

Универсальные методы для стохастических вариационных неравенств

Климза Антон

Руководитель: А. В. Гасников

Аннотация

В данной статье рассматривается задача оптимизации стохастических вариационных неравенств. Мы предлагаем стохастический вариант универсального проксимального зеркального метода для решения задачи оптимизации. Получены оценки необходимого числа итераций для достижения заданного качества решения вариационного неравенства. Также, мы сравниваем полученный алгоритм с другими популярными оптимизаторами на задаче классификации по картинкам.

1 Введение

Вариационные неравенства нередко возникают в самых разных проблемах оптимизации и имеют многочисленные приложения [1] в математической экономике, теории игр и машинном обучении для задач негладких оптимизаций [2], генеративно-состязательных сетей [3] и обучения с подкреплением [4, 5]. Наиболее известным аналогом градиентного метода для вариационных неравенств является экстраградиентный метод Г.М. Корпелевич [6]. Одним из современных вариантов экстраградиентного метода является проксимальный зеркальный метод А.С. Немировского [7].

Задачу стохастической выпуклой оптимизации уже разбирали в статье [9], в которой предлагается универсальный метод для решения монотонных стохастических вариационных неравенств на базе проксимального зеркального метода. По сути, используется стандартный проксимальный зеркальный метод, в котором L предлагается выбирать специальным образом, схожим со способом, используемым в Adagrad. Однако этот метод не является полностью адаптивным, поскольку, так же как и в Adagrad, в стратегии выбора шага существенно используется информация о размере решения. Полностью адаптивный метод решения гладких стохастических монотонных вариационных неравенств был построен (с небольшими оговорками) в работе [10] и в работе [12] для неточного аракула.

В новой статье [8] авторы предлагают свой универсальный градиентный спуск для задач стохастической выпуклой оптимизации. Мы предлагаем применение этого метода для стохастических вариационных неравенств, в частности для седловых задач. Такие постановки, например, возникают в задачах состязательного обучения. Преимущества универсального градиентного спуска в том, что он сам настраивается на гладкость задачи и не требует параметров на входе.

2 Постановка задачи

Для некоторого оператора $g : Q \rightarrow \mathbb{R}^n$, заданного на выпуклом компакте $Q \in \mathbb{R}^n$, будем рассматривать сильные вариационные неравенства вида:

$$\langle g(x^*), x^* - x \rangle \leq 0.$$

Отметим, что в этом неравенстве требуется найти решение вариационного неравенства $x^* \in Q$, для которого

$$\max_{x \in Q} \langle g(x^*), x^* - x \rangle \leq 0.$$

В случае монотонного поля наш подход позволяет рассматривать также слабые вариационные неравенства

$$\langle g(x), x^* - x \rangle \leq 0,$$

в котором требуется найти $x^* \in Q$, такое, что неравенство верно при всех $x \in Q$. Обозначим:

$$Gap(x^*) = \max_{x \in Q} \langle g(x), x^* - x \rangle,$$

и будем считать x^* - ε -решением вариационного неравенства, если $Gap(x^*) \leq \varepsilon$.

Также предполагаем, что вариационное неравенство монотонное (при $g = \nabla f$ равносильно Q - выпуклое):

$$\langle g(x) - g(y), x - y \rangle \geq 0 \quad \forall x, y \in Q,$$

Q удовлетворяет условию Гёльдера:

$$\exists \nu \in [0, 1], L_\nu \geq 0 : \quad \|g(x) - g(y)\|_* \leq L_\nu \|x - y\|^\nu \quad \forall x, y \in Q,$$

и Q ограничено константой $D \geq \max_{x, y \in Q} \|x - y\|$.

