Métodos de primer orden

Axel Sirota

Facultad de Ciencias Exactas y Naturales

Departamento de Matemática

Hoja de ruta

- Introducción
- Convergencia de algoritmos de tipo batch
 - Convergencia Puntu
 - Convergencia c.t.p.
 - Complejidad exponencial
- 3 Algoritmos estocásticos
 - Convergencia en L1
 - Convergencia en c.t.p
- 4 Conclusiones y continuación
- 5 Referencias

Consideremos una muestra aleatoria $\{x_i, y_i\}_{i \leq N} \subset \mathbb{R}^{d_x} \times \mathbb{R}^{d_y}$ tomada bajo una distribución $\mathbb{P}(x, y)$.

El objetivo del *Machine Learning* es encontrar $h^* \in \mathcal{H} = \left\{ h : \mathbb{R}^{d_x} \to \mathbb{R}^{d_y} \right\}$ tal que $R(h) = \mathbb{E}\left[1\left[h(x) \neq y\right]\right]$ sea mínima.

Dicho contexto es variacional y estocástico

La práctica usual consiste en tomar una dada $\widetilde{h}: \mathbb{R}^{d_X} \times \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^{d_y}$ que surge del conocimiento a priori del problema y tomar:

$$\mathcal{H}_{\widetilde{h}} := \{\widetilde{h}(\cdot; w) : w \in \mathbb{R}^d\}$$

Consideremos una muestra aleatoria $\{x_i, y_i\}_{i \leq N} \subset \mathbb{R}^{d_x} \times \mathbb{R}^{d_y}$ tomada bajo una distribución $\mathbb{P}(x, y)$.

El objetivo del *Machine Learning* es encontrar $h^* \in \mathcal{H} = \left\{ h : \mathbb{R}^{d_x} \to \mathbb{R}^{d_y} \right\}$ tal que $R(h) = \mathbb{E}\left[1\left[h(x) \neq y\right]\right]$ sea mínima.

Dicho contexto es variacional y estocástico.

La práctica usual consiste en tomar una dada $\tilde{h}: \mathbb{R}^{d_X} \times \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^{d_y}$ que surge del conocimiento a priori del problema y tomar:

$$\mathcal{H}_{\widetilde{h}} := \{\widetilde{h}(\cdot; w) : w \in \mathbb{R}^d\}$$

Consideremos una muestra aleatoria $\{x_i, y_i\}_{i \leq N} \subset \mathbb{R}^{d_x} \times \mathbb{R}^{d_y}$ tomada bajo una distribución $\mathbb{P}(x, y)$.

El objetivo del *Machine Learning* es encontrar $h^* \in \mathcal{H} = \left\{ h : \mathbb{R}^{d_x} \to \mathbb{R}^{d_y} \right\}$ tal que $R(h) = \mathbb{E}\left[1\left[h(x) \neq y\right]\right]$ sea mínima.

Dicho contexto es variacional y estocástico.

La práctica usual consiste en tomar una dada $\widetilde{h}: \mathbb{R}^{d_x} \times \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^{d_y}$ que surge del conocimiento a priori del problema y tomar:

$$\mathcal{H}_{\widetilde{h}} := \{\widetilde{h}(\cdot; w) : w \in \mathbb{R}^d\}$$

Dada $\ell: \mathbb{R}^{d_y} \times \mathbb{R}^{d_y} \to \mathbb{R}$ una métrica en \mathbb{R}^{d_y} , el objetivo se reduce a minimizar R(w) donde:

$$R(w) = \int_{\mathbb{R}^{d_x} \times \mathbb{R}^{d_y}} \ell(h(x; w), y) d\mathbb{P}(x, y) = \mathbb{E}\left[\ell(h(x; w), y)\right]$$

Al no conocer \mathbb{P} se optimiza $R_n(w)$

$$R_n(w) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n I(h(x; w), y)$$

Que resulta un estimador insesgado de R para cada $w \in \mathbb{R}^d$ por la desigualdad Hoeffding

No obstante, este subconjunto \mathcal{H} parametrizado además debe minimizar $L(h^*, w) = |R(h^*) - R_n(h_w)|$ donde h^* es la función óptima objetivo y h_w es la minimizante de R_n sobre el subconjunto \mathcal{H} .

Dada $\ell: \mathbb{R}^{d_y} \times \mathbb{R}^{d_y} \to \mathbb{R}$ una métrica en \mathbb{R}^{d_y} , el objetivo se reduce a minimizar R(w) donde:

$$R(w) = \int_{\mathbb{R}^{d_x} \times \mathbb{R}^{d_y}} \ell(h(x; w), y) d\mathbb{P}(x, y) = \mathbb{E}\left[\ell(h(x; w), y)\right]$$

Al no conocer \mathbb{P} se optimiza $R_n(w)$:

$$R_n(w) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n I(h(x; w), y)$$

Que resulta un estimador insesgado de R para cada $w \in \mathbb{R}^d$ por la desigualdad Hoeffding

No obstante, este subconjunto \mathcal{H} parametrizado además debe minimizar $L(h^*, w) = |R(h^*) - R_n(h_w)|$ donde h^* es la función óptima objetivo y h_w es la minimizante de R_n sobre el subconjunto \mathcal{H} .

Dada $\ell: \mathbb{R}^{d_y} \times \mathbb{R}^{d_y} \to \mathbb{R}$ una métrica en \mathbb{R}^{d_y} , el objetivo se reduce a minimizar R(w) donde:

$$R(w) = \int_{\mathbb{R}^{d_x} \times \mathbb{R}^{d_y}} \ell(h(x; w), y) d\mathbb{P}(x, y) = \mathbb{E}\left[\ell(h(x; w), y)\right]$$

Al no conocer \mathbb{P} se optimiza $R_n(w)$:

$$R_n(w) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n I(h(x; w), y)$$

Que resulta un estimador insesgado de R para cada $w \in \mathbb{R}^d$ por la desigualdad Hoeffding

No obstante, este subconjunto \mathcal{H} parametrizado además debe minimizar $L(h^*, w) = |R(h^*) - R_n(h_w)|$ donde h^* es la función óptima objetivo y h_w es la minimizante de R_n sobre el subconjunto \mathcal{H} .

