
Жадный метод оптимизации первого порядка с относительным шумом

Рубцов Денис
rubtsov.dn@phystech.edu

Корнилов Никита
kornilov.nm@phystech.edu

Abstract

Работа посвящена жадному методу гладкой выпуклой оптимизации первого порядка с градиентами, известными лишь с некоторой относительной погрешностью. С помощью численной техники PER получена эмпирическая гипотеза о влиянии этой погрешности на скорость сходимости метода.

Ключевые слова : методы оптимизации первого порядка, жадные методы, неточный градиент, относительный шум, Performance Estimation Problem, машинное обучение

1 Введение

В данной статье изучаются методы гладкой выпуклой оптимизации первого порядка. Их изучение актуально в связи с высоким успехом их применения во многих приложениях, в том числе в машинном обучении (см., например, в Bottou and Bousquet [2007]). Эти методы (например, Adam (Kingma and Ba [2014])) позволяют эффективно решать задачи многомерной оптимизации, в том числе и невыпуклой.

Во многих ситуациях алгоритмы не имеют доступа к точному градиенту. Так, например, бывает, когда для того, чтобы получить значение градиента, требуется решить другую сложную задачу (например, решить дифференциальное уравнение, см. в Matyukhin et al. [2021]). В данной статье мы сосредоточимся на случае, когда градиенты известны с некоторой относительной погрешностью $\varepsilon \in [0, 1]$:

$$\|\tilde{\nabla} f(x) - \nabla f(x)\|_2 \leq \varepsilon \|\nabla f(x)\|_2.$$

Часто доказательства скорости сходимости методов оптимизации носят неинтуитивный, техничный характер. Они представляют собой цепочку длинных нетривиальных неравенств, оценивающих наилучший случай. Численное решение задачи поиска наилучшего случая может быть осуществлено с помощью техники Performance Estimation Problem (далее – PER, см. в Goujaud et al. [2022], Taylor et al. [2017], Taylor [2017]), которая применяется с этой целью и в данной статье.

1.1 Определения и обозначения

В данной работе будут решаться задачи оптимизации в следующих предположениях на исследуемые функции f .

Предположение 1 Функция f – μ -сильно выпукла, если существует константа $\mu > 0$ такая, что:

$$f(y) \geq f(x) + \langle \nabla f(x), y - x \rangle + \frac{\mu}{2} \|y - x\|_2^2, \quad x, y \in \mathbb{R}^n. \quad (1)$$

Предположение 2 Функция f – L -гладкая, если существует константа $L > 0$ такая, что:

$$f(y) \leq f(x) + \langle \nabla f(x), y - x \rangle + \frac{L}{2} \|y - x\|_2^2, \quad \forall x, y \in \mathbb{R}^n, \quad (2)$$

или (эквивалентно)

$$\|\nabla f(y) - \nabla f(x)\|_2 \leq L \|y - x\|_2, \quad \forall x, y \in \mathbb{R}^n. \quad (3)$$

Множество μ -сильно выпуклых L -гладких функций будем обозначать $\mathcal{F}_{\mu,L}$.

Предположение 3 Будем говорить, что мы имеем доступ к градиенту функции f с некоторой относительной погрешностью $\varepsilon \in [0, 1]$, если

$$\|\tilde{\nabla}f(x) - \nabla f(x)\|_2 \leq \varepsilon \|\nabla f(x)\|_2 \quad \forall x \in \mathbb{R}^n. \quad (4)$$

Здесь $\nabla f(x)$ — точное значение градиента функции f в точке x , а $\tilde{\nabla}f(x)$ — доступное нам зашумленное значение градиента.

1.2 Жадный метод оптимизации первого порядка (GFOM)

Классические методы оптимизации первого порядка включают в себя градиентный спуск (GD, Cauchy et al. [1847]), метод тяжелого шарика Б.Т. Поляка (HB, Polyak [1963]) и ускоренный метод Ю.Е. Нестерова (NAG, Nesterov [1983]). Так, итерация метода градиентного спуска записывается в следующем виде:

$$x_{k+1} = x_k - \alpha \nabla f(x_k). \quad (\text{GD})$$

Итерация метода тяжелого шарика:

$$x_{k+1} = x_k - \alpha \nabla f(x_k) + \beta(x_k - x_{k-1}). \quad (\text{HB})$$

Итерация ускоренного метода Ю.Е. Нестерова:

$$x_{k+1} = x_k - h \nabla f(x_k + \frac{k-1}{k+2}(x_k - x_{k-1})) + \frac{k-1}{k+2}(x_k - x_{k-1}). \quad (\text{NAG})$$

В каждом из этих методов результат k -ой итерации x_k линейно выражается через результаты предыдущих итераций $(x_s)_{s < k}$ и предыдущие ответы оракула $(\nabla f(x_s))_{s < k}$. В случае методов оптимизации первого порядка ответы оракула — это градиенты $\nabla f(x)$ или неточные градиенты $\tilde{\nabla}f(x)$.