В стохастическом случае предполагаем:

$$E_\xi g(x, \xi) = g(x),$$

$$E_\xi \|g(x, \xi) - g(x)\|^2 \leq \sigma^2.$$

Ещё будем использовать дивергенцию Брегмана:

$$V[z](x) = d(x) - d(z) - \langle \nabla d(z), x - z \rangle, \quad x, z \in Q,$$

где $d(x)$ - непрерывно дифференцируемая строго выпуклая функция $d : Q \rightarrow \mathbb{R}$ и удовлетворяет условию Гёльдера с константой D_μ :

$$\exists \mu \in [0, 1], D_\mu \geq 0 : \quad \|\nabla d(x) - \nabla d(y)\|_* \leq D_\mu \|x - y\|^\mu \quad \forall x, y \in Q.$$

Тогда $V[z](x) \geq \frac{1}{2} \|x - z\|^2$ и $V[z](x) \leq \frac{D_\mu}{1+\mu} \|x - z\|^{1+\mu}$.

3 Универсальный проксимальный зеркальный метод

В проксимальном зеркальном методе мы рассматриваем шаг:

$$w_k = \arg \min_{x \in Q} \left(\langle g(z_k), x - z_k \rangle + L_k \frac{1}{2} \|z_k - x\|^2 \right),$$

$$z_{k+1} = \arg \min_{x \in Q} \left(\langle g(w_k), x - w_k \rangle + L_k \frac{1}{2} \|z_k - x\|^2 \right).$$

Идея адаптивного метода – пересчитывать L_k умножая его на 2, пока не достигнем желаемой точности, и после этого переходить к следующему шагу. В универсальном методе мы хотим пересчитывать L_k по простой формуле один раз, тем самым ускоряя работу метода и улучшая сходимость.

Оператор $h_k(z^*) = \langle g(w_k), z^* - w_k \rangle + L_k \frac{1}{2} \|z - z^*\|^2$ - сильно выпуклый с константой L_k , поэтому для $x = \arg \min_{z^* \in Q} h_k(z^*)$ выполнено неравенство:

$$h_k(z^*) \geq h_k(x) + L_k \frac{1}{2} \|z^* - x\|^2,$$

Тогда получим неравенство:

$$\langle g(w_k), z^* - w_k \rangle + L_k \frac{1}{2} \|z_k - z^*\|^2 \geq \langle g(w_k), z_{k+1} - w_k \rangle + L_k \frac{1}{2} \|z_k - z_{k+1}\|^2 + L_k \frac{1}{2} \|z_{k+1} - z^*\|^2.$$

$$- \langle g(w_k), z^* - w_k \rangle + L_k \frac{1}{2} \|z_{k+1} - z^*\|^2 \leq - \langle g(w_k), z_{k+1} - w_k \rangle - L_k \frac{1}{2} \|z_k - z_{k+1}\|^2 + L_k \frac{1}{2} \|z_k - z^*\|^2.$$

Мы получили оценку для L_k , теперь, чтобы получить формулу пересчёта L_{k+1} , мы добавим его в неравенство.

К обоим частям прибавим $L_{k+1} \frac{1}{2} \|z_{k+1} - z^*\|^2$:

$$- \langle g(w_k), z^* - w_k \rangle + L_{k+1} \frac{1}{2} \|z_{k+1} - z^*\|^2 \leq$$

$$\leq - \langle g(w_k), z_{k+1} - w_k \rangle - L_k \frac{1}{2} \|z_k - z_{k+1}\|^2 + (L_{k+1} - L_k) \frac{1}{2} \|z_{k+1} - z^*\|^2 + L_k \frac{1}{2} \|z_k - z^*\|^2.$$

Тогда при $L_{k+1} \geq L_k$:

$$- \langle g(w_k), z^* - w_k \rangle + L_{k+1} \frac{1}{2} \|z_{k+1} - z^*\|^2 \leq$$

$$\leq - \langle g(w_k), z_{k+1} - w_k \rangle - L_k \frac{1}{2} \|z_k - z_{k+1}\|^2 + (L_{k+1} - L_k) \frac{D^2}{2} + L_k \frac{1}{2} \|z_k - z^*\|^2.$$

Будем искать L_{k+1} такое, что:

$$(L_{k+1} - L_k) \frac{D^2}{2} = \left| - \langle g(w_k), z_{k+1} - w_k \rangle - L_k \frac{1}{2} \|z_k - z_{k+1}\|^2 \right|_+.$$