En conclusión, la obtención de dicha h óptima se separa en dos problemas no disjuntos:

- ① Encontrar $\mathcal H$ parametrizada por $w \in \mathbb R^d$ tal que $L(h^*, w^*)$ sea mínima, donde $w^* = \arg\min_{w \in \mathbb R^d} R_n(w)$.
- ② Dado ${\mathcal H}$ parametrizado, hallar $w^* = arg \min_{w \in {\mathbb R}^d} R_{n}(w).$

El problema 1 suele tener diferentes enfoques pero ninguno estrictamente teórico, sino que mas bien son basados en el conocimiento a priori del problema

Nos vamos a enfocar en el problema 2 viendo diferentes algoritmos existentes para resolverlo y sus propiedades de convergencia

En conclusión, la obtención de dicha h óptima se separa en dos problemas no disjuntos:

- **1** Encontrar \mathcal{H} parametrizada por $w \in \mathbb{R}^d$ tal que $L(h^*, w^*)$ sea mínima, donde $w^* = \arg\min_{w \in \mathbb{R}^d} R_n(w)$.
- ② Dado ${\mathcal H}$ parametrizado, hallar $w^* = arg \min_{w \in {\mathbb R}^d} R_n(w).$

El problema 1 suele tener diferentes enfoques pero ninguno estrictamente teórico, sino que mas bien son basados en el conocimiento a priori del problema

Nos vamos a enfocar en el problema 2 viendo diferentes algoritmos existentes para resolverlo y sus propiedades de convergencia

Algoritmos de primer orden

Comunmente para encontrar $\underset{w \in \mathbb{R}^d}{arg} \min_{w \in \mathbb{R}^d} F(w)$ se utilizan algoritmos iterativos de primer orden; es decir, algoritmos que se pueden representar por $g : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^d$ tal que $w_n = \underbrace{g \circ \cdots \circ g}_{}(w_0)$ donde

 $g(w) = N(w, F(w), \nabla F(w))$ para alguna $N \in C^{\infty}(\mathbb{R}^{d_y})$. Se suelen dividir en dos grandes grupos:

De tipo batch, donde para cada iteración se utilizan todo el conjunto de datos $\{x_i, y_i\}$. Un ejemplo de esta categoría es el descenso de gradiente (GD) dado por $w_n = g(w_{n-1}) = w_{n-1} - \alpha_n \sum_{i=1}^N \nabla F(x_i, y_i)$.

De tipo estocástico, donde se elije en cada iteración al azar un subconjunto $S \subset \{x_i, y_i\}$ para calcular g. Un ejemplo de esta categoría es el descenso estocástico de gradiente (SG) dado por $w_n = g(w_{n-1}) = w_{n-1} - \alpha_n \nabla F(x_i, y_i)$ para un i elegido al azar.

Algoritmos de primer orden

Comunmente para encontrar $\underset{w \in \mathbb{R}^d}{arg} \min_{w \in \mathbb{R}^d} F(w)$ se utilizan algoritmos iterativos de primer orden; es decir, algoritmos que se pueden representar por $g : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^d$ tal que $w_n = \underbrace{g \circ \cdots \circ g}_{}(w_0)$ donde

 $g(w) = N(w, F(w), \nabla F(w))$ para alguna $N \in C^{\infty}(\mathbb{R}^{d_y})$. Se suelen dividir en dos grandes grupos:

De tipo *batch*, donde para cada iteración se utilizan todo el conjunto de datos $\{x_i, y_i\}$. Un ejemplo de esta categoría es el *descenso de gradiente* (GD) dado por $w_n = g(w_{n-1}) = w_{n-1} - \alpha_n \sum_{i=1}^N \nabla F(x_i, y_i)$.

De tipo estocástico, donde se elije en cada iteración al azar un subconjunto $S \subset \{x_i, y_i\}$ para calcular g. Un ejemplo de esta categoría es el descenso estocástico de gradiente (SG) dado por $w_n = g(w_{n-1}) = w_{n-1} - \alpha_n \nabla F(x_i, y_i)$ para un i elegido al azar.

Algoritmos de primer orden

Comunmente para encontrar $\underset{w \in \mathbb{R}^d}{arg} \min_{w \in \mathbb{R}^d} F(w)$ se utilizan algoritmos iterativos de primer orden; es decir, algoritmos que se pueden representar por $g: \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^d$ tal que $w_n = \underbrace{g \circ \cdots \circ g}_{}(w_0)$ donde

 $g(w) = N(w, F(w), \nabla F(w))$ para alguna $N \in C^{\infty}(\mathbb{R}^{d_y})$. Se suelen dividir en dos grandes grupos:

De tipo *batch*, donde para cada iteración se utilizan todo el conjunto de datos $\{x_i, y_i\}$. Un ejemplo de esta categoría es el *descenso de gradiente* (GD) dado por $w_n = g(w_{n-1}) = w_{n-1} - \alpha_n \sum_{i=1}^N \nabla F(x_i, y_i)$.

De tipo *estocástico*, donde se elije en cada iteración al azar un subconjunto $S \subset \{x_i, y_i\}$ para calcular g. Un ejemplo de esta categoría es el *descenso estocástico de gradiente* (SG) dado por $w_n = g(w_{n-1}) = w_{n-1} - \alpha_n \nabla F(x_i, y_i)$ para un i elegido al azar.

