SpiderBoost и Natasha 2 – продвинутые алгоритмы решения задачи оптимизации

25 мая 2020 г.

1 Введение

1.1 Постановка задачи

SpiderBoost и Natasha 2 - недавно разработанные стохастические алгоритмы решения задач оптимизации.

Оба алгоритма предусматривают рассмотрение задачи:

$$\min_{x \in \mathbb{R}^d} f(x) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} f_i(x) = \mathbb{E}_i[f_i(x)] \quad (1)$$

где $\{f_i(x)\}_{i=1}^n$ - гладкие, в общем случае невыпуклые функции

1.2 Мотивация

Известно, что для задачи поиска локального минимума произвольной гладкой невыпуклой функции (в смысле нахождения такого вектора $x : \nabla f(x) \leq \epsilon$) наилучшую скорость сходимости $O(\epsilon^{-4})$ предоставляет SGD.

Для конечной суммы $\sum_{i=1}^n f_i(x)$ известен алгоритм SCSG, повышающий эффективность до $\tilde{O}(\min(n^{2/3}\epsilon^{-2}, \epsilon^{-10/3}))$.

Natasha 2 предполагает скорость сходимости $O(\epsilon^{-3.25})$ для нахождения ϵ-приближенного локального минимума произвольной гладкой невыпуклой функции, пользуясь информацией о стохастических градентах в качестве оракула.

SpiderBoost предполагает скорость сходимости $O(\min(n^{1/2}\epsilon^{-2}, \epsilon^{-3}))$, оптимальный результат для режима $n \leq O(\epsilon^{-4})$

Далее более детально рассмотрены алгоритмы SpiderBoost и Natasha 2, их реализация, а также сравнение между собой и с другими известными алгоритмами оптимизации.

2 SpiderBoost

2.1 Общие сведения

SpiderBoost – один из стохастических алгоритмов оптимизации основанных на методе Стохастической Интегрированной Дифференциальной Оценки (Stochastic Path-Integrated Differential Estimator – SPIDER). Подробнее о SPIDER в разделе **2.3 SPIDER - принцип работы**

2.2 Постановка задачи

Рассматривается функция

$$\min_{\mathbf{x}\in\mathbb{R}^d} f(\mathbf{x}) = \frac{1}{n}\Sigma_{i=1}^{n} f_i(\mathbf{x}) \quad (1.1)$$

где функции $f_i(\mathbf{x})$ в общем случае невыпуклые.

Также пусть для функции выполнены ограничения:
1. $\exists \inf_{\mathbf{x}\in\mathbb{R}^d} f(\mathbf{x}) > -\infty$
2. $\forall i \in 1\ldots n, \forall x, y \in \mathbb{R}^d, \|\nabla f_i(x) - \nabla f_i(y)\| \leq L\|x-y\|$

Требуется найти такой вектор x, что

$$\hat{x} \in \mathbb{R}^d : \|\nabla f(\hat{x})\| \leq \epsilon$$

Т.е. ищется ϵ-приближение стационарной точки липшецевой ограниченной снизу гладкой функции.

2.3 SPIDER - принцип работы

SpiderBoost – одна из реализаций метода SPIDER вспомогательной функции оценки:

SPIDER – метод первого порядка, в свою очередь основанный на аппарате SGD, за исключением следующих особенностей:
1. На некоторых итерациях будем просчитывать градиент полностью, как в алгоритме GD
2. На всех остальных шагах (таких будет большинство) мы станем отслеживать предварительно введенную функцию оценки ν, зависящую от градиента мини-батча (вместо самого градиента, как предполагает SGD)

Наша задача добиться таким образом, с одной стороны, хорошей точности результата посредством (1), и, с другой стороны, высокой производительности посредством (2).