Тогда:

$$- \langle g(w_k), z^* - w_k \rangle + L_{k+1} \frac{1}{2} \|z_{k+1} - z^*\|^2 \leq D^2 (L_{k+1} - L_k) + L_k \frac{1}{2} \|z_k - z^*\|^2.$$

Через телескопическую сумму получаем:

$$-\sum_{i=0}^k \langle g(w_k), z^* - w_k \rangle + L_{k+1} \frac{1}{2} \|z_{k+1} - z^*\|^2 \leq D^2(L_{k+1} - L_0) + L_0 \frac{1}{2} \|z_0 - z^*\|^2,$$

$$-\frac{1}{k} \sum_{i=0}^k \langle g(w_k), z^* - w_k \rangle \leq \frac{D^2 L_{k+1}}{k}.$$

Мы получили оценку сходимости метода, при данном выборе L_{k+1} . Теперь необходимо доказать, что метод сходится, для чего хотим $L_{k+1} = o(k)$. Заметим, что мы получили оценку не на $Gap(z^*)$, а на среднее $-\langle g(x), z^* - x \rangle$.

Для доказательства сходимости сделаем оценку на L_{k+1} . Для этого возьмём немного другое L_{k+1} по формуле:

$$(L_{k+1} - L_k) \frac{D^2}{2} = \left| -\langle g(w_k), z_{k+1} - w_k \rangle - L_{k+1} \frac{1}{2} \|z_k - z_{k+1}\|^2 \right|_+.$$

Если правая часть отрицательная, то получаем $L_{k+1} = L_k$, иначе:

$$(L_{k+1} - L_k) \frac{D^2}{2} = -\langle g(w_k), z_{k+1} - w_k \rangle - L_{k+1} \frac{1}{2} \|z_k - z_{k+1}\|^2$$

Воспользуемся Гёльдеровостью оператора g :

$$\langle g(w_k) - g(z_k), w_k - z_{k+1} \rangle \leq L_\nu \|w_k - z_k\|^\nu \|w_k - z_{k+1}\|$$

Тогда

$$-\langle g(w_k), z_{k+1} - w_k \rangle \leq \langle g(z_k), w_k - z_{k+1} \rangle + L_\nu \|w_k - z_k\|^\nu \|w_k - z_{k+1}\|$$

Снова воспользуемся неравенством $h_k(z^*) \geq h_k(x) + L_k \frac{1}{2} \|z^* - x\|^2$ для оператора h :

$$\langle g(z_k), w_k \rangle + L_k \frac{1}{2} \|z_k - w_k\|^2 + L_k \frac{1}{2} \|z_{k+1} - w_k\|^2 \leq \langle g(z_k), z_{k+1} \rangle + L_k \frac{1}{2} \|z_k - z_{k+1}\|^2$$

Тогда

$$-\langle g(w_k), z_{k+1} - w_k \rangle \leq L_\nu \|w_k - z_k\|^\nu \|w_k - z_{k+1}\| + L_k \frac{1}{2} \|z_k - z_{k+1}\|^2 - L_k \frac{1}{2} \|z_k - w_k\|^2 - L_k \frac{1}{2} \|z_{k+1} - w_k\|^2$$

Применяем неравенство для оценки L_{k+1} :

$$(L_{k+1} - L_k) \frac{1}{2} D^2 \leq L_\nu \|w_k - z_k\|^\nu \|w_k - z_{k+1}\| + (L_k - L_{k+1}) \frac{1}{2} \|z_k - z_{k+1}\|^2 - L_k \frac{1}{2} \|z_k - w_k\|^2 - L_k \frac{1}{2} \|z_{k+1} - w_k\|^2$$

Получаем неравенство:

$$\begin{aligned} (L_{k+1} - L_k) \frac{1}{2} (D^2 + \|z_k - z_{k+1}\|^2 - \|z_k - w_k\|^2 - \|z_{k+1} - w_k\|^2) &\leq \\ &\leq L_\nu \|w_k - z_k\|^\nu \|w_k - z_{k+1}\| - L_{k+1} \frac{1}{2} (\|z_k - w_k\|^2 + \|z_{k+1} - w_k\|^2) \end{aligned}$$

