{i \in \mathcal{I}_k} f'_i(x_k)$, $\mathcal{I}_k \subset \{1, \ldots, N\}$ – некоторое подмножество индексов, обычно, фиксированной мощности $|\mathcal{I}_k| = m$

Свойства

1. Несмещённая оценка градиента

$$\mathbb{E}[h_k] = f'(x_k)$$

2. Большая дисперсия

Сходимость

Теорема

Пусть f выпуклая функция с Липшицевым градиентом с константой L. Тогда если SGD генерирует h_k такие что $\mathrm{Var}(h_k) \leq \sigma^2$ и $\alpha_k \leq \frac{1}{L}$ тогда

$$\mathbb{E}[f(\bar{x}_k)] - f^* \leq \frac{\|x_0 - x^*\|_2^2}{\alpha_k k} + \frac{\alpha_k \sigma^2}{2}$$

В частности после $k = \frac{(\sigma^2 + L\|x^* - x_0\|_2^2)^2}{\varepsilon^2}$ итераций при условии $\alpha_k = \frac{1}{\sqrt{k}}$ получим решение с точностью 2ε

Общий подход к уменьшению дисперсии

- Пусть X_ω даёт несмещённую оценку для параметра x: $\mathbb{E}_\omega[X_\omega] = x$

Общий подход к уменьшению дисперсии

- Пусть X_ω даёт несмещённую оценку для параметра x: $\mathbb{E}_\omega[X_\omega] = x$
- Пусть $Z_\omega = X_\omega - Y_\omega$ так что $\mathbb{E}_\omega[Y_\omega] \approx 0$

Общий подход к уменьшению дисперсии

- Пусть X_ω даёт несмещённую оценку для параметра x: $\mathbb{E}_\omega[X_\omega] = x$
- Пусть $Z_\omega = X_\omega - Y_\omega$ так что $\mathbb{E}_\omega[Y_\omega] \approx 0$
- Тогда $\mathbb{E}_\omega[X_\omega] = \mathbb{E}_\omega[Z_\omega] = x$

Общий подход к уменьшению дисперсии

- Пусть X_ω даёт несмещённую оценку для параметра x: $\mathbb{E}_\omega[X_\omega] = x$
- Пусть $Z_\omega = X_\omega - Y_\omega$ так что $\mathbb{E}_\omega[Y_\omega] \approx 0$
- Тогда $\mathbb{E}_\omega[X_\omega] = \mathbb{E}_\omega[Z_\omega] = x$
- $\mathrm{Var}(Z_\omega) = \mathrm{Var}(X_\omega) + \mathrm{Var}(Y_\omega) - 2\mathrm{Cov}(X_\omega, Y_\omega) \ll \mathrm{Var}(X_\omega)$ если Y_ω сильно коррелирует с X_ω

Общий подход к уменьшению дисперсии

- Пусть X_ω даёт несмещённую оценку для параметра x: $\mathbb{E}_\omega[X_\omega] = x$
- Пусть $Z_\omega = X_\omega - Y_\omega$ так что $\mathbb{E}_\omega[Y_\omega] \approx 0$
- Тогда $\mathbb{E}_\omega[X_\omega] = \mathbb{E}_\omega[Z_\omega] = x$
- $\mathrm{Var}(Z_\omega) = \mathrm{Var}(X_\omega) + \mathrm{Var}(Y_\omega) - 2\mathrm{Cov}(X_\omega, Y_\omega) \ll \mathrm{Var}(X_\omega)$ если Y_ω сильно коррелирует с X_ω

Рецепт по уменьшению дисперсии

Найти такую оценку Y, что

1. Матожидание близко к 0
2. Сильно коррелирует с данной оценкой X

Stochastic average gradient (Schmidt, Le Roux, Bach 2013)

- Инициализация x_0 и $g_i^0 = x_0, i = \{1, \dots, N\}$
- На k-ой итерации выбираем i_k и обновляем $g_{i_k}^k = f'_{i_k}(x_k)$
- $x_{k+1} = x_k - \alpha_k \frac{1}{N} \sum\limits_{i=1}^N g_i^k$
- Более наглядная запись

$$x_{k+1} = x_k - \alpha_k \left(\frac{1}{N} g_{i_k}^{(k+1)} - \frac{1}{N} g_{i_k}^k + \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N g_i^k \right)$$

Уменьшение дисперсии

- $X = g_{i_k}^{(k+1)}$ и $\mathbb{E}_\omega[X] = f'(x_k)$
- $Y = g_{i_k}^k - \sum\limits_{i=1}^N g_i^k$ и $\mathbb{E}_\omega[Y] \neq 0$
- $\|X - Y\|_2 = \|(g_{i_k}^{(k+1)} - g_{i_k}^k) + \sum\limits_{i=1}^N g_i^k\|_2 \to 0, \; k \to \infty$
- Дисперсия итоговой оценки стремится к 0

Сходимость для L-выпуклой функции

Теорема

Пусть f_i дифференцируемы с Липшицевым градиентом, $\bar{x}^{(k)} = \frac{1}{k}\sum_{i=0}^{k-1} x_i$, $\alpha_k = \frac{1}{16L}$ и инициализация

$$g_i^0 = f_i'(x_0) - f'(x_0),\ i = 1, \ldots, N$$

даёт

$$\mathbb{E}[f(\bar{x}^{(k)})] - f(x^*) \leq \frac{48n}{k}(f(x_0) - f^*) + \frac{128L}{k}\|x_0 - x^*\|_2^2$$

