Ускоренные методы нулевого порядка в гладкой выпуклой стохастической оптимизации

Xафизов Φ анис khafizov.fa@phystech.edu

Богданов Александр bogdanov.ai@phystech.edu

Безносиков Александр beznosikov.an@phystech.edu

Аннотация

Данная работа посвящена задачи оптимизации без доступа к градиенту целевой функции f(x), из-за чего нам надо как-то его оценивать. Рассматривается безградиентный метод JAGUAR, использующий информацию о предыдущих вызовах и требует $\mathcal{O}(1)$ оракульных вызовов. Мы применяем эту аппроксимацию в ускоренном методе градиентного спуска и докажем его сходимость для выпуклой задачи оптимизации. Также сравним метод JAGUAR с другими известными способами на экспериментах.

Ключевые слова методы нулевого порядка, стохастическая оптимизация

1 Введение

1.1 Мотивания

Стохастические градиентные методы являются необходимыми в решении различных оптимизационных задач. Однако в нынешних проблемах машинного обучения возникает потребность оценивать градиент, ввиду, например, дороговизны его подсчета, либо же незнания явного вида минимизируемой функции. Тогда на помощь приходят методы нулевого порядка. Так как имеется доступ только к значениям целевой функции f в различных точках $x \in \mathbb{R}^d$, то необходимо строить методы, аппроксимирующие градиент, используя конечные суммы значений целевой функции.

Одним из возможных усложнений задачи является добавление шума к оракулу: вместо f(x) он будет возвращать $f(x) + \delta(x)$. Более того, виды шума разделяются на стохастический [6] или детерминированный [5].

Другую важную роль в решении оптимизационных задач играют ускоренные методы. Они как правило имеют более быструю сходимость по сравнению со стандартными алгоритмами. Предложенный Нестеровым [7] быстрый градиентный метод является классическим примером.

1.2 Смежные работы

Впервые метод JAGUAR аппроксимации градиента был предложен в [1], доказана сходимость для методов Франка-Вульфа и градиентного спуска для невыпуклой, выпуклой, и сильно-выпуклой задач. Также есть модификация алгоритма Франка-Вульфа для стохастического случая (рассмотрены случаи one-point feedback и two-point feedback).

В работе [2] рассмотрены ускоренные методы первого порядка в невыпуклых и сильно выпуклых задачах оптимизации, содержащих марковский шум. Там при аппроксимации градиента использовался рандомизированный размер батча. Результаты и подходы оттуда адаптированы под метод JAGUAR в данной работе.

State-of-the-art решения в области безградиентной оптимизации собраны в [3]. Представлены рандомизированные методы нулевого порядка, однако лишь для нестохастического случая.

Ускоренный безградиентный метод в гладкой выпуклой стохастической оптимизации был предложен в [4], но лишь в случае two-point feedback, который далеко не всегда реализуется на практике.

1.3 Предложения

Предлагается ускоренный метод, в качестве аппроксимации градиента использующий JAGUAR. Для него получены теоремы о скорости сходимости при разных ограничениях на целевую функцию (выпуклая, сильно-выпуклая, невыпуклая). Теоретическая часть подкреплена численным экспериментом: классификация на датасете небольшого размера и минимизация квадратичной функции. Проведено сравнение с методами l_2 -smoothing и полной аппроксимацией градиента.

2 Постановка задачи

Как уже было упомянуто, задача подразделяется на детерминированный случай, когда f_{δ} зависит только от x, и стохастический, в котором есть зависимость от случайного вектора $\xi \sim \pi$.