Hoja de ruta

- Introducción
- Convergencia de algoritmos de tipo batch
 - Convergencia Puntual
 - Convergencia c.t.p.
 - Complejidad exponencial
- 3 Algoritmos estocásticos
 - Convergencia en L1
 - Convergencia en c.t.p.
- 4 Conclusiones y continuación
- 5 Referencias

Definiciones

Definición (Débilmente convexo)

Decimos que $F : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$, tal que $F \in C^1$ es débilmente convexo si cumple las siguientes dos propiedades:

- Existe un único w^* tal que $F_{inf} := F(w^*) \le F(w)$ para todo $w \in \mathbb{R}^n$.
- Para todo $\epsilon > 0$ vale que $\inf_{\|w-w^*\|^2 > \epsilon} (w-w^*) \nabla F(w) > 0$

Definición (Condición de Robbins - Monro)

Si consideramos un algortimo de primer orden, decimos que los incrementos $\{\alpha_k\} \subset \mathbb{R}_+$ (de existir) cumplen la condición de *Robbins - Monro* si $\{\alpha_k\} \in \ell^2 \setminus \ell^1$:

Más definiciones

Definición (Condición de Polyak- Lojasiewicz)

Decimos que una función $F: \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ tal que $F \in C^1$ es PL-convexa, o cumple la condición de Polyak- Lojasiewicz si existe $\mu > 0$ tal que para todo $x \in \mathbb{R}^d$ vale:

$$\frac{1}{2} \|\nabla F(x)\|_{2}^{2} \ge \mu \left(F(x) - F_{inf}\right)$$

Resultados de convergencia puntual para GD

Teorema

Sea $F: \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ tal que $F \in C^1$ la función objetivo, asumamos que F es débilmente convexo, w^* su mínimo y que existen $A, B \geq 0$ tal que para todo $w \in \mathbb{R}^d$ vale que:

$$\|\nabla F(w)\|^2 \le A + B\|w - w^*\|^2$$

Luego si consideramos el algoritmo de descenso de gradiente por batch tal que los incrementos $\{\alpha_k\}$ cumplen la condición Robbins - Monro entonces:

$$W_k \xrightarrow[k\to\infty]{} W^*$$

Idea de la demostración

Sea $h_k = ||w_k - w^*||^2$, entonces definiendo:

$$\mu_k = \prod_{j=1}^{k-1} \frac{1}{1 + \alpha_j^2 B}$$

Vale que $\alpha_k (w_k - w^*) \nabla F(w_k) \le \mu_{k+1} h_{k+1} - \mu_k h_k \le \alpha_k^2 A \mu_k \le \alpha_k^2 A$.

Luego vemos que $\{h_k\}$ converge y ademas $\{\alpha_k (w_k - w^*) \nabla F(w_k)\}$ es sumable.

Finalmente, como los incrementos cumplen la condicion de Robbins Monro uno obtiene que $w_k \xrightarrow{k} w^*$.

Idea de la demostración

Sea $h_k = ||w_k - w^*||^2$, entonces definiendo:

$$\mu_k = \prod_{j=1}^{k-1} \frac{1}{1 + \alpha_j^2 B}$$

Vale que $\alpha_k (w_k - w^*) \nabla F(w_k) \leq \mu_{k+1} h_{k+1} - \mu_k h_k \leq \alpha_k^2 A \mu_k \leq \alpha_k^2 A$.

Luego vemos que $\{h_k\}$ converge y ademas $\{\alpha_k (w_k - w^*) \nabla F(w_k)\}$ es sumable.

Finalmente, como los incrementos cumplen la condicion de Robbins Monro uno obtiene que $w_k \xrightarrow[k \to \infty]{} w^*$.

Resultados de convergencia puntual para GD

Teorema

Sea $F: \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ la función objetivo tal que $F \in C^1$, F es L-Lipschitz y PL-convexa; entonces el algortimo descenso de gradiente por batch con incremento fijo $\alpha_k = \frac{1}{I}$ cumple:

$$F(w_k) - F_{inf} \leq \left(1 - \frac{\mu}{I}\right)^k \left(F(w_1) - F_{inf}\right)^k$$

Idea de la demostración

Por las implicancias de ser L-Lipschitz y PL-convexa tenemos:

$$|F(w_{k+1}) - F(w_k)| \le -\frac{1}{2L} \|\nabla F(w_k)\|_2^2 \le -\frac{\mu}{L} (F(w_k) - F_{inf})$$

Luego inductivamente:

$$F(w_{k+1}) - F_{inf} \leq \left(1 - \frac{\mu}{L}\right)^k \left(F(w_1) - F_{inf}\right)$$

Bajo qué casos el algoritmo GD converge (en alguna forma) con objetivos no convexos?

$$\mathcal{A}_g^* := \left\{ x : g(x) = x \quad \max_i |\lambda_i(Dg(x))| > 1 \right\}$$

Bajo qué casos el algoritmo GD converge (en alguna forma) con objetivos no convexos?

Para responder esto, sea $g:M\to M$ la fórmula del algoritmo de primer orden en $M\subset\mathbb{R}^N$ una subvariedad sin borde de dimensión d.

Definición

Sea $f: M \to \mathbb{R}$ tal que $f \in C^2$ y $x^* \in \mathbb{R}^d$, luego decimos que x^* es un punto silla estricto de f si es un punto crítico y $\lambda_{min}\left(\nabla^2 f(x^*)\right) < 0$ Notaremos M^* al conjunto de puntos silla estrictos de f.

Definición

Sea:

$$\mathcal{A}_g^* := \left\{ x : g(x) = x \quad \max_i |\lambda_i(Dg(x))| > 1 \right\}$$

A este conjunto lo llamaremos el conjunto de puntos fijos inestables

Bajo qué casos el algoritmo GD converge (en alguna forma) con objetivos no convexos?

Para responder esto, sea $g: M \to M$ la fórmula del algoritmo de primer orden en $M \subset \mathbb{R}^N$ una subvariedad sin borde de dimensión d.

Definición

Sea $f: M \to \mathbb{R}$ tal que $f \in C^2$ y $x^* \in \mathbb{R}^d$, luego decimos que x^* es un punto silla estricto de f si es un punto crítico y $\lambda_{min}(\nabla^2 f(x^*)) < 0$ Notaremos M^* al conjunto de puntos silla estrictos de f.