Обозначим $R = D^2 + \|z_k - z_{k+1}\|^2 - \|z_k - w_k\|^2 - \|z_{k+1} - w_k\|^2$, тогда:

$$(L_{k+1} - L_k) \frac{R}{2} \leq L_\nu \|w_k - z_k\|^\nu \|w_k - z_{k+1}\| - L_{k+1} \frac{1}{2} (\|z_k - w_k\|^2 + \|z_{k+1} - w_k\|^2)$$

Найдём максимум функции $f(x, y) = L_\nu x^\nu y - \frac{1}{2}L_{k+1}(x^2 + y^2)$ при $\nu \in (0, 1)$:

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \nu L_\nu x^{\nu-1} y - L_{k+1} x,$$

$$\frac{\partial f}{\partial y} = L_\nu x^\nu - L_{k+1} y.$$

Заметим, что в точке $\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{\partial f}{\partial y} = 0$ функция будет принимать максимальное значение. Тогда:

$$\nu L_\nu x^{\nu-1} y - L_{k+1} x = 0, \Rightarrow y = \frac{L_{k+1} x^{2-\nu}}{\nu L_\nu}.$$

$$L_\nu x^\nu - L_{k+1} y = 0, \Rightarrow y = \frac{L_\nu x^\nu}{L_{k+1}}.$$

$$\frac{L_{k+1} x^{2-\nu}}{\nu L_\nu} = \frac{L_\nu x^\nu}{L_{k+1}}, \Rightarrow x = \left(\frac{\sqrt{\nu} L_\nu}{L_{k+1}} \right)^{\frac{1}{1-\nu}}, \quad y = \left(\frac{\nu^{\frac{\nu}{2}} L_\nu}{L_{k+1}} \right)^{\frac{1}{1-\nu}}$$

Получаем:

$$\begin{aligned} f(x, y) &\leq L_\nu \left(\frac{\sqrt{\nu} L_\nu}{L_{k+1}} \right)^{\frac{\nu}{1-\nu}} \left(\frac{\nu^{\frac{\nu}{2}} L_\nu}{L_{k+1}} \right)^{\frac{1}{1-\nu}} - \frac{1}{2} L_{k+1} \left(\left(\frac{\sqrt{\nu} L_\nu}{L_{k+1}} \right)^{\frac{2}{1-\nu}} + \left(\frac{\nu^{\frac{\nu}{2}} L_\nu}{L_{k+1}} \right)^{\frac{2}{1-\nu}} \right) = \\ &= \frac{\nu^{\frac{\nu}{1-\nu}} L_\nu^{\frac{2}{1-\nu}}}{L_{k+1}^{\frac{1+\nu}{1-\nu}}} \left(1 - \frac{\nu^{\frac{1}{\nu}}}{2} - \frac{1}{2} \right) = \frac{\nu^{\frac{\nu}{1-\nu}} (1 - \nu^{\frac{1}{\nu}}) L_\nu^{\frac{2}{1-\nu}}}{2 L_{k+1}^{\frac{1+\nu}{1-\nu}}}. \end{aligned}$$

Пусть $p = \frac{1+\nu}{1-\nu}$, тогда:

$$\begin{aligned} (L_{k+1} - L_k) R &\leq \frac{\nu^{\frac{\nu}{1-\nu}} (1 - \nu^{\frac{1}{\nu}}) L_\nu^{p+1}}{2 L_{k+1}^p}, \\ (p+1) L_{k+1}^p (L_{k+1} - L_k) &\leq \frac{\nu^{\frac{\nu}{1-\nu}} (1 - \nu^{\frac{1}{\nu}}) (p+1) L_\nu^{p+1}}{2R} = \alpha, \end{aligned}$$

Заметим, что:

$$(p+1) L_{k+1}^p (L_{k+1} - L_k) \geq (p+1) \int_{L_k}^{L_{k+1}} t^p dt = L_{k+1}^{p+1} - L_k^{p+1}.$$