2.1 Детерминированный случай

В этом разделе рассматривается детерминированная задача оптимизации:

$$\min_{x \in \mathbb{R}^d} f(x). \tag{1}$$

Мы полагаем, что есть доступ только к оракулу нулевого порядка, то есть, мы можем получать только значения f(x), но не градиента $\nabla f(x)$. Следовательно, нужно как-то аппроксимировать градиент $\nabla f(x)$. Также предполагается, что оракул возвращает

$$f_{\delta}(x) = f(x) + \delta(x). \tag{2}$$

Для аппроксимации градиента используется следующая разностная схема:

$$\widetilde{\nabla}_i f_{\delta}(x) := \frac{f_{\delta}(x + \tau e_i) - f_{\delta}(x - \tau e_i)}{2\tau} e_i, \tag{3}$$

где e_i — вектор из стандартного базиса в \mathbb{R}^d , $\tau > 0$ — достаточно мало.

2.2 Стохастический случай

В этом же разделе рассматривается более общая стохастическая задача:

$$\min_{x \in \mathbb{R}^d} f(x) := \mathsf{E}_{\xi \sim \pi}[f(x,\xi)],\tag{4}$$

где ξ — случайный вектор из неизвестного распределения π . Здесь мы так же считаем, что у нас нет доступа к градиенту $\nabla f(x,\xi)$, а оракул нулевого порядка возвращает зашумленное значение функции $f_{\delta}(x,\xi) := f(x,\xi) + \delta(x,\xi)$.

Разделяются два вида аппроксимации градиента в стохастическом случае:

• Two-point feedback (TPF)

$$\widetilde{\nabla}_i f_{\delta}(x,\xi) := \frac{f_{\delta}(x + \tau e_i, \xi) - f_{\delta}(x - \tau e_i, \xi)}{2\tau} e_i, \tag{5}$$

• One-point feedback (OPF)

$$\widetilde{\nabla}_i f_{\delta}(x, \xi^+, \xi^-) := \frac{f_{\delta}(x + \tau e_i, \xi^+) - f_{\delta}(x - \tau e_i, \xi^-)}{2\tau} e_i, \tag{6}$$

где $\xi, \xi^+, \xi^- \sim \pi$, e_i — базисный вектор в R^d , $\tau > 0$ — достаточно мало. В случае TPF в обоих точках, где мы вызываем оракула, одно и то же значение ξ , что может быть тяжело реализуемо. Также TPF является частным случаем OPF ($\xi^+ = \xi^- = \xi$).

3 Основные результаты

Для доказательств сходимости нам требуется сделать несколько предположений о функции f и об оракуле f_{δ} .

Предположения

А 1 (Гладкость). Функция f является L-гладкой на \mathbb{R}^d с константой L>0, т.е.:

$$\exists L > 0 : \forall x, y \in \mathbb{R}^d \hookrightarrow \|\nabla f(x) - \nabla f(y)\| \leqslant L\|x - y\|. \tag{7}$$

А 2 (Сильная выпуклость). Функция f является μ -сильно выпуклой на \mathbb{R}^d , т.е.:

$$\exists \mu > 0 : \forall x, y \in \mathbb{R}^d \hookrightarrow \frac{\mu}{2} ||x - y||^2 \leqslant f(x) - f(y) - \langle \nabla f(y), x - y \rangle. \tag{8}$$

А 3 (Ограниченность оракульного шума). Оракульный шум ограничен некоторой константой $\Delta > 0$,

$$\exists \Delta > 0 : \forall x \in \mathbb{R}^d \hookrightarrow |\delta(x)| \leqslant \Delta. \tag{9}$$

3.2 Алгоритм

Предлагается следующая версия ускоренного градиентного метода с аппроксимацией вида (3), взятой по каждой координате.