Так и жадный метод оптимизации первого порядка (Greedy first-order method GFOM, см. в Drori and Taylor [2020]) результат k -ой итерации x_k выражает через начальную точку x_0 и линейную комбинацию (span) градиентов на предыдущих шагах $(\nabla f(x_s))_{s < k}$

$$x_k = \arg \min_{x \in \mathbb{R}^n} \{f(x) : x \in x_0 + \text{span}\{\nabla f(x_0), \dots, \nabla f(x_{k-1})\}\}. \quad (\text{GFOM})$$

Таким образом, на каждой итерации GFOM жадно находит оптимальную линейную комбинацию градиентов функции в точках, полученных на предыдущих итерациях. Оптимальность здесь имеется в виду в смысле минимальности значения функции на этой комбинации.

2 Постановка задачи

Мы решаем задачу безусловной оптимизации

$$x_\star = \arg \min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x). \quad (5)$$

Конкретнее, решаем задачу поиска точки минимума x_\star функции $f(x)$ из класса $\mathcal{F}_{\mu,L}$ μ -сильно выпуклых L -гладких функций на пространстве \mathbb{R}^n .

Эту задачу будем решать модифицированной версией (NoisyGFOM) метода GFOM, в которой мы имеем доступ к градиентам лишь с относительной погрешностью.

$$x_k = \arg \min_{x \in \mathbb{R}^n} \{f(x) : x \in x_0 + \text{span}\{\tilde{\nabla}f(x_0), \dots, \tilde{\nabla}f(x_{k-1})\}\} \quad (\text{NoisyGFOM})$$

Интерес представляет скорость сходимости данного метода. Исследование сходимости мы будем проводить с помощью анализа наихудшего случая, то есть решая следующую задачу:

$$\begin{aligned} & \max_{f \in \mathcal{F}_{\mu,L}, (x_k)_{k \leq N} \in (\mathbb{R}^n)^{N+1}} |f(x_N) - f(x_\star)| \\ & \text{s.t.} \quad \begin{cases} x_0 \in \{x : \|x - x_\star\|_2^2 \leq R^2\} \\ (x_k)_{k \leq N} = x_0 + \text{span}\{(\tilde{\nabla}f(x_k))_{k \leq N}\} \\ \|\tilde{\nabla}f(x) - \nabla f(x)\|_2 \leq \varepsilon \|\nabla f(x)\|_2 \end{cases} \end{aligned} \quad (6)$$

Это задача максимизации невязки $|f(x_N) - f(x_*)|$ на N -ой итерации, в случае когда начальная точка итерационного алгоритма x_0 лежит не очень далеко от искомой точки минимума x_* , а следующие точки итерационного алгоритма сгенерированы с помощью NoisyGFOM. Обратим внимание, что это бесконечномерная задача оптимизации на классе функций $\mathcal{F}_{\mu,L}$. Оказывается, однако, что с помощью плодотворных идей интерполяции (Taylor et al. [2017]), такую задачу можно свести к конечномерной задаче полуопределенного программирования (semidefinite programming, далее — SDP). Эта техника называется Performance Estimation Problem (PEP). Используемый солвер — PEPit (Goujaud et al. [2022]).

3 Вычислительный эксперимент

В данной секции сформулирована гипотеза о зависимости сходимости метода NoisyGFOM в зависимости от шума градиента ε . Продемонстрированы результаты численных экспериментов и сформулированы выводы о непротиворечивости гипотезы.

3.1 Проверяемая гипотеза

Скорость сходимости обычного градиентного спуска (GD):

$$f(x_N) - f(x_*) = O\left(\left(\frac{1 - \frac{\mu}{L}}{1 + \frac{\mu}{L}}\right)^N\right) \quad (7)$$

Скорость сходимости ускоренных методов (включая GFOM, см. Hildebrand et al. [2021]):

$$f(x_N) - f(x_*) = O\left(\left(\frac{1 - \sqrt{\frac{\mu}{L}}}{1 + \sqrt{\frac{\mu}{L}}}\right)^N\right) \quad (8)$$

Сформулируем гипотезу о сходимости метода NoisyGFOM.