Definición

Sea:

$$\mathcal{A}_{g}^{*} := \left\{x : g(x) = x \quad \max_{i} \left|\lambda_{i}\left(Dg(x)\right)\right| > 1\right\}$$

A este conjunto lo llamaremos el conjunto de puntos fijos inestables

Teorema

Sea $g \in C^1(M)$ tal que $\det(Dg(x)) \neq 0$ para todo $x \in M$, luego el conjunto de puntos iniciales que convergen por g a un punto fijo inestable tiene medida cero:

$$\mu\left(\left\{x_0: \lim_k g^k(x_0) \in \mathcal{A}_g^*\right\}\right) = 0$$

Corolario

Bajo las mismas hipótesis si agregamos que $M^*\subseteq \mathcal{A}_g^*$ entonces

$$\mu\left(\left\{x_0:\ \lim_k g^k(x_0)\in M^*\right\}\right)=0$$

Teorema

Sea $g \in C^1(M)$ tal que $\det(Dg(x)) \neq 0$ para todo $x \in M$, luego el conjunto de puntos iniciales que convergen por g a un punto fijo inestable tiene medida cero:

$$\mu\left(\left\{x_0: \lim_k g^k(x_0) \in \mathcal{A}_g^*\right\}\right) = 0$$

Corolario

Bajo las mismas hipótesis si agregamos que $M^* \subseteq \mathcal{A}_g^*$ entonces

$$\mu\left(\left\{x_0: \lim_k g^k(x_0) \in M^*\right\}\right) = 0$$

Algoritmos de tipo batch estándar

Ademas del algoritmo GD, en la optimización de tipo batch existen dos algoritmos muy usuales:

El algoritmo de punto próximo esta dado por la iteración:

$$x_{k+1} = g(x_k) \stackrel{\triangle}{=} \arg\min_{z \in M} f(z) + \frac{1}{2\alpha} \|x_k - z\|_2^2$$

Por otro lado, si definimos $g_i(x) = x - \alpha \sum_{j \in S_i} e_j^T \nabla f(x)$ entonces el algoritmo de descenso de coordenadas por bloques esta dado por:

$$x_{k+1} = g(x_k) \stackrel{\triangle}{=} g_b \circ g_{b-1} \circ \cdots \circ g_1(x_k)$$

Algoritmos de tipo batch estándar

Ademas del algoritmo GD, en la optimización de tipo batch existen dos algoritmos muy usuales:

El algoritmo de punto próximo esta dado por la iteración:

$$x_{k+1} = g(x_k) \stackrel{\triangle}{=} \arg\min_{z \in M} f(z) + \frac{1}{2\alpha} \|x_k - z\|_2^2$$

Por otro lado, si definimos $g_i(x) = x - \alpha \sum_{j \in S_i} e_j^T \nabla f(x)$ entonces e algoritmo de descenso de coordenadas por bloques esta dado por:

$$x_{k+1} = g(x_k) \stackrel{\triangle}{=} g_b \circ g_{b-1} \circ \cdots \circ g_1(x_k)$$

Algoritmos de tipo batch estándar

Ademas del algoritmo GD, en la optimización de tipo batch existen dos algoritmos muy usuales:

El algoritmo de punto próximo esta dado por la iteración:

$$x_{k+1} = g(x_k) \stackrel{\triangle}{=} \arg\min_{z \in M} f(z) + \frac{1}{2\alpha} \|x_k - z\|_2^2$$

Por otro lado, si definimos $g_i(x) = x - \alpha \sum_{j \in S_i} e_j^T \nabla f(x)$ entonces el algoritmo de descenso de coordenadas por bloques esta dado por:

$$x_{k+1} = g(x_k) \stackrel{\triangle}{=} g_b \circ g_{b-1} \circ \cdots \circ g_1(x_k)$$

Un marco de demostración común

Teorema

Sea $F: \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ tal que $F \in C^2$ la función objetivo con Hessiano acotado con constante L, w^* algún mínimo local de F; entonces el algoritmo descenso de gradiente por batch con incremento fijo $\alpha < \frac{1}{L}$ cumple:

$$w_k \xrightarrow[k\to\infty]{c.t.p.} w^*$$

Teorema

Sea $F: \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ tal que $F \in C^2$ la función objetivo con Hessiano acotado con constante L, w^* algún mínimo local de F; entonces el algoritmo punto próximo con incremento fijo $\alpha < \frac{1}{I}$ cumple:

$$w_k \xrightarrow[k\to\infty]{c.t.p.} w^*$$

Un marco de demostración común

Teorema

Sea $F: \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ tal que $F \in C^2$ la función objetivo con Hessiano acotado por bloques con constante L_b , w^* algún mínimo local de F; entonces el algoritmo descenso de gradiente por coordenadas con incremento fijo $\alpha < \frac{1}{L_b}$ cumple:

$$w_k \xrightarrow[k \to \infty]{c.t.p.} w^*$$

Idea de las demostraciones

En los tres casos las hipótesis llevan a demostrar que:

- ① $det(Dg)(x) \neq 0$
- $② \ M^* \subset \mathcal{A}_g^*$

Luego con eso uno concluye que $\mu\left(\left\{x_0: \lim_k g^k(x_0)\in M^*\right\}\right)=0$ por lo que el conjunto de puntos iniciales tales que el algoritmo en cuestión converge a un punto silla estricto en 0. Como ya sabemos que el algoritmo no converge a máximos locales se concluye que:

$$W_k \xrightarrow[k\to\infty]{c.t.p.} W^*$$

Donde w^* es mínimo local.

Convergencia exponencial de GD

¿El descenso de gradiente inicializado aleatoriamente generalmente escapa de los puntos de silla en tiempo polinomial?