Algorithm 1 Accelerated Gradient Descent

Require: stepsize $\gamma > 0$, momentums θ, η, β, p , number of iterations N, approximation parameter $\tau > 0$. Initialization: choose $x^0 = x_f^0$

1: for
$$k = 0, 1, ..., N - 1$$
 do
2: $x_q^k = \theta x_f^k + (1 - \theta) x^k$

2:
$$x_q^k = \theta x_f^k + (1 - \theta) x^k$$

3:
$$g^k = \sum_{i=1}^k \frac{f_\delta(x_g^k + \tau e_i) - f_\delta(x_g^k - \tau e_i)}{2\tau} e_i$$

4:
$$x_f^{k+1} = x_g^k - p\gamma g^k$$

3:
$$g^{k} = \sum_{i=1}^{k} \frac{f_{\delta}(x_{g}^{k} + \tau e_{i}) - f_{\delta}(x_{g}^{k} - \tau e_{i})}{2\tau} e_{i}$$
4:
$$x_{f}^{k+1} = x_{g}^{k} - p\gamma g^{k}$$
5:
$$x^{k+1} = \eta x_{f}^{k+1} + (p-\eta)x_{f}^{k} + (1-p)(1-\beta)x^{k} + (1-p)\beta x_{g}^{k}$$

При доказательстве сходимости понадобится следующая лемма.

Lemma 1. Предположим A 1 - A 3. Тогда для аппроксимации градиента q^k в алгоритме 1 выполняется

$$\|\nabla f(x_g^k) - g^k\|^2 \leqslant d(\frac{L\tau}{2} + \frac{\Delta}{\tau}). \tag{10}$$

Сформулируем теорему о сходимости метода на описанном классе функций.

Theorem 1 (Сходимость (1) в случае детерминированного шума). Предположим A 1 - A 3. Тогда ускоренный градиентный спуск (Algorithm 1) имеет скорость сходимости на задаче (1):

$$\mathbb{E}\left[\|x^{N} - x^{*}\|^{2} + \frac{6}{\mu}(f(x_{f}^{N}) - f(x^{*}))\right] \leqslant \exp\left(-N\sqrt{\frac{p^{2}\mu\gamma}{3}}\right) \left(\|x^{0} - x^{*}\|^{2} + \frac{6}{\mu}(f(x_{f}^{0}) - f(x^{*}))\right) + \frac{6}{\mu}\sqrt{\frac{3}{\mu L}}\left(1 + 2\sqrt{\frac{3}{\mu\gamma}}\right) d\left(\frac{L\tau}{2} + \frac{\Delta}{\tau}\right)^{2},\tag{11}$$

где $\gamma \in (0, \frac{3}{4L}], \beta, \theta, \eta, p$ такие, что:

$$p \simeq (2(1+\gamma L))^{-1}, \beta \simeq \sqrt{p^2 \mu \gamma}, \eta \simeq \sqrt{\frac{1}{\mu \gamma}}, \theta \simeq \frac{p\eta^{-1} - 1}{\beta p\eta^{-1} - 1}.$$
 (12)

Вычислительный эксперимент

В эксперименте рассматриваются две задачи: минимизация квадратичной функции и логистическая регрессия на датасете mushrooms. Ускоренный градиентный спуск сравнивается со стандартным градиентным спуском и с методом Нестерова. В качестве аппроксимации градиента используется разностная схема (3), взятая по каждому базисному вектору e_i , $i = \overline{1, d}$.

В ходе последующих экспериментов рассматривался детерминированный шум в виде округления до 6 знаков после запятой (шум ограничен 10^{-6} по абсолютной величине), и параметр $\tau = 10^{-5}$.

4.1 Квадратичная задача

В качестве целевой функции выступает

$$f(x) = x^T A x - b^T x + c, (13)$$

где $A\in\mathbb{S}_d$ — случайная симметричная матрица с собственными значениями на отрезке $[\mu,L],\,b\in\mathbb{R}^d,c\in\mathbb{R}$ — случайные.

Все методы запускаются из одной и той же случайной точки $x^0 \in \mathbb{R}^d$. Сходимость рассматриваем по аргументу целевой функции $\frac{\|x^k-x^*\|}{\|x^0-x^*\|}$ (OracleCalls(k)), где x^k — значение аргумента на k-й итерации, x^* — точка оптимума, найденная численно, x^0 — стартовая точка алгоритма, OracleCalls(k) — суммарное количество вызовов оракула за k итераций.

