Методы оптимизации

Regularized Nonlinear Acceleration

Чернис Константин, группа 694

Содержание

В данном проекте представлен алгоритм нелинейного ускорения итерационных методов. Также теоретически и экспериментально исследовано влияние алгоритма на скорость сходимости различных методов первого и второго порядков.

Для начала рассмотрим более простой алгоритм ускорения, а именно, ускорение Андерсона.

1. Anderson acceleration

Пусть необходимо решить задачу оптимизации:

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x),$$

где $f(x)$ сильно выпукла с константой μ, а её градиент липшецев с константой L. Будем искать решение с помощью метода неподвижной точки:

$$x_{i+1} = g(x_i), \quad i = \overline{0, k} \tag{1}$$

Пусть $g(x)$ дифференцируема и G — матрица Якоби функции g в точке x^*. Далее считаем G симметричной положительно определённой матрицей, $G \preceq \sigma I$, где $\sigma < 1$. Тогда из (1) получаем линейный метод неподвижной точки:

$$x_{i+1} = g(x^*) + G(x_i - x^*) + O\left(\|x_i - x^*\|_2^2\right), \quad i = \overline{1, n} \tag{2}$$

Пренебрегая вторым порядком малости и учитывая, что x^* — неподвижная точка $g(x)$, то есть $g(x^*) = x^*$, получаем

$$x_{i+1} - x^* = G(x_i - x^*)$$

В силу того, что $\|G\|_2 \leqslant \sigma < 1$, получаем линейную скорость сходимости:

$$\|x_i - x^*\|_2 \leqslant \sigma \|x_{i-1} - x^*\|_2 \leqslant \sigma^i \|x_0 - x^*\|_2$$

Рассмотрим линейную комбинацию x_i после k итераций:

$$\sum_{i=0}^{k} c_i x_i = \sum_{i=0}^{k} c_i x^* + \sum_{i=0}^{k} c_i G(x_i - x^*) = \left(\sum_{i=0}^{k} c_i\right) x^* + \left(\sum_{i=0}^{k} c_i G^i\right)(x_0 - x^*)$$

и определим многочлен

$$p(z) := \sum_{i=0}^{k} c_i z^i$$

Теперь линейную комбинацию можно записать с помощью матричного многочлена $p(G)$, добавив ограничение $p(1) = \sum_{i=0}^{k} c_i = 1$:

$$\sum_{i=0}^{k} c_i x_i = x^* + \underbrace{p(G)(x_0 - x^*)}_{\text{ошибка}} \tag{3}$$

Будем искать коэффициенты c (или p соответственно), которые минимизируют ошибку:

$$c^\star = \underset{\{c \in \mathbb{R}^{k+1} : c^\mathsf{T} \mathbf{1} = 1\}}{\arg\min} \left\| \sum_{i=0}^{k} c_i G^i (x_0 - x^*) \right\|_2 = \underset{\{p \in \mathbb{R}_k[x] : p(1) = 1\}}{\arg\min} \|p(G)(x_0 - x^*)\|_2$$

где $\mathbb{R}_k[x]$ — пространство многочленов степени не выше k.

Следующее предложение даёт оценку сверху на размер ошибки:

Предложение 1.1. Пусть

1. последовательность x_i, $i = \overline{0, n}$, получена из (2);
2. G — симметричная матрица Якоби g, для которой выполнено $0 \preceq G \preceq \sigma I, \sigma < 1$;
3. x^* — неподвижная точка g.

Тогда l_2 норма ошибки (3) ограничена:

$$\left\| \sum_{i=0}^{k} c_i^{\star} x_i - x^* \right\|_2 \leqslant \begin{cases} \dfrac{2\beta^k}{1+\beta^{2k}} \|x_0 - x^*\|_2, & \text{если } k < m \\ 0 & \text{иначе,} \end{cases} \tag{4}$$

где m — число различных собственных значений G и

$$\beta = \frac{1 - \sqrt{1-\sigma}}{1 + \sqrt{1-\sigma}} < 1$$

Данная оценка получена из полу-итерационного метода Чебышёва, после преобразования получаем

$$\left\| \sum_{i=0}^{k} c_i^{\star} x_i - x^* \right\|_2 \leqslant \left(1 - \sqrt{1-\sigma}\right)^k \|x_0 - x^*\|_2 \ll \sigma^k \|x_0 - x^*\|_2,$$

так что достигнуто ускорение. В то же время, для применения этого метода требуется знание оценки σ матрицы Якоби G в точке x^*, кроме того, коэффициенты в линейной комбинации могут быть очень большими, что влияет на численную стабильность алгоритма.