2.4 Оценка точности SPIDER

1. Пусть $B(\mathbf{x})$ отображает $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$ на случайную функцию $B_i(\mathbf{x})$: в алгоритмах под $B(x)$ будет подразумеваться градиент

2. Пусть функция ν такова, что

$$\mathbb{E}[B_i(\mathbf{x}_k) - B_i(\mathbf{x}_{k-1}) \mid \mathbf{x}_{0:k}] = \nu_k - \nu_{k-1}$$

где $\mathbf{x}_{0:k} = \mathbf{x}_1 \ldots \mathbf{x}_k$

3. Пусть также выполнено

$$\mathbb{E}\|B_i(x) - B_i(y)\|^2 \leq L_B^2\|x-y\|^2$$

для $\|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_{k-1}\| \leq \epsilon_1$, $\forall k \in 1\ldots K$

4. Наконец, пусть

$$\nu : \nu_k = B_{S_*}(\mathbf{x}_k) - B_{S_*}(\mathbf{x_{k-1}}) + \nu_{k-1}$$

здесь S_* – мощность батча
$\Rightarrow$тогда имеет место **оценка для ошибки $\nu^{\mathbf{k}}$ в терминах дисперсии**

$$\mathbb{E}\|\nu_k - B(\mathbf{x}_k)\|^2 \leq \frac{kL_B^2\epsilon_1^2}{S_*} + \mathbb{E}\|\nu_0 - B(\mathbf{x}_0)\|^2$$

т.е. при удачном выборе функции ν, а также шага в зависимости от L_B значение построенной функции ν_k с хорошей точностью приближается к значению, получаемом при GD: $B(\mathbf{x}_k)$; и есть предпосылка сэкономить на скорости вычисления ν вместо вычисления полного градиента. Скорости сходимости метода зависят от выбора функции ν, в следующей секции рассмотрим алгоритм, в котором ν хорошо подобрана:

2.5 SpiderBoost - описание алгоритма

1. Рассматриваем задачу (1.1) с соблюдением всех дополнительных ограничений

2. Пользуемся методом Spider, выбрав вспомогательную функцию ν:
   1) $\nu_0 = \nabla f(x_0)$
   2) $\nu_k = \frac{1}{|S|}\Sigma_{i\in S}[\nabla f_i(x_k) - \nabla f_i(x_{k-1}) + \nu_{k-1}]$

3. Опишем псевдокод для SpiderBoost:
– **input** : $\eta = \frac{1}{2L}; q, K, \mid S \mid \in \mathbb{N}$
– **for** $k \in 1 \dots K$:
– – **if** $\mod(k, q) = 0 \Rightarrow \nu_k = \nabla f(x_k)$
– – **else** $\Rightarrow$ **draw** $\mid S \mid$ samples with replacement, **compute** ν_k
– **calculate** $x_{k+1} = x_k - \eta\nu_k$
– **return** $x_\xi, \xi \overset{Unif}{\sim} \{0 \dots K-1\}$

3 Natasha 2

3.1 Постановка задачи

Исследуется задача

$$\min_{x\in\mathbb{R}^d} f(x) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} f_i(x) = \mathbb{E}_i[f_i(x)],$$

где $\{f_i(x)\}_{i=1}^n$ - в общем случае гладкие невыпуклые функции

Необходимо найти точку $\hat{x} \in \mathbb{R}^d$, такую что $\|\nabla f(\hat{x})\| \le \epsilon$ и $\nabla^2 f(\hat{x}) \succeq -\delta\mathbf{I}$

3.2 Предположения о виде функции

1. f имеет ограниченную дисперсию, откуда $\mathbb{E}_i[\|\nabla f_i(x) - \nabla f(x)\|^2] < \nu$
2. L-Липшицевость градиента: $\|\nabla f(x) - \nabla f(y)\| \le L \cdot \|x - y\|$
3. L_2-Липшицевость гессиана: $\|\nabla^2 f(x) - \nabla^2 f(y)\| \le L_2 \cdot \|x - y\|$

3.3 Описание алгоритма

3.3.1 Основная идея:

На каждой итерации в точке y_k сравниваем минимальное собственное значение $\lambda_{min}(\nabla^2 f(y_k))$ и $-\delta$.