Definición

Dado $B \in \mathbb{R}^d$ decimos que $B \in poly(d)$ si existe $p \in \mathbb{R}[X]$ tal que p(d) = B. Asimismo decimos que una iteración de un algoritmo w_k esta a $\Omega(f(k))$ de w^* si existe $K \in \mathbb{N}$ tal que $|w^* - w_k| \ge Kf(k)$

Teorema

Consideremos el algoritmo descenso de gradiente por batch con w_0 elegido uniformemente en $[-1,1]^d$; luego existe $F:\mathbb{R}^d\mapsto\mathbb{R}$ función objetivo B-acotada, I-Lipschitz, μ -Lipschitz en el Hessiano con $B,I,\mu\in poly(d)$ tal que si $\alpha_k=\alpha\leq \frac{1}{I}$ entonces w_k va a estar a $\Omega(1)$ de cualquier mínimo para todo $k\leq e^{\Omega(d)}$

Convergencia exponencial de GD

¿El descenso de gradiente inicializado aleatoriamente generalmente escapa de los puntos de silla en tiempo polinomial?

Definición

Dado $B \in \mathbb{R}^d$ decimos que $B \in poly(d)$ si existe $p \in \mathbb{R}[X]$ tal que p(d) = B. Asimismo decimos que una iteración de un algoritmo w_k esta a $\Omega(f(k))$ de w^* si existe $K \in \mathbb{N}$ tal que $|w^* - w_k| \ge Kf(k)$

Teorema

Consideremos el algoritmo descenso de gradiente por batch con w_0 elegido uniformemente en $[-1,1]^d$; luego existe $F:\mathbb{R}^d\mapsto\mathbb{R}$ función objetivo B-acotada, I-Lipschitz, μ -Lipschitz en el Hessiano con $B,I,\mu\in poly(d)$ tal que si $\alpha_k=\alpha\leq \frac{1}{I}$ entonces w_k va a estar a $\Omega(1)$ de cualquier mínimo para todo $k\leq e^{\Omega(d)}$

Convergencia exponencial de GD

¿El descenso de gradiente inicializado aleatoriamente generalmente escapa de los puntos de silla en tiempo polinomial?

Definición

Dado $B \in \mathbb{R}^d$ decimos que $B \in poly(d)$ si existe $p \in \mathbb{R}[X]$ tal que p(d) = B. Asimismo decimos que una iteración de un algoritmo w_k esta a $\Omega(f(k))$ de w^* si existe $K \in \mathbb{N}$ tal que $|w^* - w_k| \ge Kf(k)$

Teorema

Consideremos el algoritmo descenso de gradiente por batch con w_0 elegido uniformemente en $[-1,1]^d$; luego existe $F:\mathbb{R}^d\mapsto\mathbb{R}$ función objetivo B-acotada, I-Lipschitz, μ -Lipschitz en el Hessiano con $B,I,\mu\in poly(d)$ tal que si $\alpha_k=\alpha\leq \frac{1}{I}$ entonces w_k va a estar a $\Omega(1)$ de cualquier mínimo para todo $k\leq e^{\Omega(d)}$

Intuición acerca de la demostración: Parte 1

Escapar de dos puntos silla consecutivos

Sean $L > \gamma > 0$ y $f \in [0,3] \times [0,3]$ dada por:

$$f(x_1, x_2) = \begin{cases} -\gamma x_1^2 + Lx_2^2 & \text{si } (x_1, x_2) \in [0, 1] \times [0, 1] \\ L(x_1 - 2)^2 - \gamma x_2^2 & \text{si } (x_1, x_2) \in [1, 3] \times [0, 1] \\ L(x_1 - 2)^2 + L(x_2 - 2)^2 & \text{si } (x_1, x_2) \in [1, 3] \times [1, 3] \end{cases}$$

Notemos que f tiene dos puntos silla estrictos en (0,0) y (2,0), mientras que tiene un óptimo en (2,2).

Escapar de dos puntos silla consecutivos

Sean $L > \gamma > 0$ y $f \in [0,3] \times [0,3]$ dada por:

$$f(x_1, x_2) = \begin{cases} -\gamma x_1^2 + L x_2^2 & \text{si } (x_1, x_2) \in [0, 1] \times [0, 1] \\ L(x_1 - 2)^2 - \gamma x_2^2 & \text{si } (x_1, x_2) \in [1, 3] \times [0, 1] \\ L(x_1 - 2)^2 + L(x_2 - 2)^2 & \text{si } (x_1, x_2) \in [1, 3] \times [1, 3] \end{cases}$$

Notemos que f tiene dos puntos silla estrictos en (0,0) y (2,0), mientras que tiene un óptimo en (2,2).

Escapar de dos puntos silla consecutivos

Sean $L > \gamma > 0$ y $f \in [0,3] \times [0,3]$ dada por:

$$f(x_1, x_2) = \begin{cases} -\gamma x_1^2 + L x_2^2 & \text{si } (x_1, x_2) \in [0, 1] \times [0, 1] \\ L(x_1 - 2)^2 - \gamma x_2^2 & \text{si } (x_1, x_2) \in [1, 3] \times [0, 1] \\ L(x_1 - 2)^2 + L(x_2 - 2)^2 & \text{si } (x_1, x_2) \in [1, 3] \times [1, 3] \end{cases}$$

Notemos que f tiene dos puntos silla estrictos en (0,0) y (2,0), mientras que tiene un óptimo en (2,2).

Sean $U = [0,1]^2$, $V = [1,3] \times [0,1]$ y $W = [1,3]^2$ entornos respectivos de los tres puntos críticos, supongamos que $w_0 = (x_1^0, x_2^0) \in U$ y definamos:

$$k_1 = \inf_{x_1^k \ge 1} k = \min_{x_1^k \ge 1} k$$
 $k_2 = \inf_{x_2^k \ge 1} k = \min_{x_2^k \ge 1} k$

Notemos que como la dirección de escape en (0,0) es por x_1 y luego por x_2 (por el cambio de comportamiento de f) podemos concluir que k_1, k_2 estan bien definidos y que $k_2 \ge k_1 \ge 0$.

