Жадные методы оптимизации первого порядка с относительным шумом

Рубцов Денис
rubtsov.dn@phystech.edu

Корнилов Никита
kornilov.nm@phystech.edu

Abstract

Работа посвящена жадным методам гладкой выпуклой оптимизации первого порядка с градиентами, известными лишь с некоторой относительной погрешностью. С помощью численной техники PEP была получена эмпирическая гипотеза о влиянии этой погрешности на скорость сходимости методов.

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 улучшить процесс обучения, что делает их особенно важными для решения сложных задач.

Во многих ситуациях алгоритмы не имеют доступа к точной информации о градиенте. 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 ситуации, когда градиенты известны с некоторой относительной погрешностью $\varepsilon \in [0, 1]$:

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

Часто доказательства скорости сходимости методов оптимизации носят неинтуитивный, техничный характер. Они представляют собой цепочку длинных нетривиальных неравенств, оценивающих наихудший случай. Численное решение задачи поиска наихудшего случая может быть осуществлено с помощью техники Performance Estimation Problem (далее – PEP, 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

Определение 1.1 Скалярное произведение векторов $x, y \in \mathbb{R}^n : \langle x, y\rangle := \sum\limits_{k=1}^{n} x_k y_k$.

Определение 1.2 ℓ_2-норма элемента $x \in \mathbb{R}^n : \|x\|_2 := \langle x, x\rangle = \left(\sum\limits_{k=1}^{n} x_k^2\right)^{1/2}$.

Определение 1.3 Линейной оболочкой векторов $v_1, ..., v_N \in \mathbb{R}^n$ называется множество всех их линейных комбинаций $\alpha_1 v_1 + ... + \alpha_N v_N \in \mathbb{R}^n$. Обозначение - $\mathrm{span}\{v_1, ..., v_N\}$.

Определение 1.4 Функция f выпукла, если

$$f(y) \geq f(x) + \langle \nabla f(x), y - x\rangle, \quad \forall x, y \in \mathbb{R}^n. \tag{1}$$

Таблица 1: Список обозначений, используемых в работе

$\mathcal{F}_{\mu,L}$	Класс μ-сильно выпуклых L-гладких функций
f	Исследуемая функция
$x_\star$	Точка минимума
x_0	Начальная точка
k	Номер текущей итерации алгоритма
N	Полное число итераций алгоритма
$\mathcal{O}^{(f)}$	Ответ оракула
$\mathcal{A}$	Алгоритм (правило генерации последовательностей $(x_k)_{k\le N}$ приближений точки минимума $x_\star$ функции f)
$(x_k)_{k\le N}$	Последовательность точек

Определение 1.5 Функция f - μ-сильно выпукла, если существует константа $\mu > 0$ такая, что:

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

Определение 1.6 Функция f — L-гладкая, если существует константа $L > 0$ такая, что:

$$f(y) \leq f(x) + \langle \nabla f(x), y - x\rangle + \frac{L}{2}\|y-x\|_2^2, \quad \forall x, y \in \mathbb{R}^n, \tag{3}$$

или (эквивалентно)

$$\|\nabla f(y) - \nabla f(x)\|_2 \leq L\|y-x\|_2, \quad \forall x, y \in \mathbb{R}^n. \tag{4}$$

Определение 1.7 Будем говорить, что мы имеем доступ к градиенту функции f с некоторой относительной погрешностью $\varepsilon \in [0,1]$, если

$$\|\widetilde{\nabla} f(x) - \nabla f(x)\|_2 \leq \varepsilon\|\nabla f(x)\|_2 \ \forall x \in \mathbb{R}^n. \tag{5}$$

Здесь $\nabla f(x)$ – точное значение градиента функции f в точке x, а $\widetilde{\nabla} f(x)$ - 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:

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

Итерация метода тяжелого шарика:

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

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 $(\mathcal{O}^{(f)}(x_s))_{s<k}$. Напомним, что в случае методов оптимизации первого порядка ответы оракула - это градиенты $\mathcal{O}^{(f)}(x) = \nabla f(x)$ или неточные градиенты $\mathcal{O}^{(f)}(x) = \widetilde{\nabla} f(x))$.

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 через градиенты на предыдущих шагах $(\mathcal{O}^{(f)}(x_s))_{s<k}$

$$x_k = \underset{x\in\mathbb{R}^n}{\arg\min}\{f(x) : x \in x_0 + \mathrm{span}\{\ \nabla f(x_0), ..., \nabla f(x_{k-1})\}\} \tag{GFOM}$$

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

2 Постановка задачи

Мы решаем задачу безусловной оптимизации

$$x_\star = \arg\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) \tag{6}$$

Функция $f(x) \in \mathcal{F}_{\mu,L}$.

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

$$x_k = \arg\min_{x \in \mathbb{R}^n} \{ f(x) : x \in x_0 + \mathrm{span}\{ \widetilde{\nabla} f(x_0), ..., \widetilde{\nabla} f(x_{k-1}) \} \} \tag{NoisyGFOM}$$

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

$$\max_{f \in \mathcal{F}_{\mu,L},\ (x_k)_{k \le N} \in (\mathbf{R}^n)^{N+1}} \| f(x_N) - f_\star \| \tag{7}$$

$$\text{s.t.} \begin{cases} x_0 \in \{x : \|x - x_\star\|_2^2 \le R^2\} \\ (x_k)_{k \le N} = x_0 + \mathrm{span}\{(\widetilde{\nabla} f(x_k)\}_{k \le N}\} \\ \|\widetilde{\nabla} f(x) - \nabla f(x)\|_2 \le \varepsilon \|\nabla f(x)\|_2 \end{cases}$$

Обратим внимание, что эта задача является бесконечномерной задачей 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). Используемые солверы - PEPit (Goujaud et al. [2022]) и Mosek(ApS [2019]). Эту бесконечномерную задачу оптимизации на пространстве функций можно решить, используя технику PEP.