1. Если $\exists v : v^T \nabla^2 f(y_k) v \le -\frac{\delta}{2}$, то пытаемся отдалиться от седла: $y_{k+1} = y_k \pm \frac{\delta}{L_2} v$ (+ или − выбираем случайно). Для поиска v пользуемся алгоримом Oja с $\Theta(\frac{L^2}{\delta^2}\log(dk))$ итерациями

2. Иначе берём $F^k(x) = f(x) + L(\max\{0, \|x - y_k\| - \frac{\delta}{L_2}\})^2$, которая является $5L$-Липшицевой по градиенту и 3δ-невыпуклой ($\nabla^2 F^k(x) \succeq -3\delta\mathbf{I}$); ищем для неё точку $\widehat{x} : \|\nabla F^k(\hat{x})\| \le \epsilon$ и переходим туда: $y_{k+1} = \hat{x}$. Как видно, F^k штрафует за выход из безопасной зоны $\{x : \|x - y_k\| \le \frac{\delta}{L_2}\}$. Для поиска $\hat{x}$ запускаем Natasha 1.5 на одну эпоху

Цикл обрывается, когда было совершено N_1 шагов первого порядка, и алгоритм выдает последнюю рассмотренную точку y_k

3.3.2 Псевдокод:

Input: функция f(x), удовлетворяющая 3.1 и 3.2, начальный вектор y_0,
целевое приближение $\epsilon > 0$, δ >0
// Также предполагаем $\nu \ge \Omega(\epsilon^2)$ и $\delta^4 \le O(\nu\epsilon L_2^3/L^2)$
if $L_2 \ge \frac{L\delta}{\nu^{1/3}\epsilon^{1/3}}$ **then**
  $\tilde{L} = \tilde{\sigma} \leftarrow \Theta\big(\frac{L_2\nu^{1/3}\epsilon^{1/3}}{\delta}\big) \in \big[L, \infty\big)$;
else
  $\tilde{L} \leftarrow L$ и $\tilde{\sigma} \leftarrow \max\{\frac{\nu\epsilon L_2^3}{L^2\delta^3}, \frac{\epsilon L}{\nu^{1/2}}\big) \in [\delta, L]$;
end
$B \leftarrow \Theta(\nu/\epsilon^2)$; $p \leftarrow \Theta\big((\frac{\tilde{\sigma}^2}{\tilde{L}^2})\big)$; $\alpha \leftarrow \Theta(\frac{\tilde{\sigma}}{p^2\tilde{L}^2})$;
$X \leftarrow []$; $N_1 \leftarrow \Theta\big(\frac{\tilde{\sigma}\nabla_f}{p\epsilon^2}\big)$, где ∇_f ограничивает сверху $f(y_0) - \min_y\{f(y)\}$;
for $k \leftarrow 0$ **to** ∞ **do**
  Применить алгоритм Oja для нахождения $\min EV$ для $\nabla^2 f(y_k)$;
  if *найдена* $v \in \mathbb{R}^d$ *при* $v^T\nabla^2 f(y_k) v \le -\frac{\delta}{2}$ **then**
    $y_{k+1} \leftarrow y_k \pm \frac{\delta}{\mathrm{L}_2} v$, где знак случайный ;
  else
    $F(x) = F^k(x) := f(x) + L(\max\{0, \|x - y_k\| - \frac{\delta}{L_2}\})^2$;
    $(\widehat{y}_k, y_{k+1}) \leftarrow$ Natasha1.5$(F, y_k, B, p, 1, \alpha)$;
    $X \leftarrow \big[X, (y_k, \widehat{x})\big]\big)$;
    прекратить цикл по прошествии N_1 шагов первого порядка
  end
end
$(\widehat{y}_k, y_{k+1}) \leftarrow$ случайная пара из X;

Algorithm 1: Natasha2 $(f, y_0, \epsilon, \delta)$

3.4 Составляющие

3.4.1 Natasha 1.5 : Поиск стационарных точек для σ-невыпуклых функций

Каждая эпоха делится на p суб-эпох со стартовым вектором $\widehat{x}$.