Сравнение

- SAG
$$\frac{48n}{k}(f(x_0) - f^*) + \frac{128L}{k}\|x_0 - x^*\|_2^2$$
Зависимость от n в первом слагаемом!
- GD
$$\frac{L\|x_0 - x^*\|_2^2}{k}$$
- SGD
$$\frac{\|x_0 - x^*\|_2^2 + \sigma^2}{2\sqrt{k}}$$

Сходимость для L-выпуклой и μ-сильно выпуклой функции

Теорема

При тех же предположениях, что и в теореме для L-выпуклой функции выполнено следующее

$$\mathbb{E}[f(\bar{x}^{(k)})] - f(x^*) \leq \left(1 - \min\left\{\frac{\mu}{16L}, \frac{1}{8n}\right\}\right)^k \left(\frac{3}{2}(f(x_0) - f^*) + \frac{4L}{n}\|x^* - x_0\|_2^2\right)$$

- Адаптируется к сильной выпуклости
- Аналогичен GD
- SGD даёт только $\mathcal{O}(1/k)$

Комментарии

- Для SAG необходима аккуратная настройка
- Начальное приближение лучше получать после одной эпохи SGD + сохранение g_i^0
- Выбор α_k

SAGA (Defazio, Bach, Lacoste-Julien 2014)

Аналогично SAG, но

$$x_{k+1} = x_k - \alpha_k \left(g_{i_k}^{(k+1)} - g_{i_k}^k + \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N g_i^k \right)$$

- Несмещённая оценка: $\mathbb{E}[Y] = 0$
- Дисперсия выше, чем у SAG
- Аналогичный анализ уменьшения дисперсии
- Обобщается на композитные задачи
- Оценки сходимости для двух классов выпуклых функций аналогичны SAG
- Детали реализации аналогичны SAG

SVRG (Johnson, Zhang 2013)

- Инициализация $\bar{x}_0$
- Цикл $k = 1, 2, \dots$
  - $\bar{x} = \bar{x}_0$
  - $\bar{\mu} = f'(\bar{x})$
  - $x_0 = \bar{x}_0$
  - Цикл $m = 1, \dots, l$
    - Случайно выбрать $i_m \in \{1, \dots, N\}$
    - $$x_{m+1} = x_m - \alpha(f'_{i_m}(x_m) - f'_{i_m}(\bar{x}) + \bar{\mu})$$
  - $\bar{x}_0 = x_l$

Особенности

- Аналог SAGA
- Гораздо более простое доказательство
- Зависит от размера эпох

Недостатки методов уменьшения дисперсии

- Требуют вычисления точного градиента
- Зависят от дополнительных параметров
- Нет универсального способа запуска

Безградиентные методы

Зачем нужны?

- Целевая переменная — дискретная
- Градиент вычислить сложно и долго

Безградиентные методы

Зачем нужны?

- Целевая переменная — дискретная
- Градиент вычислить сложно и долго

Примеры

- Все задачи про принятие решений и выбор элемента из конечного множества
- Подбор гиперпараметров в моделях машинного обучения
- Параметры скаляризации для задач многокритериальной оптимизации

Имитация отжига

- Аналогия процедуры в металлургии, при которой происходит кристаллизация вещества при постепенном понижении температуры
- Основные шаги алгоритма
  - Инициализация начальной точки и параметров
  - На каждой итерации происходит обновление параметров с некоторой вероятностью, которая зависит от температуры

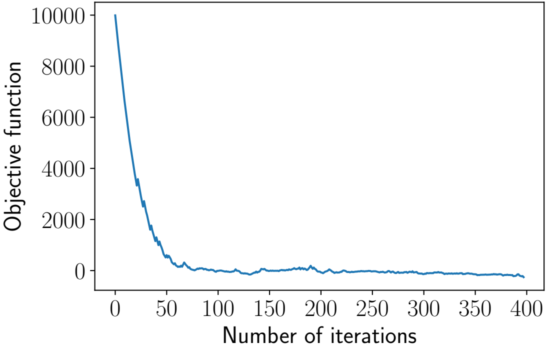
$$\mathbb{P}(\mathbf{x}_k \to \mathbf{x}^*) = \begin{cases} 1 & f(\mathbf{x}^*) < f(\mathbf{x}_k) \\ \exp\left(-\frac{f(\mathbf{x}^*) - f(\mathbf{x}_k)}{T/k}\right) & f(\mathbf{x}^*) > f(\mathbf{x}_k) \end{cases}$$

  - Подбор знаменателя — эвристика

Пример задачи

Задача о разбиении вершин графа с матрицей $\mathbf{W}$

$$\min \mathbf{x}^\top \mathbf{W} \mathbf{x}$$
$$\text{s.t. } x_i \in \{-1, 1\}$$



$$\alpha_k = 1/k$$

Резюме

- Различные способы появления случайности
- SAA vs SA
- Наличие шума приводит к замедлению SGD
- Различные способы усреднения градиентов приводят к ускорению
- Завышенные требования для реальных задач
- Безградиентные методы: имитация отжига