Предположение 4 Скорость сходимости метода NoisyGFOM зависит от соотношения $\left(\frac{\mu}{L}\right)^{\alpha(\varepsilon)}$, где $\alpha(\varepsilon)$ — некоторая монотонно возрастающая функция, причем $\alpha|_{\varepsilon=0} = \frac{1}{2}$, а $\alpha|_{\varepsilon=1} = 1$.

$$f(x_N) - f(x_*) = O\left(\left(\frac{1 - \left(\frac{\mu}{L}\right)^{\alpha(\varepsilon)}}{1 + \left(\frac{\mu}{L}\right)^{\alpha(\varepsilon)}}\right)^N\right) \quad (9)$$

То есть при возрастании относительного шума ε от 0 до 1 сходимость метода ухудшается от сходимости ускоренных методов до сходимости обычного градиентного спуска.

3.2 Ход эксперимента

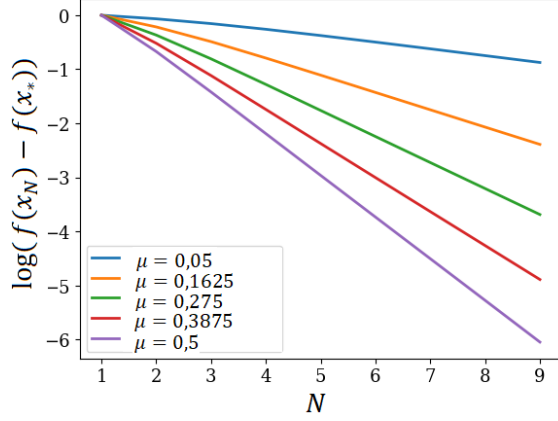
При небольших $\frac{\mu}{L}$ гипотеза принимает следующий вид:

$$f(x_N) - f(x_*) = O\left(\left(1 - 2\left(\frac{\mu}{L}\right)^{\alpha(\varepsilon)}\right)^N\right) \quad (10)$$

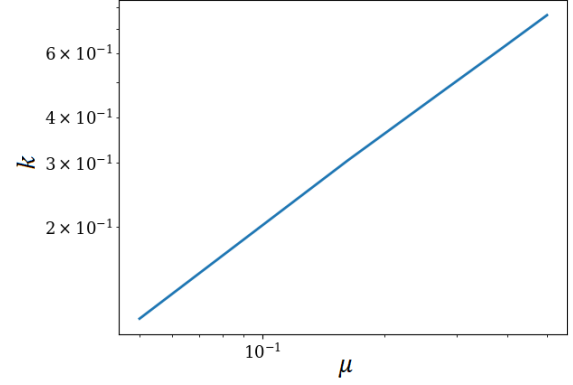
Проверим линейную сходимость алгоритма. Для этого построим график невязки $f(x_N) - f(x_*)$ в зависимости от числа итераций N при фиксированном ε и различных μ . Видно, что при всех μ при больших номерах итераций графики являются прямыми, т.е. сходимость линейная.

При фиксированном ε и $\frac{\mu}{L}$ $\log \|f(x_N) - f_*\| \sim N \cdot k(\varepsilon, \mu)$, где $k(\varepsilon, \mu) = \log\left(1 - 2\left(\frac{\mu}{L}\right)^{\alpha(\varepsilon)}\right) \sim \left(\frac{\mu}{L}\right)^{\alpha(\varepsilon)}$. Тогда $\log k(\varepsilon, \mu) = \alpha(\varepsilon) \log\left(\frac{\mu}{L}\right)$. Из предыдущего графика найдем угловые коэффициенты прямых $k(\varepsilon, \mu)$ для различных μ (с помощью линейной регрессии). Построим график $k(\mu)$ в логарифмическом масштабе. С помощью линейной регрессии определим коэффициент $\alpha(\varepsilon)$.

Повторим эксперимент для различных ε и построим график $\alpha(\varepsilon)$ (2).



(a) График зависимости невязки $(f(x_N) - f_*)$ от номера итерации N при $\varepsilon = 0.5$. Демонстрирует линейную сходимость.



(b) График зависимости графика $k(\mu)$ при $\varepsilon = 0.5$. Демонстрирует зависимость скорости сходимости только лишь от $\left(\frac{\mu}{L}\right)^{\alpha(\varepsilon)}$.