В связи с перечисленными выше проблемами далее сосредоточимся на методе, который будет приближённо минимизировать ошибку (3). В силу того, что G и x^* неизвестны, будем работать с невязкой:

$$r_i = x_{i+1} - x_i = g(x_i) - x_i,$$

тогда линейный метод неподвижной точки (2) принимает вид

$$r_i = x_{i+1} - x_i = (G - I)(x_i - x^*),$$

а линейная комбинация записывается как

$$\sum_{i=0}^{k} c_i r_i = (G - I) \sum_{i=0}^{k} c_i (x_i - x^*) = (G - I) p(G)(x_0 - x^*),$$

что равно ошибке $p(G)(x_0 - x^*)$, умноженной на $(G - I)$, то есть использование этих коэффициентов будет приближённо минимизировать ошибку.

Предложение 1.2. Пусть

$$c^{\star} = \underset{\{c \in \mathbb{R}^{k+1} : c^{\mathsf{T}} \mathbf{1} = 1\}}{\arg\min} \left\| \sum_{i=0}^{k} c_i r_i \right\|_2$$

Тогда последовательность x_i, $i = \overline{0,k}$, усреднённая с помощью коэффициентов c^*, удовлетворяет соотношению

$$\left\|\sum_{i=0}^{k} c_i^* x_i - x^*\right\|_2 \leqslant \frac{1}{1-\sigma} \underset{\{c \in \mathbb{R}^{k+1}: c^\mathsf{T}\mathbf{1}=1\}}{\arg\min} \left\|\sum_{i=0}^{k} c_i G^i (x_0 - x^*)\right\|_2, \tag{5}$$

где $0 \preceq G \preceq \sigma I$, $\sigma < 1$.

Отсюда получаем ускорение Андерсона:

Algorithm 1: Anderson acceleration

Data: Последовательность $x_0, x_1, \ldots, x_{k+1} \in \mathbb{R}^d$.
Составить матрицу $R = [r_0, \ldots, r_k]$;
Решить задачу

$$c^* = \underset{\{c \in \mathbb{R}^{k+1}: c^\mathsf{T}\mathbf{1}=1\}}{\arg\min} \left\|\sum_{i=0}^{k} c_i r_i\right\|_2$$

Result: Аппроксимация $\widehat{x^*} = \sum_{i=0}^{k} c_i^* x_i$, удовлетворяющая (5).

Из ККТ можно вывести, что решение получается в 2 шага:

1. Решить $R^\mathsf{T} R z = \mathbf{1}$

2. $c^* = z/(\mathbf{1}^\mathsf{T} z)$

2. Regularized nonlinear acceleration

Чтобы повысить численную стабильность алгоритма и обеспечить его работу, если функция g содержит шум вида $x_{i+1} - x_i = g(x_i) - x_i = G(x_i - x^*) + e_i$, добавим регуляризацию в предложенный выше алгоритм:

Algorithm 2: Regularized Nonlinear Acceleration (RNA)

Data: Последовательность $x_0, x_1, \ldots, x_{k+1} \in \mathbb{R}^d$, полученная из метода неподвижной точки, и регуляризационный параметр $\lambda > 0$.
Составить матрицу $R = [r_0, \ldots, r_k]$, где $r_i = x_{i+1} - x_i$;
Решить задачу

$$c^* = \underset{c^\mathsf{T}\mathbf{1}=1}{\arg\min} \|Rc\|_2^2 + \lambda \|c\|_2^2,$$

или, что эквивалентно, решить $(R^\mathsf{T} R + \lambda I) z = \mathbf{1}$ и взять $c_\lambda^* = z/\mathbf{1}^\mathsf{T} z$.
Result: Аппроксимация $\widehat{x^*} = \sum_{i=0}^{k} (c_\lambda^*)_i x_i$, удовлетворяющая (5).

Наконец, добавим поиск по сетке для выбора λ и backtracking для выбора размера шага:

$$\min_{t>0} f(x_0 + t(x_{extr}(\lambda) - x_0))$$

Algorithm 3: Adaptive Regularized Nonlinear Acceleration (ARNA)

Data: Последовательность $x_0, x_1, \dots, x_{k+1} \in \mathbb{R}^d$, полученная из метода неподвижной точки, границы $[\lambda_{\min}, \lambda_{\max}]$ и целевая функция $f(x)$.

