Стохастический метод Ньютона с различным семплингом

Денис Швейкин

Московский физико-технический институт

Курс: Моя первая научная статья

Эксперт: Рустем Исламов

2023

Цель исследования

Задача

Использовать различные стратегии семплинга для стохастического метода Ньютона, чтобы получить наилучшую скорость сходимости

Мотивация

- Задача минимизации функции потерь, имеющей структуру конечной суммы, возникает повсеместно в машинном обучении. Методы первого порядка для этой задачи хорошо изучены
- Методы второго порядка типа Ньютон лучше адаптируются к кривизне задачи и имеют квадратичную сходимость. Однако эти методы изучены менее подробно
- Применяются различные стратегии семплинга для стохастического варианта, поскольку для методов первого порядка их подбор ведет к улучшеням скорости сходимости

Минимизируемая функция

Структура функции потерь

$$\min_{x \in \mathbb{R}^d} \left[f(x) \stackrel{def}{=} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} f_i(x) \right]$$

Предположения

- Сильная выпуклость

$$f(x) \geqslant f(y) + \langle \nabla f, x - y \rangle + \frac{\mu}{2} \|x - y\|^2$$

- Липшицевы Гессианы

$$\|\nabla^2 f(x) - \nabla^2 f(y)\| \leqslant H \|x - y\|$$

Алгоритм

Initialize: Задать начальные приближения $w_1^0, w_2^0, \dots w_n^0 \in \mathbb{R}^d$

for $k = 0, 1, 2, \dots$ **do**

$$x^{k+1} = \left[\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \nabla^2 f_i(w_i^k)\right]^{-1} \left[\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \nabla^2 f_i(w_i^k) w_i^k - \nabla f_i(w_i^k)\right]$$

Выбрать множество $S^k \subseteq \{1, 2, \dots, n\}$ одной из стратегий семплинга

$$w_i^{k+1} = \begin{cases} x^{k+1} & i \in S^k \\ w_i^k & i \notin S^k \end{cases}$$

end for

Определение

Семплингом называется $\hat{S} : [n] \to 2^{[n]}$

Метрика качества

Качество стратегий измеряется в скорости сходимости

Стратегии семплинга

Определение

Семплингом называется $\hat{S} : [n] \to 2^{[n]}$

Однородные стратегии

Любое множество размера j выбирается с одинаковой вероятностью, $P(|\hat{S}| = j) = q_j$
Пример: τ-nice семплинг

$$q_\tau = 1$$

Importance sampling

Каждая f_i имеет свою константу Липшица H_i

$$p_i = \frac{H_i}{\sum_{i=1}^{n} H_i}$$

Независимые стратегии

Теперь каждый объект i включается в множество S независимо с вероятностью p_i.

Последовательная стратегия

Проходить по данным в порядке, заданном случайное перестановкой

Результаты: оценки скорости сходимости

Средний квадрат незвяки

$$\mathcal{W}^k \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \|w_i^k - x^*\|^2$$

Однородные стратегии

Пусть $p = \frac{\mathbb{E}[|\hat{S}|]}{n}$. Тогда $\mathbb{E}_k[\mathcal{W}^{k+1}] \leqslant \left(1 - \frac{3}{4}p\right)\mathcal{W}^k$

Результат получается одинаковым для любой стратегии. Поэтому при равных p различие будет только в удобстве реализаций стратегий