При подсчёте градиентов, вместо $f(x)$ фактически используется $f(x)+\sigma\|x-\widehat{x}\|^2$, что должно стабилизировать алгоритм, немного замедляя его. Вместе с этим, используется пересчёт градиента из алгоритма SVRG. Алгоритм выдает последнюю точку $\hat{x}$

Псевдокод :

Input: функция F(x), удовл. 3.1, начальный вектор $x^{\varnothing}$, длина эпохи $B \in [n]$,
количество суб-эпох $p \in [B]$, количество эпох $T' \geq 1$, learning rate $\alpha > 0$

$\widehat{x} \leftarrow x^{\varnothing}; m \leftarrow B/p; X \leftarrow []$;
for $k \leftarrow 1$ **to** T' **do**
  $\tilde{x} \leftarrow \widehat{x}; \mu \leftarrow \frac{1}{B}\Sigma_{i\in S}\nabla f_i(\tilde{x})$
  где S распрделение случайного подмножества $[n]$ при $|S| = B$;
  for $s \leftarrow 0$ **to** $p-1$ **do**
    $x_0 \leftarrow \widehat{x}$; $X \leftarrow [X, \tilde{x}]$;
    for $t \leftarrow 0$ **to** $m-1$ **do**
      $i \leftarrow$ случайный индекс из $[n]$;
      $\tilde{\nabla} \leftarrow \nabla f_i(x_t) - \nabla f_i(\tilde{x}) + \mu + 2\sigma(x_t - \widehat{x})$;
      $x_{t+1} = \arg\min_{y\in\mathbb{R}^d}\{\psi(y) + \frac{1}{2\alpha}\|y - x_t\|^2 + \langle\tilde{\nabla}, y\rangle\}$
      // в нашем случае $x_{t+1} = x_t - \alpha\tilde{\nabla}$ так как $\psi \equiv 0$
    end
    $\widehat{x} \leftarrow$ случайно выбран из $\{x_0, \ldots, x_{m-1}\}$
  end
end
$\widehat{y} \leftarrow$ случайный вектор из X и $y^+ \leftarrow \widehat{x}$

Algorithm 2: Natasha1.5 $(F, x^{\varnothing}, B, p, T', \alpha)$

3.4.2 Oja's algorithm : быстрый поиск максимального собственного вектора

Пусть имеется некоторое распределение $\mathcal{D}$ симметричных матриц, собственные числа которых лежат на $[0, 1]$ и $\mathbf{B} = \mathbb{E}_{\mathbf{A}\sim\mathcal{D}}[\mathbf{A}]$ - среднее. Пусть $\mathbf{A}_1, \ldots \mathbf{A}_T \sim \mathcal{D}$. Алгоритм начинает со случайного гауссовского вектора $w_1 \in \mathbb{R}^d$ единичной нормы. Затем на каждой итерации $k = 2, \ldots T$ подсчитывается $w_k = \frac{1}{C}(\mathbf{I} + \eta\mathbf{A}_{k-1})w_{k-1}$, так чтобы $\|w_k\| = 1$. Параметр η выбирается, так чтобы $\eta = \Theta(\sqrt{T})$ Алгоритм выдаёт случайный вектор из равномерного распределения $\{w_1, \ldots w_T\}$

В нашем случае $\mathcal{D} = \{-\frac{1}{L}\nabla^2 f_i(x)\}_i$, а итерации выглядят как

$$w_k = \frac{1}{CL}(Lw_{k-1} - \eta\nabla^2 f_{k-1}(x)w_{k-1})$$

4 Natasha 2 и SpiderBoost: сравнение

4.1 Принципиальные отличия

Natasha 2 и SpiderBoost - недавно разработанные стох- алгоритмы решения задачи (1)

Алгоритмы отличаются друг от друга принципом работы: идея алгоритма Natasha 2 заключается в избежании седловых точек засчет информации гессиана, идея SpiderBoost – построение вспомогательной оценки требующей на пересчет меньше операций чем градиент.