Рис. 1: Вычислительные эксперименты

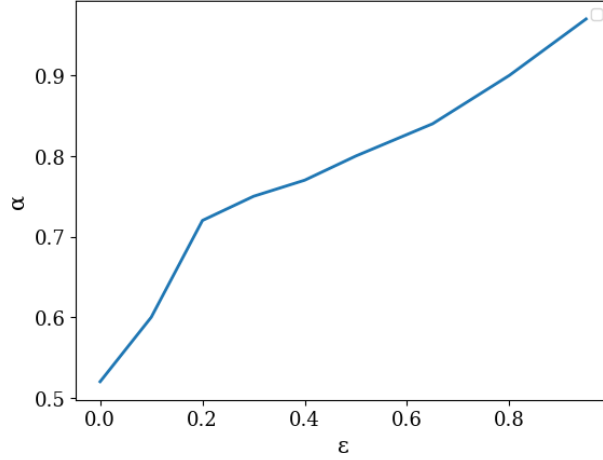


Рис. 2: График зависимости $\alpha(\varepsilon)$.

3.3 Результаты и их обсуждение

Результаты вычислительных экспериментов не противоречат гипотезе. Скорость сходимости метода NoisyGFOM зависит от шума ε . При увеличении шума скорость сходимости падает от быстрой (8) до свойственной обычному градиентному спуску (7). Итак,

$$f(x_N) - f_* = O\left(\left(\frac{1 - \left(\frac{\mu}{L}\right)^{\alpha(\varepsilon)}}{1 + \left(\frac{\mu}{L}\right)^{\alpha(\varepsilon)}}\right)^N\right), \quad \alpha|_{\varepsilon=0} = \frac{1}{2}, \quad \alpha|_{\varepsilon=1} = 1 \quad (11)$$

4 Заключение

В данной работе было исследовано влияние зашумленного градиента (3) на жадный метод оптимизации первого порядка NoisyGFOM. Так, при появлении шума в градиентах метод сохраняет свою линейную сходимость при $\varepsilon \in [0, 1]$, уменьшая скорость сходимости с увеличением шума. При шуме $\varepsilon \approx 1$ скорость сходимости NoisyGFOM совпадает со скоростью сходимости градиентного спуска (7), а при $\varepsilon \approx 0$ — со скоростью сходимости ускоренных методов (8). В наши дальнейшие планы входит теоретическое обоснование полученных экспериментально результатов.

Список литературы

- Léon Bottou and Olivier Bousquet. The tradeoffs of large scale learning. *Advances in neural information processing systems*, 20, 2007.
- Diederik P Kingma and Jimmy Ba. Adam: A method for stochastic optimization. *arXiv preprint arXiv:1412.6980*, 2014.
- Vladislav Matyukhin, Sergey Kabanikhin, Maxim Shishlenin, Nikita Novikov, Artem Vasin, and Alexander Gasnikov. Convex optimization with inexact gradients in hilbert space and applications to elliptic inverse problems. In *International Conference on Mathematical Optimization Theory and Operations Research*, pages 159–175. Springer, 2021.
- Baptiste Goujaud, Céline Moucer, François Glineur, Julien Hendrickx, Adrien Taylor, and Aymeric Dieuleveut. Pepit: computer-assisted worst-case analyses of first-order optimization methods in python. *arXiv preprint arXiv:2201.04040*, 2022.
- Adrien B Taylor, Julien M Hendrickx, and François Glineur. Smooth strongly convex interpolation and exact worst-case performance of first-order methods. *Mathematical Programming*, 161:307–345, 2017.
- Adrien B Taylor. Convex interpolation and performance estimation of first-order methods for convex optimization. PhD thesis, Catholic University of Louvain, Louvain-la-Neuve, Belgium, 2017.
- Augustin Cauchy et al. Méthode générale pour la résolution des systemes d’équations simultanées. *Comp. Rend. Sci. Paris*, 25(1847):536–538, 1847.
- Boris T Polyak. Gradient methods for the minimisation of functionals. *USSR Computational Mathematics and Mathematical Physics*, 3(4):864–878, 1963.
- Yurii Nesterov. A method of solving a convex programming problem with convergence rate $o(1/k^{**2})$. *Doklady Akademii Nauk SSSR*, 269(3):543, 1983.
- Yoel Drori and Adrien B Taylor. Efficient first-order methods for convex minimization: a constructive approach. *Mathematical Programming*, 184(1):183–220, 2020.
- Roland Hildebrand, Eugenia Vorontsova, Alexander Gasnikov, and Fyodor Stonyakin. Выпуклая оптимизация. 2021.