Независимые стратегии

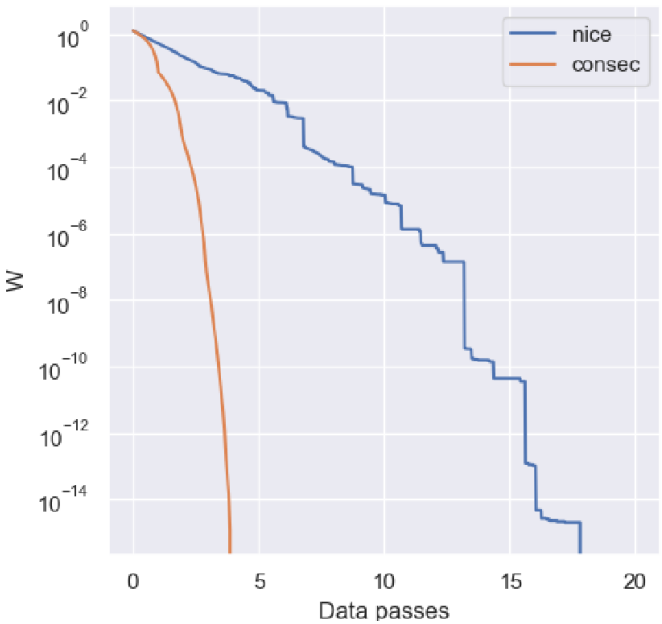
Пусть фиксировано матожидание размера батча $\mathbb{E}_k[|\hat{S}^k|] = \tau$. Тогда $\mathbb{E}_k[\mathcal{W}^{k+1}]$ будет минимально, если некоторые p_i равны 1, возможно одно $p_i \in (0, 1)$, а остальные равны 0. "Аппроксимируется"последовательной стратегией

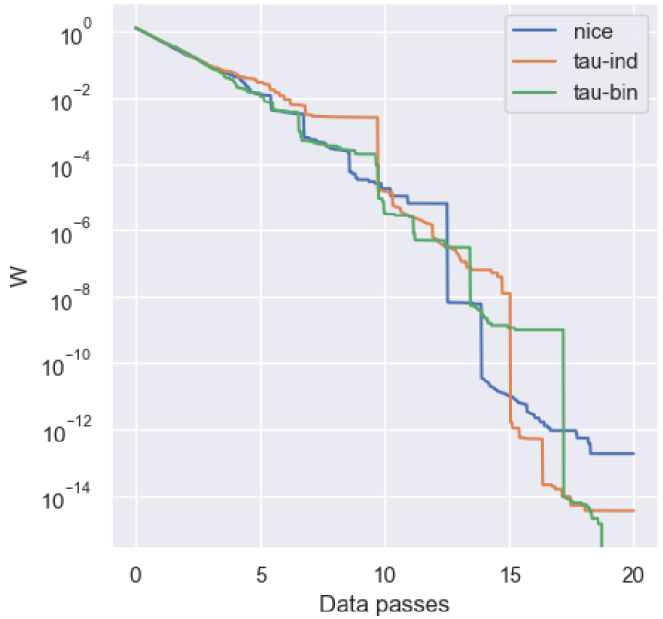
Importance sampling

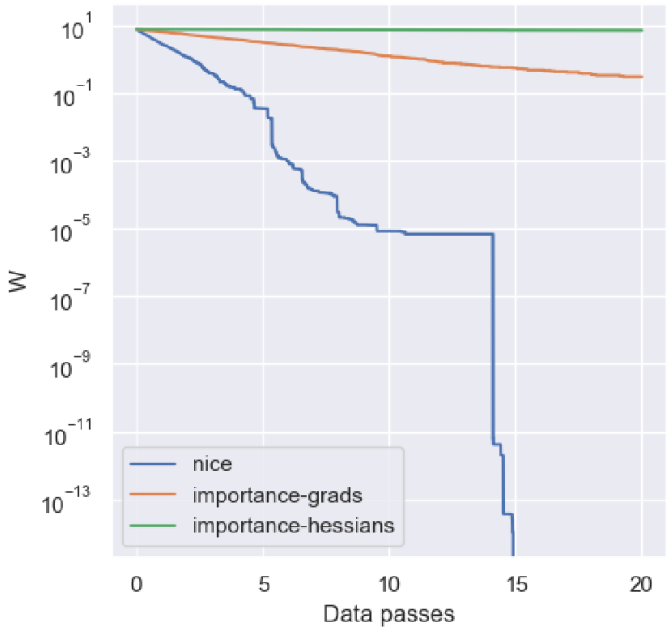
Теоретических гарантий сходимости нет

Вычислительный эксперимент

1. Однородные стратегии →
2. Importance sampling ↘
3. Последовательная стратегия ↓







Заключение

- Получены линейные оценки скорости сходимости для однородных стратегий в общем случае. Показана практическая эквивалентность основных вариантов однородных стратегий
- Для Importance sampling теоретических гарантий сходимости нет, и в эксперименте он уступает базовому методу τ-nice
- Последовательная стратегия показывает себя лучше. Тем не менее, теоретическое обоснование нужно уточнять и улучшать