Подробнее с техническими отличиями алгоритмов моджно ознакомиться в таблице 1:

Таблица 1: сравнение характеристик Natasha 2 и SpiderBoost

Характеристика	**SpiderBoost**	**Natasha 2**
Порядок метода	I	II
Искомый вектор	$x \in \mathbb{R}^d : \hat{x} \in \mathbb{R}^d : \|\nabla f(\hat{x})\| \leq \epsilon$	$x \in \mathbb{R}^d : \|\nabla f(\hat{x})\| \leq \epsilon; \nabla^2 f(\hat{x}) \succeq -\delta\mathbf{I}$
Вид целевой функции	• $\exists \inf_{\mathbf{x}\in\mathbb{R}^d} f(\mathbf{x}) > -\infty$ • $\|\nabla f_i(x) - \nabla f_i(y)\| \leq L\|x-y\|$ $\forall i \in 1\dots n, \forall x, y \in \mathbb{R}^d$	• $\exists \nu : \mathbb{E}_i[\|\nabla f_i(x) - \nabla f(x)\|^2] < \nu$ • $\|\nabla f(x) - \nabla f(y)\| \leq L \cdot \|x-y\|$ • $\|\nabla^2 f(x) - \nabla^2 f(y)\| \leq L_2 \cdot \|x-y\|$
Основная идея	Стохастический спуск по данным собственной функции ν вместо градиента	Избегать седловых точек пользуясь информацией из Гессиана
Порядок сходимости	$O(\min(n^{\frac{1}{2}}\epsilon^{-2}, \epsilon^{-3}))$	$\tilde{O}(\frac{1}{\delta^5} + \frac{1}{\delta\epsilon^3} + \frac{1}{\epsilon^{3.25}})$
Шаг алгоритма	$O(\epsilon^{\frac{2}{3}} L^{-\frac{2}{3}})$	$O(L^{-1})$

4.2 Предположения о приоритете методов

Исходя из данных таблицы, можно предположить, что использование Natasha 2 выгодно для функций с наличием большого числа седловых точек, а также в случаях с пониженным δ – параметром, задающим норму гессиана. SpiderBoost, с другой стороны, предположительно имеет приоритет при стремлении к $n \leq O(\epsilon^{-4})$ когда число функций относительно невелико.

В следующем разделе мы приведем реализацию алгоритмов и проверку гипотез.

5 Natasha 2 и SpiderBoost: реализация алгоритмов

5.1 Проведение экспериментов

По ссылкам ниже можно ознакомиться с реализацией алгоритмов Natasha 2 и SpiderBoost:

SpiderBoost:
`https://github.com/zhestyatsky/mipt-opt-project/blob/master/src/spider_boost.py`

Natasha 2:
`https://github.com/zhestyatsky/mipt-opt-project/blob/master/src/natasha.py`

5.2 Результаты экспериментов

5.2.1 SpiderBoost

SpiderBoost на практике показал себя хорошо: при оптимизации функции потерь для логистической регрессии по скорости сходимости он значительно обошел градиентный спуск.

Также использование моментума в SpiderBoost привело к улучшению результата на некотором классе функций.

По ссылке ниже можно ознакомиться с поведением SpiderBoost на логистической регрессии в сравнениии с другими алгоритмами:

SpiderBoost: результаты
`https://github.com/zhestyatsky/mipt-opt-project/blob/master/src/racing.ipynb`

5.2.2 Natasha 2

По результатам эксперимента мы видим, что алгоритм Natasha плохо реализуем на практике за наличием следующих сложностей:

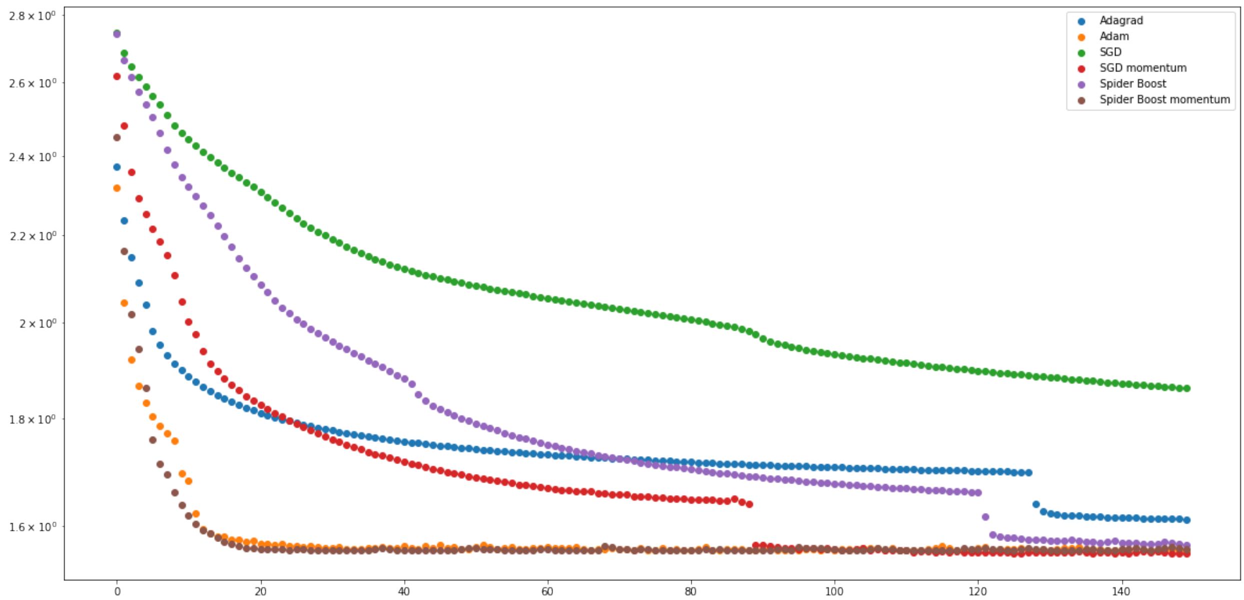
– Сложность в подборе оптимальых гиперпараметров, требуемых для алгоритма и сильно влияющих на его поведение

– Присутствие коэффициента Липцица для гессиана в качестве одного из гиперпараметров