La idea base es probar que $k_2 = Ck_1$ con C > 1

Sean $U = [0,1]^2$, $V = [1,3] \times [0,1]$ y $W = [1,3]^2$ entornos respectivos de los tres puntos críticos, supongamos que $w_0 = (x_1^0, x_2^0) \in U$ y definamos:

$$k_1 = \inf_{x_1^k \ge 1} k = \min_{x_1^k \ge 1} k$$
 $k_2 = \inf_{x_2^k \ge 1} k = \min_{x_2^k \ge 1} k$

Notemos que como la dirección de escape en (0,0) es por x_1 y *luego* por x_2 (por el cambio de comportamiento de f) podemos concluir que k_1, k_2 estan bien definidos y que $k_2 \ge k_1 \ge 0$.

La idea base es probar que $k_2 = Ck_1$ con C > 1.

Intuición acerca de la demostración: Conclusiones

Esta f que presentamos tiene varios problemas:

- ① No es continua ni mucho menos C^2
- ② No podemos asegurar que f sea I-Lipschitz o $\mu-$ Lipschitz en el hessiano
- 3 Los puntos críticos estan en el borde del dominio, lo que no es ideal
- ullet No está definida en todo \mathbb{R}^d

La clave va a ser usar splines para resolver los primeros puntos, espejar f para hacer los puntos extremales interiores, asignar d puntos críticos similares para generar el tiempo exponencial en d y extender esa función \tilde{f} a \mathbb{R}^d con el Teorema de extensión de Whitney. Aunque la demostración es larga y tediosa, la idea clave es la vista aquí.

Intuición acerca de la demostración: Conclusiones

Esta f que presentamos tiene varios problemas:

- ① No es continua ni mucho menos C^2
- 2 No podemos asegurar que f sea I-Lipschitz o $\mu-$ Lipschitz en el hessiano
- 3 Los puntos críticos estan en el borde del dominio, lo que no es ideal
- ullet No está definida en todo \mathbb{R}^d

La clave va a ser usar splines para resolver los primeros puntos, espejar f para hacer los puntos extremales interiores, asignar d puntos críticos similares para generar el tiempo exponencial en d y extender esa función \tilde{f} a \mathbb{R}^d con el Teorema de extensión de Whitney. Aunque la demostración es larga y tediosa, la idea clave es la vista aquí.

Hoja de ruta

- 1 Introducción
- 2 Convergencia de algoritmos de tipo batch
 - Convergencia Puntul
 - Convergencia c.t.p.
 - Complejidad exponencial
- 3 Algoritmos estocásticos
 - Convergencia en L1
 - Convergencia en c.t.p.
- 4 Conclusiones y continuación
- 5 Referencias

Descenso estocástico

En el contexto estocástico vamos a analizar el algoritmo de descenso estocástico generalizado (DE) dado por:

Algorithm 1: Descenso Estocastico (DE)

```
1 Input: w_1 \in \mathbb{R}^d el inicio de la iteración, \{\xi_k\} iid
```

2 **for**
$$k \in \mathbb{N}$$
 do 3 | Generar una muestra de la variable aleatoria ξ_k

Calcular el vector estocástico
$$g(w_k, \xi_k)$$

Elegir
$$\alpha_k > 0$$

$$w_{k+1} \leftarrow w_k - \alpha_k g(w_k, \xi_k)$$

Donde $g(w_k, \xi_k)$ puede ser varias estimaciones del gradiente como por ejemplo:

$$g(w_k, \xi_k) = egin{cases}
abla f(w_k, \xi_k) \ rac{1}{n_k} \sum_{i=1}^{n_k}
abla f(w_k, \xi_{k,i}) \end{cases}$$

Lemas fundamentales

Definamos ahora $\mathbb{E}_{\xi_k}[.] := \mathbb{E}_{P_k}[.|w_k]$ la esperanza condicional bajo la distribución de ξ_k dado w_k .

Hipótesis (Acotaciones al primer y segundo momento de g)
Supongamos que dada F función objetivo y g la estimación del gradiente

en DE vale:

- ① Existe $U \subset \mathbb{R}^d$ tal que $\{w_k\} \subset U$ y que existe F_{inf} tal que $F|_U \geq F_{inf}$
- ② Existen $\mu_G \ge \mu \ge 0$ tal que para todo $k \in \mathbb{N}$ valen:

$$\nabla F(w_k)^T \mathbb{E}_{\xi_k} [g(w_k, \xi_k)] \ge \mu \|\nabla F(w_k)\|_2^2$$

Y

$$\|\mathbb{E}_{\xi_k}[g(w_k, \xi_k)]\|_2 \leq \mu_G \|\nabla F(w_k)\|_2$$

3 Existen $M, M_V \ge 0$ tal que para todo $k \in \mathbb{N}$:

$$V_{\xi_k}[g(w_k, \xi_k)] \le M + M_V ||\nabla F(w_k)||_2^2$$

Lemas fundamentales

Notemos que si vale la hipótesis en los momentos de g entonces:

$$\mathbb{E}_{\xi_k} \left[\| g(w_k, \xi_k) \|_2^2 \right] \le M + M_G \| \nabla F(w_k) \|_2^2 \qquad M_G := M_V + \mu_G^2 \ge \mu^2 \ge 0$$

Es más, si g es además un estimador insesgado de ∇F entonces $\mu=\mu_{\it G}=1$

Lema

Bajo la hipótesis en los momentos de g y si F es Lipschitz entonces las iteraciones del algoritmo DE satisfacen para todo $k \in \mathbb{N}$:

$$\mathbb{E}_{\xi_k} \left[F(w_{k+1}) \right] - F(w_k) \le -\left(\mu - \frac{1}{2} \alpha_k L M_G\right) \alpha_k \|\nabla F(w_k)\|_2^2 + \frac{1}{2} \alpha_k^2 L M$$

Lemas fundamentales

Notemos que si vale la hipótesis en los momentos de g entonces:

$$\mathbb{E}_{\xi_k} \left[\| g(w_k, \xi_k) \|_2^2 \right] \le M + M_G \| \nabla F(w_k) \|_2^2 \qquad M_G := M_V + \mu_G^2 \ge \mu^2 \ge 0$$