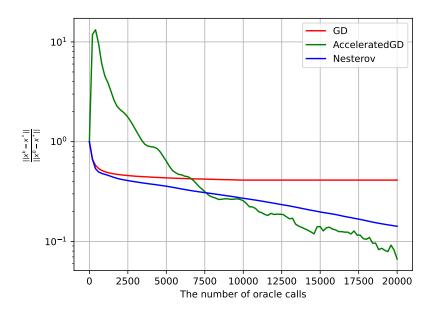


Рис. 1: Зависимость относительной ошибки $\frac{\|x^k - x^*\|}{\|x^0 - x^*\|}$ от числа оракульных вызовов для методов градиентного спуска, ускоренного градиентного спуска и Нестерова на квадратичной задаче минимизации

4.2 Логистическая регрессия

Оптимизируется модель логистической регрессии с L_2 -регуляризацией вида

$$\min w \in R^d f(w) = \frac{1}{m} \sum_{k=1}^m \log(1 + \exp(-y_k \cdot (Xw)_k)) + \lambda ||w||_2^2, \tag{14}$$

где взято $\lambda = 0, 1$.

В логистической регрессии используется датасет mushrooms из библиотеки LibSVM. В качестве осей графика применяются $\|\nabla f(x^k)\|$ (OracleCalls(k)).

4.3 Предварительный отчет

В проведенных экспериментах ускоренный метод показал себя лучше других, хотя, например, в квадратичной задаче поначалу он ведет себя намного хуже. В задаче логистической регрессии предложенный метод сильно обходит остальные методы.

Список литературы

[1] Vladislav Minashkin Aleksandr Beznosikov Alexander Gasnikov Andrey Veprikov, Alexander Bogdanov. New aspects of black box conditional gradient: Variance reduction and one point feedback, 2024.

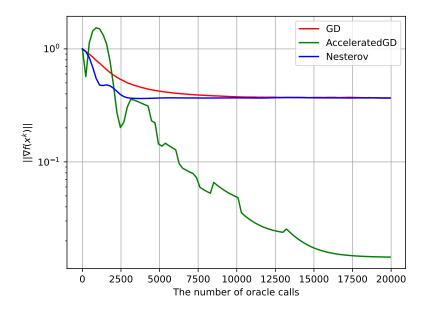


Рис. 2: Зависимость относительной ошибки $\|\nabla f(x^k)\|$ от числа оракульных вызовов для методов градиентного спуска, ускоренного градиентного спуска и Нестерова на задаче логистической регрессии

- [2] Aleksandr Beznosikov, Sergey Samsonov, Marina Sheshukova, Alexander Gasnikov, Alexey Naumov, and Eric Moulines. First order methods with markovian noise: from acceleration to variational inequalities, 2023.
- [3] Alexander Gasnikov, Darina Dvinskikh, Pavel Dvurechensky, Eduard Gorbunov, Aleksander Beznosikov, and Aleksandr Lobanov. Randomized gradient-free methods in convex optimization, 2024.
- [4] Eduard Gorbunov, Pavel Dvurechensky, and Alexander Gasnikov. An accelerated method for derivative-free smooth stochastic convex optimization, 2020.
- [5] Aleksandr Lobanov, Anton Anikin, Alexander Gasnikov, Alexander Gornov, and Sergey Chukanov. Zero-order stochastic conditional gradient sliding method for non-smooth convex optimization, 2023.
- [6] Aurelien Lucchi, Frank Proske, Antonio Orvieto, Francis Bach, and Hans Kersting. On the theoretical properties of noise correlation in stochastic optimization, 2022.
- [7] Yurii Nesterov. A method for solving the convex programming problem with convergence rate $o(1/k^2)$. Proceedings of the USSR Academy of Sciences, 269:543–547, 1983.