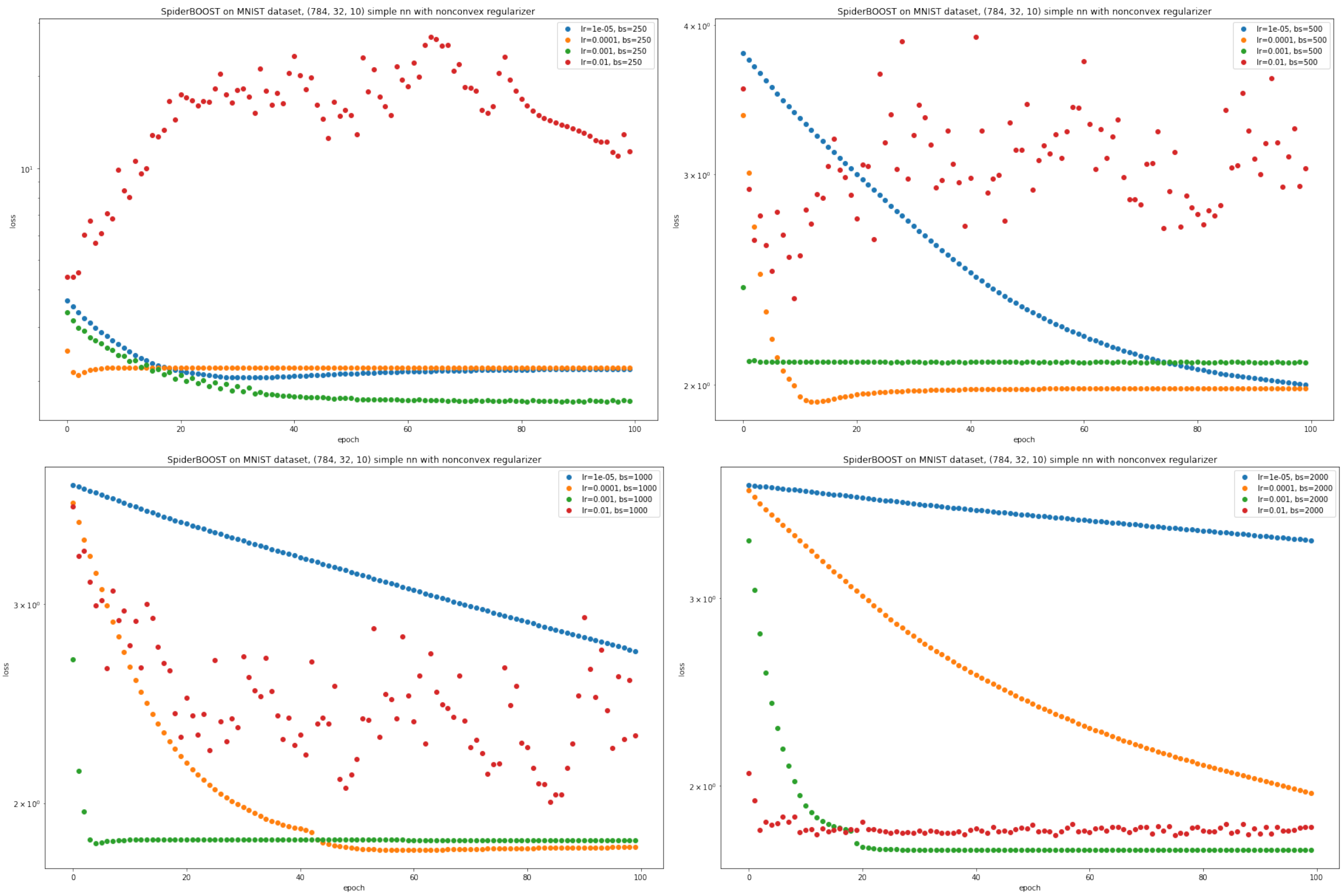
– Также реализация осложнена работой с гессианом в PyTorch.

5.2.3 Сравнение результатов

Ниже приведен график сравнения работы алгоритма SpiderBoost с конкурирующими алгоритмами на логистической регрессии



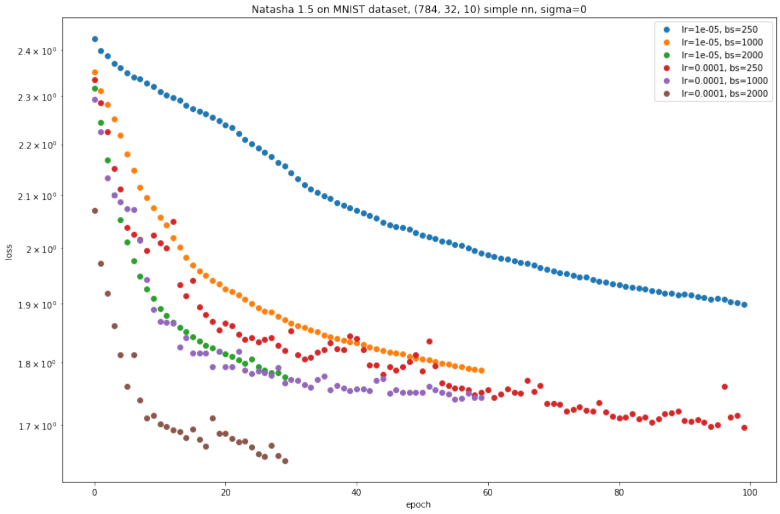
Работа SpiderBoost на нейросети в зависимости от входных параметров