Es más, si g es además un estimador insesgado de ∇F entonces $\mu=\mu_{\it G}=1$

Lema

Bajo la hipótesis en los momentos de g y si F es Lipschitz entonces las iteraciones del algoritmo DE satisfacen para todo $k \in \mathbb{N}$:

$$\mathbb{E}_{\xi_k}\left[F(w_{k+1})\right] - F(w_k) \le -\left(\mu - \frac{1}{2}\alpha_k L M_G\right)\alpha_k \|\nabla F(w_k)\|_2^2 + \frac{1}{2}\alpha_k^2 L M$$

Convergencia en L1

Teorema

Sea $F: \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ tal que $F \in C^1$ la función objetivo tal que existe F_{inf} valor mínimo, F es L-Lipschitz, F es fuertemente convexa y supongamos además que g tiene varianza acotada; entonces el algoritmo descenso estocástico de gradiente generalizado con incremento fijo $0 < \alpha_V = \alpha < \frac{\mu}{2}$ cumple:

$$0 < \alpha_k = \alpha \le \frac{\mu}{LM_G}$$
 cumple:

$$\mathbb{E}\left[F(w_k) - F_{inf}\right] \xrightarrow[k \to \infty]{} \frac{\alpha LM}{2c\mu}$$

Esquema de la demostración

Usando que F es Lipschitz y fuertemente convexa con la condición sobre α tenemos para todo $k \in \mathbb{N}$ vale:

$$\mathbb{E}_{\xi_k}\left[F(w_{k+1}) - F(w_k)\right] \leq -\alpha\mu c\left(F(w_k) - F_{inf}\right) + \frac{1}{2}\alpha^2 LM$$

Luego si restamos F_{inf} , tomamos esperanza total uno ve inductivamente que:

$$\mathbb{E}\left[F(w_{k+1}) - F_{inf}\right] - \frac{\alpha LM}{2c\mu} \leq \left(1 - \alpha c\mu\right)^k \left(F(w_1) - F_{inf} - \frac{\alpha LM}{2c\mu}\right)$$

Convergencia en L1

Teorema

Sea $F: \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ tal que $F \in C^1$ la función objetivo tal que existe F_{inf} valor mínimo, F es L-Lipschitz, F es fuertemente convexa; supongamos además que g tiene varianza acotada g que los incrementos g cumplen:

$$\alpha_k = \frac{\beta}{\gamma + k}$$
 para algún $\beta > \frac{1}{c\mu}$ y $\gamma > 0$ tal que $\alpha_1 \le \frac{\mu}{LM_G}$

Luego el algoritmo descenso estocástico de gradiente generalizado cumple::

$$\mathbb{E}\left[F(w_k) - F^*\right] = \mathcal{O}\left(\frac{1}{k}\right)$$

Esquema de la demostración

Usando que F es Lipschitz y fuertemente convexa con la condición sobre α tenemos para todo $k \in \mathbb{N}$ vale:

$$\mathbb{E}_{\xi_k}\left[F(w_{k+1})\right] - F(w_k) \le -\alpha_k c\mu \left(F(w_k) - F(w_*)\right) + \frac{1}{2}\alpha_k^2 LM$$

Luego restando F_{inf} , tomando esperanza y reordenando vale inductivamente que:

$$\mathbb{E}\left[F(w_{k+1}) - F_{inf}\right] \leq \frac{\eta}{\gamma + k + 1}$$

Convergencia en L1

Teorema

Sea $F: \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ tal que $F \in C^1$ la función objetivo tal que existe F_{inf} valor mínimo, F es L-Lipschitz, F es fuertemente convexa; supongamos además que existe $M \geq 0$ y $\xi \in (0,1)$ tal que para todo $k \in \mathbb{N}$:

$$\mathbb{V}_{\xi_k}\left[g(w_k,\xi_k)\right] \leq M\xi^{k-1}$$

Luego el algoritmo descenso estocástico de gradiente generalizado con incremento fijo $0<\alpha_k=\alpha\leq\min\left\{\frac{\mu}{L\mu_G^2},\frac{1}{\mu}\right\}$ cumple:

$$\mathbb{E}\left[F(w_k) - F_{inf}\right] = \mathcal{O}\left(\rho^k\right)$$

Esquema de la demostración

Por el lema, la condición de α y las hipótesis sobre F y g vale que:

$$\mathbb{E}\left[F(w_{k+1}) - F_{inf}\right] \leq (1 - c\mu\alpha)\mathbb{E}\left[F(w_k) - F_{inf}\right] + \frac{1}{2}\alpha^2 LM\xi^{k-1}$$

E inductivamente se prueba que:

$$\mathbb{E}\left[F(w_{k+1}) - F_{inf}\right] \le \omega \rho^k$$

Convergencia en L1

Teorema

Sea $F: \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ tal que $F \in C^2$ la función objetivo, F es L-Lipschitz y $w \mapsto \|\nabla F(w)\|_2^2$ sea L-Lipschitz; supongamos además que g tiene varianza acotada y que los incrementos cumplen la condición de Robbins Monro. Luego el algoritmo descenso estocástico de gradiente generalizado con incrementos decrecientes cumple:

$$\lim_{k\to\infty}\mathbb{E}\left[\|\nabla F(w_k)\|^2\right]=0$$

Convergencia c.t.p.