Разбить отрезок $[\lambda_{\min}, \lambda_{\max}]$ на k частей, используя логарифмический масштаб;
Составить матрицу $R = [r_0, \dots, r_k]$, где $r_i = x_{i+1} - x_i$;
Построить матрицу $M = R^\intercal R / \|R^\intercal R\|_2$;
for $j = \overline{1, k}$ **do**
    Решить систему $(M + \lambda_j) z = \mathbf{1}$;
    Нормировать решение: $c^*_{\lambda_j} = z / \mathbf{1}^\intercal z$;
    Вычислить $x_{extr}(\lambda_j) = \sum_{i=0}^{k} (c^*_{\lambda_j})_i x_i$;
end
Выбрать $x^*_{extr} = \arg\min_{j=\overline{1,k}} f(x_{extr}(\lambda_j))$;
Задать $F_t = f(x_0 + t(x^*_{extr} - x_0))$;
$t := 1$;
while $F_{2t} < F_t$ **do**
    $t = 2t$;
end

Result: Аппроксимация $(x_0 + t(x^*_{extr} - x_0))$

3. Численные эксперименты

3.1 Ускорение градиентного спуска для квадратичной функции

Рассмотрим квадратичную функцию $f = \dfrac{1}{2} x^\intercal A x - b^\intercal x$, тогда её градиент имеет вид

$$\nabla f(x) = Ax - b = A(x - x^*),$$

где последний переход верен в силу $Ax^* = b$. Пусть $\mu I \preceq A \preceq \sigma I$, тогда градиентный спуск с шагом $1/L$ записывается как

$$x_{i+1} = x_i - \frac{1}{L} \nabla f(x_i) = x_i - \frac{1}{L} A(x_i - x^*) = \underbrace{(I - A/L)}_{G}(x_i - x^*) + x^*,$$

откуда $0 \preceq G \preceq \left(1 - \dfrac{\mu}{L}\right) I$

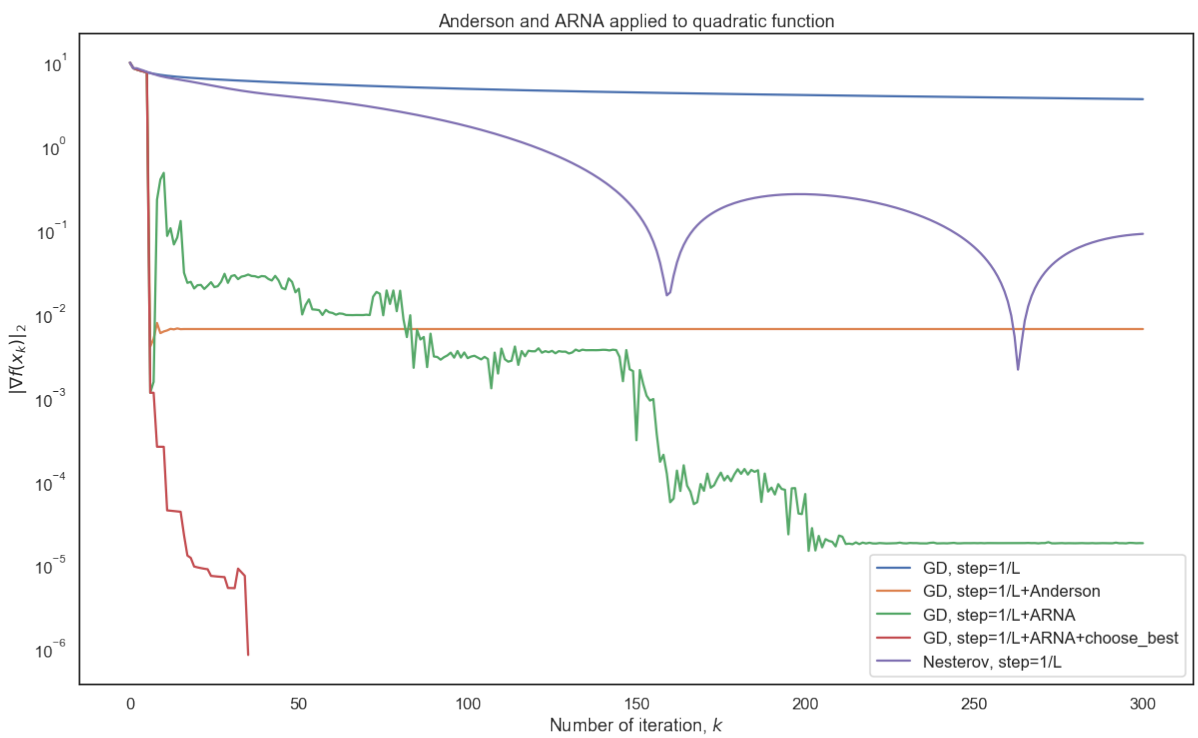
Используя Предложение 1.1 и Предложение 1.2, получаем следующую оценку на скорость сходимости градиентного спуска, ускоренного алгоритмом Андерсона:

$$\left\| \sum_{i=0}^{N} c_i^* x_i - x^* \right\|_2 \leqslant \frac{L}{\mu} \frac{2\beta^k}{1 + 2\beta^k} \|x_0 - x^*\|_2, \quad \text{где } \beta = \frac{1 - \sqrt{\dfrac{\mu}{L}}}{1 + \sqrt{\dfrac{\mu}{L}}}$$

Преобразовывая, получаем

$$\left\| \sum_{i=0}^{N} c_i^* x_i - x^* \right\|_2 \lessapprox \frac{L}{\mu} \cdot 2\beta^k \|x_0 - x^*\|_2,$$

что соответствует оценке сходимости оптимального метода Нестерова [2]. Продемонстрируем скорость сходимости на практике:



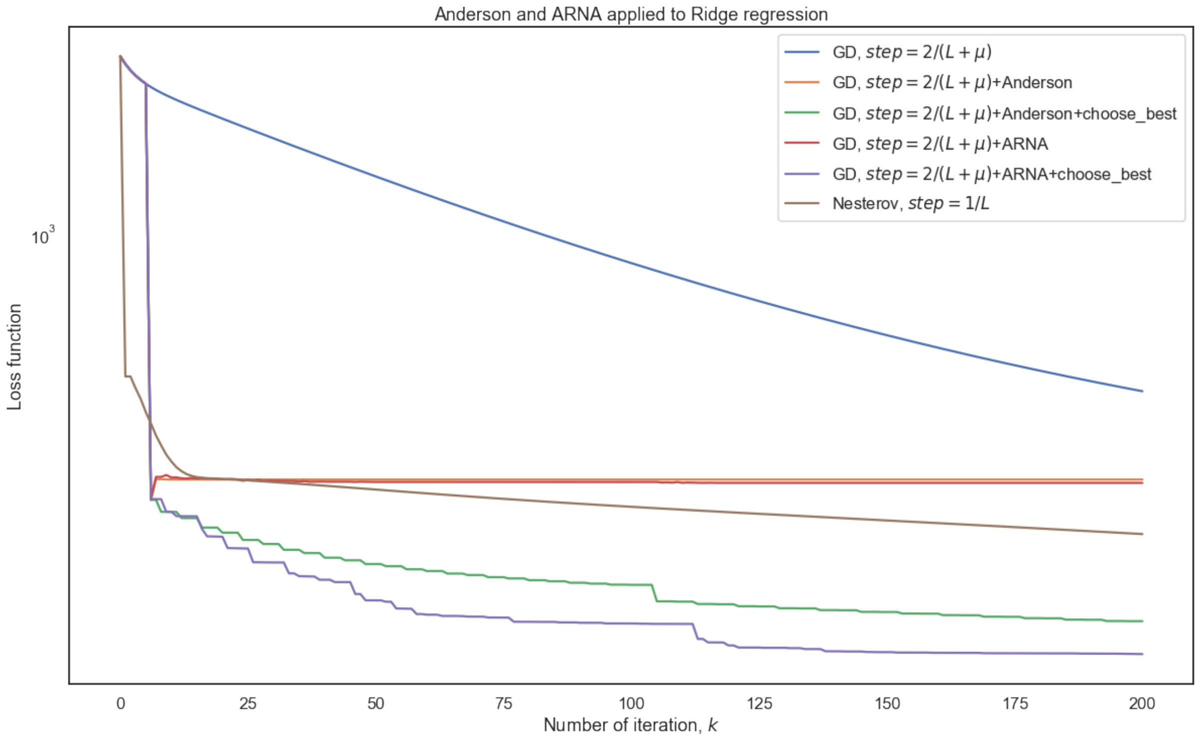
Более медленную сходимость ARNA по сравнению с Anderson на начальном этапе можно объяснить неточными значениями коэффициентов из-за присутствия регуляризации. В остальном ARNA демонстрирует отличную скорость сходимости (для Anderson *choose_best* не применялся в силу того, что эта опция не исправляет застревание в этом случае).