Тогда:

$$L_{k+1}^{p+1} - L_k^{p+1} \leq \alpha,$$

по телескопической сумме:

$$L_{k+1}^{p+1} \leq k\alpha + L_0^{p+1}.$$

Для достаточно большого k :

$$L_{k+1} \leq (2k\alpha)^{\frac{1}{p+1}} = \left(k \frac{\nu^{\frac{\nu}{1-\nu}} (1 - \nu^{\frac{1}{\nu}}) (p+1) L_\nu^{p+1}}{R} \right)^{\frac{1}{p+1}} = k^{\frac{1-\nu}{2}} \frac{\nu^{\frac{\nu}{2}} (2 - 2\nu^{\frac{1}{\nu}})^{\frac{1-\nu}{2}} L_\nu}{(1-\nu)^{\frac{1-\nu}{2}} R^{\frac{1-\nu}{2}}} \leq (2-\nu) \left(\frac{k}{2R} \right)^{\frac{1-\nu}{2}} L_\nu.$$

По равенству параллелограмма:

$$R = D^2 + \|z_k - z_{k+1}\|^2 - \|z_k - w_k\|^2 - \|z_{k+1} - w_k\|^2 = D^2 + \frac{1}{2}\|z_k - z_{k+1}\|^2 - \frac{1}{2}\|z_k + z_{k+1} - 2w_k\|^2 \geq \frac{D^2}{2}$$

Тогда:

$$L_{k+1} \leq (2 - \nu) \left(\frac{k}{D^2} \right)^{\frac{1-\nu}{2}} L_\nu$$

$$\varepsilon = -\frac{1}{k} \sum_{i=0}^k \langle g(w_k), z^* - w_k \rangle \leq \frac{(2 - \nu)L_\nu D^{1+\nu}}{k^{\frac{1+\nu}{2}}},$$

Получаем оценку скорости сходимости метода:

$$O \left(\inf_{\nu \in [0,1]} \left(\frac{(2 - \nu)L_\nu}{\varepsilon} \right)^{\frac{2}{1+\nu}} D^2 \right).$$

Оценка скорости сходимости отличается от оценки обычного проксимального зеркального метода только на константу. Заметим, что в стохастическом случае оценки остаются такими же. Так как в доказательстве оценки мы брали немного другое L_{k+1} , то полученный метод выглядит так:

Algorithm 1 Универсальный проксимальный зеркальный метод (UMP)

- 1: Set $z_0 = \arg \min_{u \in Q} d(u)$, $L_0 = \|g(z_0)\|$.
 - 2: **for** $k = 0, 1, \dots$ **do**
 - 3: $w_k = \arg \min_{x \in Q} (\langle g(z_k), x \rangle + L_k \frac{1}{2} \|z_k - x\|^2)$.
 - 4: $z_{k+1} = \arg \min_{x \in Q} (\langle g(w_k), x \rangle + L_k \frac{1}{2} \|z_k - x\|^2)$.
 - 5: $L_{k+1} = L_k + \max \left(0, \frac{-\langle g(w_k), z_{k+1} - w_k \rangle - L_k \frac{1}{2} \|w_k - z_{k+1}\|^2}{\frac{1}{2} D^2 + \frac{1}{2} \|w_k - z_{k+1}\|^2} \right)$.
 - 6: **end for**
-