Teorema

Sea $F: \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ tal que $F \in C^1$ la función objetivo tal que existe F_{inf} valor mínimo, F es débilmente convexo; supongamos además que g tiene varianza acotada y que los incrementos cumplen la condición de Robbins Monro. Luego el algoritmo descenso estocástico de gradiente generalizado con incremento decrecientes cumple:

$$w_k \xrightarrow[k \to \infty]{c.t.p.} w^*$$

$$(w_k - w^*)^T \nabla F(w_k) \xrightarrow[k \to \infty]{c.t.p.} 0$$

Convergencia c.t.p.: Esquema de la Demostración

Sea $h_k := \|w_k - w^*\|^2$ y definamos la filtración $\mathcal{P}_k = \{\xi_0, \dots, \xi_{k-1}, w_0, \dots, w_k, \alpha_0, \dots, \alpha_k\}$. Incorporando las hipótesis se puede ver que:

$$\mathbb{E}\left[h_{k+1} - \left(1 + \alpha_k^2 B\right) h_k | \mathcal{P}_k\right] \leq -2\alpha_k \left(w_k - w^*\right)^T \nabla F(w_k) + \alpha_k^2 A$$

Luego, definiendo μ_k como antes uno llega a:

$$\alpha_k (w_k - w^*)^T \nabla F(w_k) \leq \mathbb{E} \left[\delta_k^{\mu h} (\mu_{k+1} h_{k+1} - \mu_k h_k) \right] \leq \alpha_k^2 \mu_k A$$

Usando el teorema de convergencia de quasimartingalas uno ve que h_k converge, con lo que concluimos que:

$$\sum_{k=1}^{\infty} \alpha_k \left(w_k - w^* \right)^T \nabla F(w_k) < \infty \qquad \text{ctp}$$

Y de aquí se concluye el resultado.

Convergencia c.t.p.: Hipótesis

Hipótesis

Sea $F: \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ función objetivo y g un estimador insesgado de ∇F tal que ambos cumplen:

- ① $F \in C^3$
- ② Existe $w^* \in \mathbb{R}^d$ tal que $F_{inf} = F(w^*) \le F(w)$ para todo $w \in U$ entorno.
- $F(w) \geq 0$ para todo $w \in \mathbb{R}^d$
- 4 Los incrementos cumplen la condición de Robbins Monro
- **5** Existe $B_2 \ge 0$ tal que:

$$\mathbb{E}\left[\left\|g(w_k,\xi_k)\right\|^2\right] \leq B_2 \left\|w\right\|^2$$

Convergencia c.t.p.: Hipótesis continuación

Hipótesis

6 Para j = 3, 4 existen $A_j, B_j \ge 0$ tal que:

$$\mathbb{E}\left[\|g(w_k,\xi_k)\|^j\right] \leq A_j + B_j \|w\|^j$$

 \bigcirc Existe D > 0 tal que:

$$\inf_{(w)^2 > D} w^T \nabla F(w) > 0$$

Convergencia c.t.p.: Teorema

Teorema

Bajo todas las hipótesis mencionadas anteriormente, el algoritmo descenso estocástico de gradiente generalizado con incrementos decrecientes cumple:

$$F(w_k) \xrightarrow[k \to \infty]{c.t.p.} F_{\infty}$$

$$\nabla F(w_k) \xrightarrow[k \to \infty]{c.t.p.} 0$$

Hoja de ruta

- Introducción
- 2 Convergencia de algoritmos de tipo batch
 - Convergencia Puntua
 - Convergencia c.t.p.
 - Complejidad exponencial
- 3 Algoritmos estocásticos
 - Convergencia en L1
 - Convergencia en c.t.p.
- 4 Conclusiones y continuación
- 5 Referencias

Algunas conclusiones

- 1 Los métodos determinísticos sufren la lentitud natural de tener un solo epoch por set de datos.
- ② El descenso de gradiente tiene complejidad exponencial para alcanzar el mínimo.
- 3 Los métodos estocásticos bajo condiciones de convexidad muy leves convergen rápidamente en esperanza y casi todo punto.
- Esa convergencia es independiente del número de datos, lo que los habilita para el régimen del big data.

Posibles líneas de investigación

- Analizar qué tan restrictivas son las condiciones que pedimos en esta Tesis a la función objetivo, asi como algoritmos que permitan la validación de las hipótesis con la menor cantidad de derivadas a calcular posibles.
- Profundizar el estudio de la complejidad y convergencia a mínimos en los algoritmos mixtos que surgen de intentar juntar características de los algoritmos más usuales.
- Estudiar si SG, u otros DE, cumplen las propiedades vistas en Jin et.
 al. 2017 y Zhang et. al. 2017; es de particular interés un algoritmo
 que cumpla ambas y además no sea costoso computacionalmente o
 admita un cálculo distribuido.

Hoja de ruta

- Introducción
- Convergencia de algoritmos de tipo batch
 - Convergencia Puntua
 - Convergencia c.t.p.
 - Complejidad exponencial
- 3 Algoritmos estocásticos
 - Convergencia en L1
 - Convergencia en c.t.p
- 4 Conclusiones y continuación
- 5 Referencias

Referencias I

- Lee et al. *Gradient descent only converges to minimizers*. Conference on learning theory, 2016, págs. 1246-1257.
- Leon Bottou. "Online Learning and Stochastic Approximations". En: (mayo de 1999).
- Leon Bottou, Frank E. Curtis y Jorge Nocedal. "Optimization Methods for Large-Scale Machine Learning". En: 60 (jun. de 2016).
- Wassily Hoeffding. PROBABILITY INEQUALITIES FOR SUMS OF BOUNDED RANDOM VARIABLES. 1962.
- G. Piliouras M. Simchowitz M.I. Jordan "J. Lee I. Panageas y B. Recht". "First-order methods almost always avoid saddle points". En: (2017).
- Chi Jin y col. "How to Escape Saddle Points Efficiently". En: *ICML*. 2017.

Referencias II

- S. Lojasiewicz. *A topological property of real analytic subsets.* Coll. du CNRS, Les equations aux derivees partielles, 1963, págs. 87-89.
- B. T. Polyak. *Gradient methods for minimizing functionals*. Zh. Vychisl. Mat. Fiz, 1963, págs. 643-653.
- H. Robbins y S. Monro. *A Stochastic Approximation Model.* Vol. 22(3). The Annal of Mathematical Statistics, 1951, págs. 400-407.
- Yuchen Zhang, Percy Liang y Moses Charikar. "A Hitting Time Analysis of Stochastic Gradient Langevin Dynamics". En: COLT. 2017.

Gracias por la atención!