3.2 Ускорение Ridge регрессии

Применим ускорение к оптимизации Ridge регрессии для стандартного датасета boston. Функция потерь задаётся как

$$f(w, \lambda) = \sum_{i=1}^{m} (Z^\top w - y)^2 + \frac{\lambda}{2} \|w\|_2^2,$$

она строго выпукла с $\mu = \lambda$, а её градиент липшецев с константой $L = \|2Z^\top Z + \lambda I\|_2$. Снова получаем сходимость, аналогичную методу Нестерова:



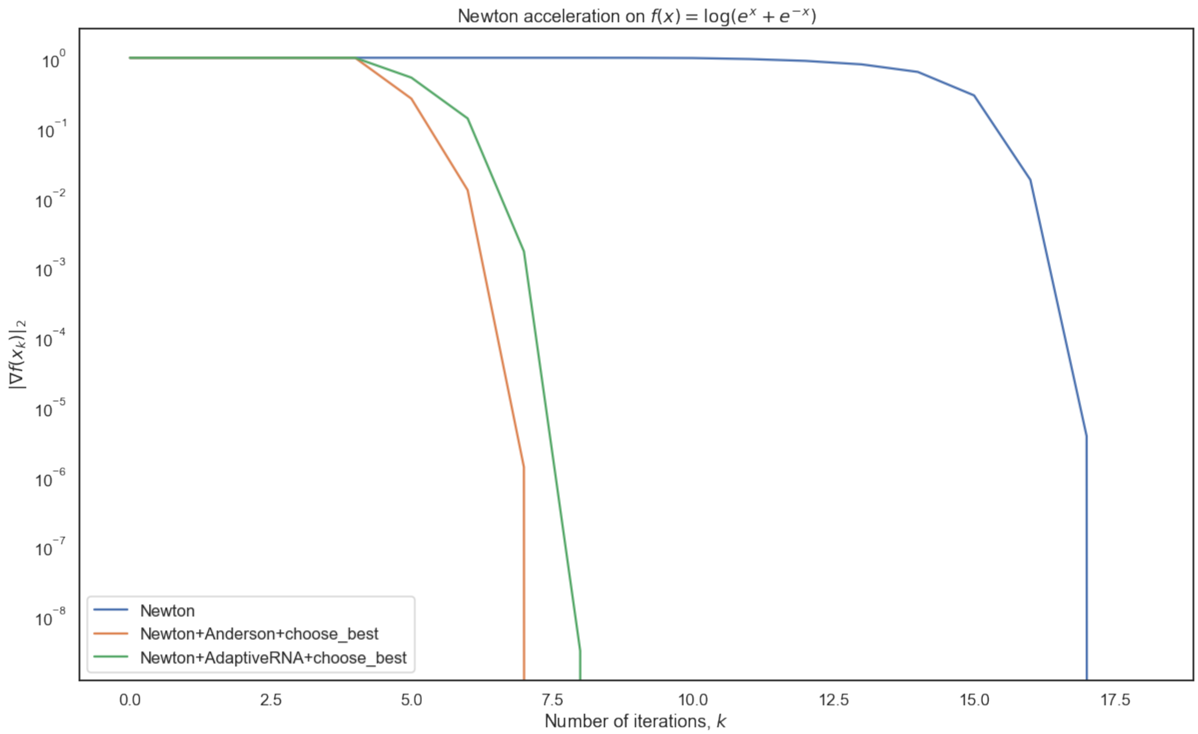
Заметим, что хоть на начальном этапе ускоренные алгоритмы и вырываются вперёд, в дальнейшем характер сходимости почти не отличается от метода Нестерова. Также видно, что *choose_ best* оказывает критическое влияние на сходимость.

3.3 Ускорение метода Ньютона

Важным отличием представленных в проекте методов ускорения является их применимость практически к любым методам, основанным на принципе неподвижной точки. Для демонстрации этого свойства оптимизируем функцию

$$f(x) = \log(e^x + e^{-x})$$

с помощью метода Ньютона и его ускоренных версий. В данном случае методы помогают достичь области квадратичной сходимости сразу после накопления последовательности $\{x_i\}$ достаточной длины, чуть более медленная сходимость ARNA объясняется более удачным попаданием в эту область, ибо в дальнейшем, как видно в сравнении с обычным методом Ньютона, ускорение не участвует в сходимости в силу опции *choose_ best*.



4. Список литературы

[1] Scieur, D., d'Aspremont, A., and Bach, F. (2016). "Regularized Nonlinear Acceleration". ArXiv e-prints, arXiv:1606.04133.

[2] Nesterov, Y. (2013). "Introductory lectures on convex optimization: A basic course". Vol. 87, Springer Science & Business Media.