4 Вычислительный эксперимент

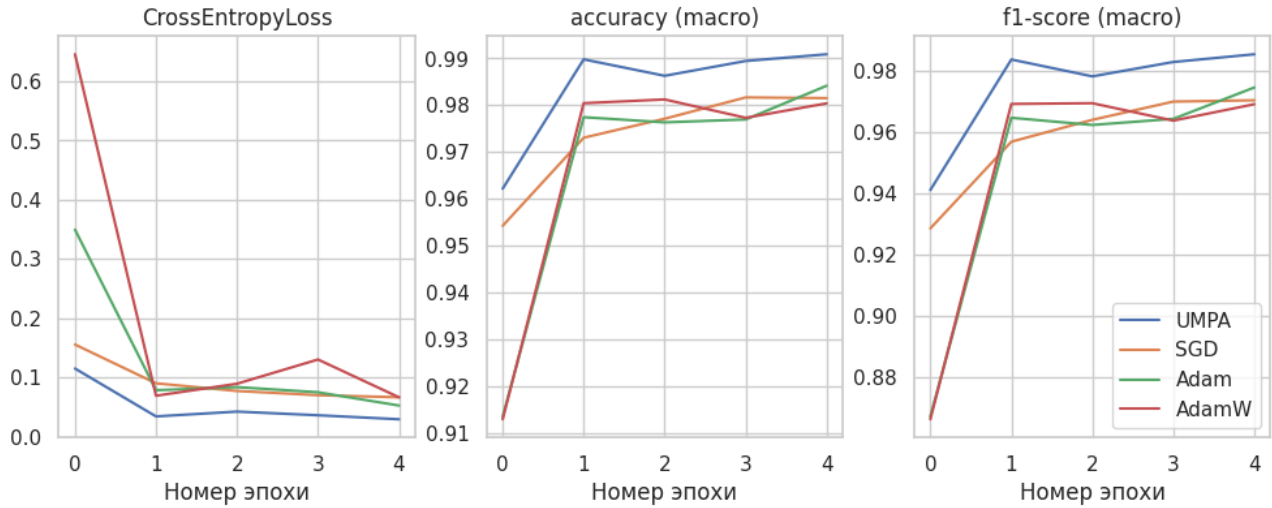
Для сравнения работы универсального проксимального зеркального метода с другими оптимизаторами обучим свёрточную нейронную сеть [resnet50](#) реализованную в библиотеке pytorch на основе статьи [11] для классификации изображений датасетов [MNIST](#) и [CIFAR10](#) также предоставленных библиотекой pytorch.

MNIST - это датасет образцов рукописного написания цифр, содержащий в себе 60000 тренировочных и 10000 тестовых чёрно-белых картинок размера 28x28, каждая подписана соответствующей ей цифрой.

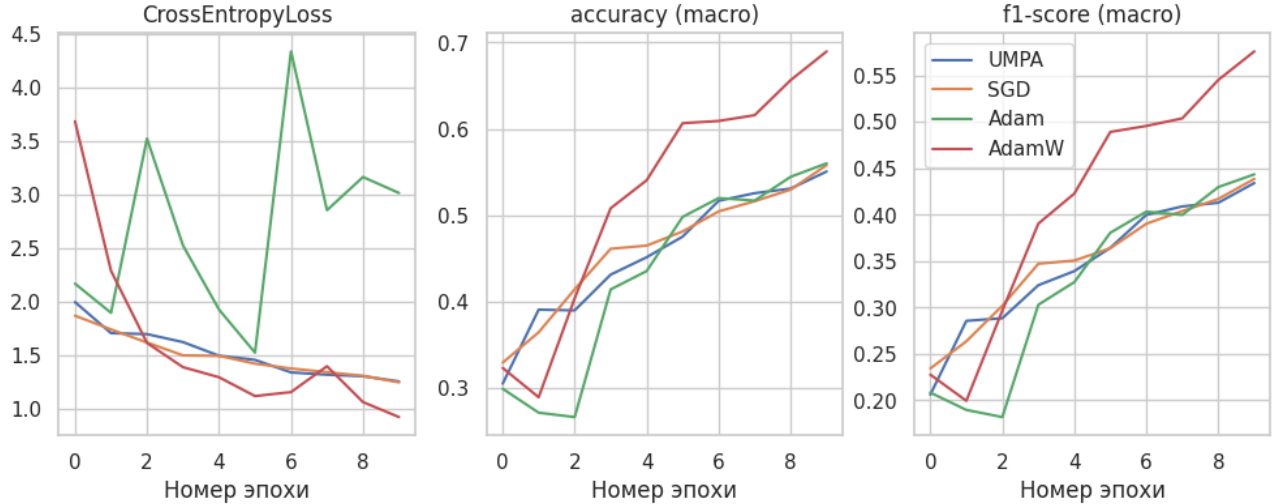
CIFAR10 - это датасет образцов объектов из 10 классов (самолёт, автомобиль, птица, кот, олень, собака, лягушка, лошадь, корабль и грузовик), содержащий в себе 50000 тренировочных и 10000 тестовых цветных картинок размера 32x32, каждая подписана соответствующим классом.

В качестве оптимизаторов рассмотрим SGD, Adam, AdamW и наш универсальный проксимальный зеркальный метод UMPA.