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 разумности гипотезы.

3.1 Проверяемая гипотеза

Обычный GFOM (как и многие другие ускоренные методы оптимизации) имеет следующую сходимость (Hildebrand et al. [2021]):

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

При наличии шума логично предположение, что сходимость будет ухудшаться. При большой относительной погрешности ε градиентов, сходимость ухудшится до сходимости обычного градиентного спуска (GD):

$$f(x_N) - f(x_\star) = O\left(\left(\frac{L - \mu}{L + \mu} \right)^N \right) \tag{9}$$

Сформулируем гипотезу о сходимости метода NoisyGFOM.

Предположение 1 Скорость сходимости метода 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 $\alpha|_{\varepsilon \to 1} \to 1$.

$$f(x_N) - f(x_\star) = O\left(\left(\frac{1 - \left(\frac{\mu}{L}\right)^{\alpha(\varepsilon)}}{1 + \left(\frac{\mu}{L}\right)^{\alpha(\varepsilon)}} \right)^N \right) \tag{10}$$

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

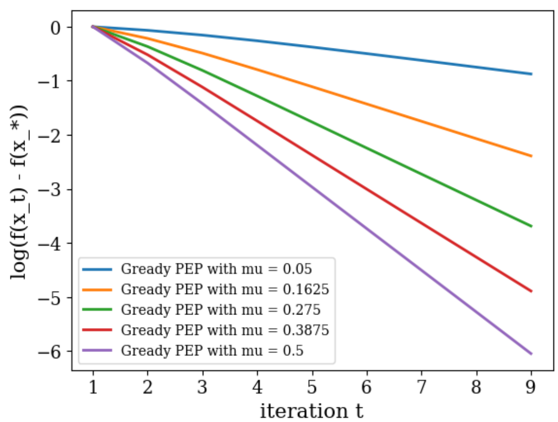
3.2 Ход эксперимента

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

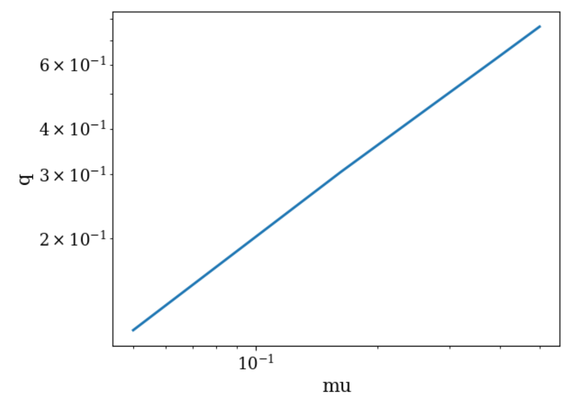
$$f(x_N) - f(x_\star) = O\left(\left(1 - 2\left(\frac{\mu}{L}\right)^{\alpha(\varepsilon)}\right)^N\right) \tag{11}$$

Проверим линейную сходимость алгоритма. Для этого построим график невязки $f(x_N) - f(x_\star)$ 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 $\frac{\mu}{L}$ $\log \|f(x_N) - f_\star\| \sim N \cdot k(\varepsilon, \mu)$, 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 лог-лог-масштабе. Убедимся в его линейности. С помощью линейной регрессии определим коэффициент $\alpha(\varepsilon)$.



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



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

Рис. 1: Вычислительные эксперименты

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

3.3 Результаты и их обсуждение

Вычислительные эксперименты подтвердили гипотезу. Скорость сходимости метода NoisyGFOM зависит от шума ε. При увеличении шума скорость сходимости падает от быстрой (8) до свойственной обычному градиентному спуску (9). Итак,

$$f(x_N) - f_\star = O\left(\left(\frac{1 - \left(\frac{\mu}{L}\right)^{\alpha(\varepsilon)}}{1 + \left(\frac{\mu}{L}\right)^{\alpha(\varepsilon)}}\right)^N\right), \ \alpha|_{\varepsilon=0} = \frac{1}{2}, \ \alpha|_{\varepsilon\to1} \to 1 \tag{12}$$

4 Заключение

В данной работе было исследовано влияние зашумленного градиента (1.7) 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 (9). В наши дальнейшие планы входит теоретическое обоснование полученных экспериментально результатов.

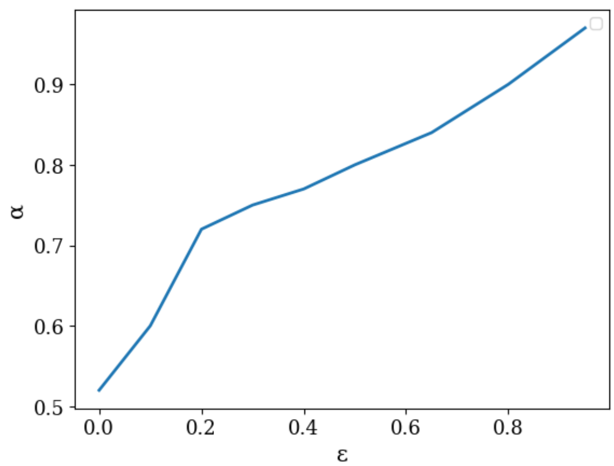


Рис. 2: График зависимости $\alpha(\varepsilon)$

.

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.

Mosek ApS. Mosek optimization toolbox for matlab. User's Guide and Reference Manual, Version, 4(1), 2019.

Roland Hildebrand, Eugenia Vorontsova, Alexander Gasnikov, and Fyodor Stonyakin. Выпуклая оптимизация. 2021.