По графикам видим, что на датасете MNIST наш метод получил значительно более хорошее качество, и на датасете CIFAR10 лучшее качество получил AdamW, а наш метод показал результаты, схожие с SGD. Данный эксперимент показывает, что наш универсальный проксимальный зеркальный метод может быть успешно использован для задач классической минимизации.



Сравнение метрик оптимизаторов на валидации при обучении resnet50 датасете MNIST



Сравнение метрик оптимизаторов на валидации при обучении resnet50 датасете CIFAR10

5 Заключение

В данной работе мы показываем известные улучшения проксимального зеркального метода [13] и предлагаем свой универсальный вариант, основанный на идеях универсального градиентного спуска из статьи [8]. Мы доказываем теоретическую сходимость универсаль-

ного проксимального зеркального метода и получаем оценку скорости сходимости

$$O\left(\inf_{\nu \in [0,1]} \left(\frac{L_\nu}{\varepsilon}\right)^{\frac{2}{1+\nu}} \frac{D^2}{4}\right).$$

Также мы сравниваем работу метода с известными оптимизаторами на классической задаче минимизации.

В будущем планируется провести больше экспериментов с другими моделями и сравнить работу универсального проксимального зеркального метода с обычным на седловых задачах оптимизации.

6 Список литературы

- [1] Facchinei F., Pang J.S. Finite-Dimensional Variational Inequality and Complementarity Problems. New York: Springer, 2003. V. 1, 2. 693 p
- [2] Y. Nesterov, Smooth minimization of non-smooth functions. Math. Program. 103, 127–152 (2005)
- [3] I. Goodfellow, J. Pouget-Abadie, M. Mirza, B. Xu, D. WardeFarley, S. Ozair, A. Courville and Y. Bengio, Generative adversarial networks. Commun. ACM 63, 139–144 (2020)
- [4] Y. Jin and A. Sidford, Efficiently solving MDPs with stochastic mirror descent. In Proceedings of the 37th International Conference on Machine Learning (ICML), Proc. Mach. Learn. Res. 119, 4890–4900 (2020)
- [5] S. Omidshafiei, J. Pazis, C. Amato, J. P. How and J. Vian, Deep decentralized multi-task multi-agent reinforcement learning under partial observability. In Proceedings of the 34th International Conference on Machine Learning (ICML), Proc. Mach. Learn. Res. 70, 2681–2690 (2017)
- [6] Корпелевич Г.М. Экстраградиентный метод для отыскания седловых точек и других задач Экономика и матем. методы. Т. 12. № 4. С. 747–756.
- [7] Nemirovski A. Prox-method with rate of convergence $O(1/T)$ for variational inequalities with Lipschitz continuous monotone operators and smooth convex-concave saddle point problems SIAM Journal on Optimization. 2004. V. 15. P. 229–251.
- [8] Anton Rodomanov Ali Kavis Yongtao Wu Kimon Antonakopoulos Volkan Cevher Universal Gradient Methods for Stochastic Convex Optimization. 2024.
- [9] Bach F., Levy K. Y. A universal algorithm for variational inequalities adaptive to smoothness and noise // arXiv:1902.01637.
- [10] Iusem A. N. et al. Variance-based extragradient methods with line search for stochastic variational inequalities // SIAM Journal on Optimization. 2019. V. 29, № 1. С. 175–206.
- [11] Kaiming He, Xiangyu Zhang, Shaoqing Ren, Jian Sun, Deep Residual Learning for Image Recognition // arXiv:1512.03385, 2015
- [12] Fedor Stonyakin, Alexander Gasnikov, Pavel Dvurechensky, Alexander Titov, Mohammad Alkousa, Generalized Mirror Prox Algorithm for Monotone Variational Inequalities: Universality and Inexact Oracle // Journal of Optimization Theory and Applications (2022) 194:988–1013

[13] Nemirovski, A.: Prox-method with rate of convergence $o(1/t)$ for variational inequalities with Lipschitz continuous monotone operators and smooth convex-concave saddle point problems. SIAM J. Optim. 15(1), 229–251 (2004)