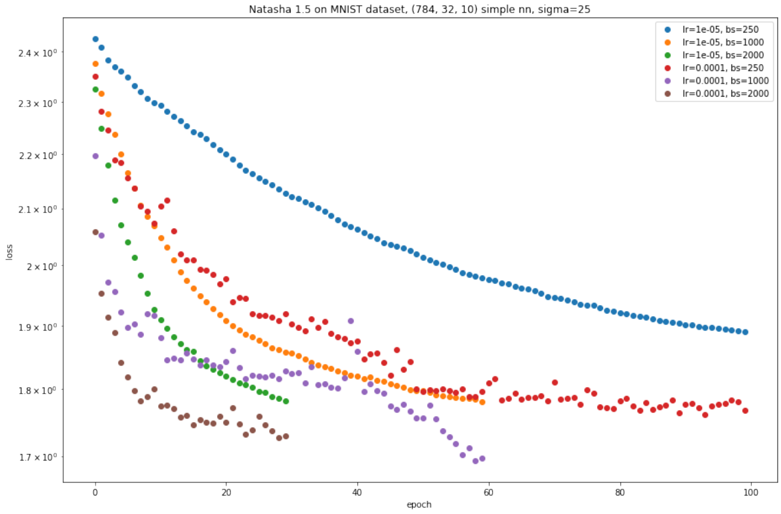


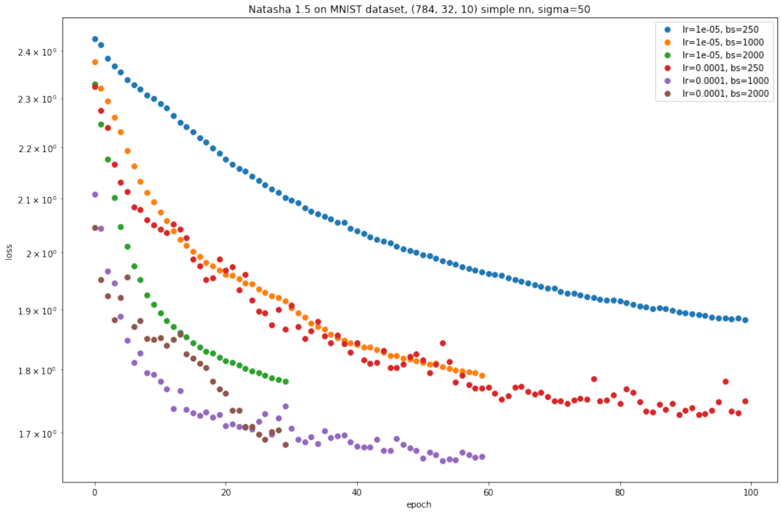
Посмотреть на GitHub

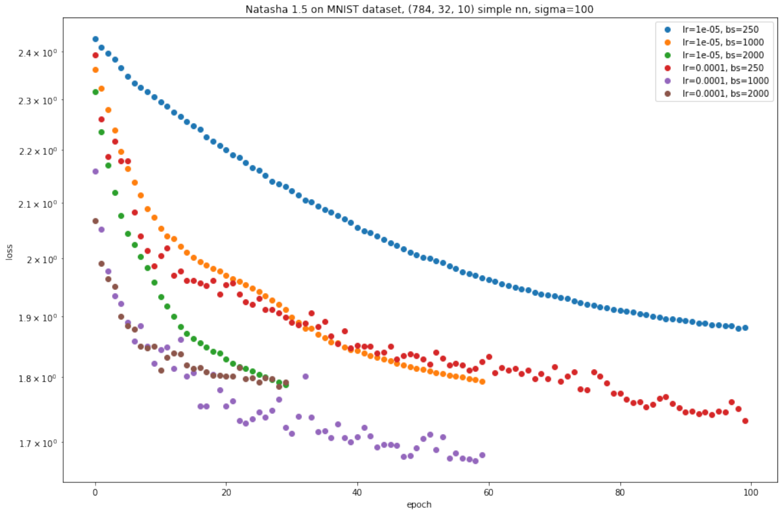
`https://github.com/zhestyatsky/mipt-opt-project/blob/master/src/params_dependency.ipynb`

Работа Natasha 1.5 на нейросети в зависимости от входных параметров



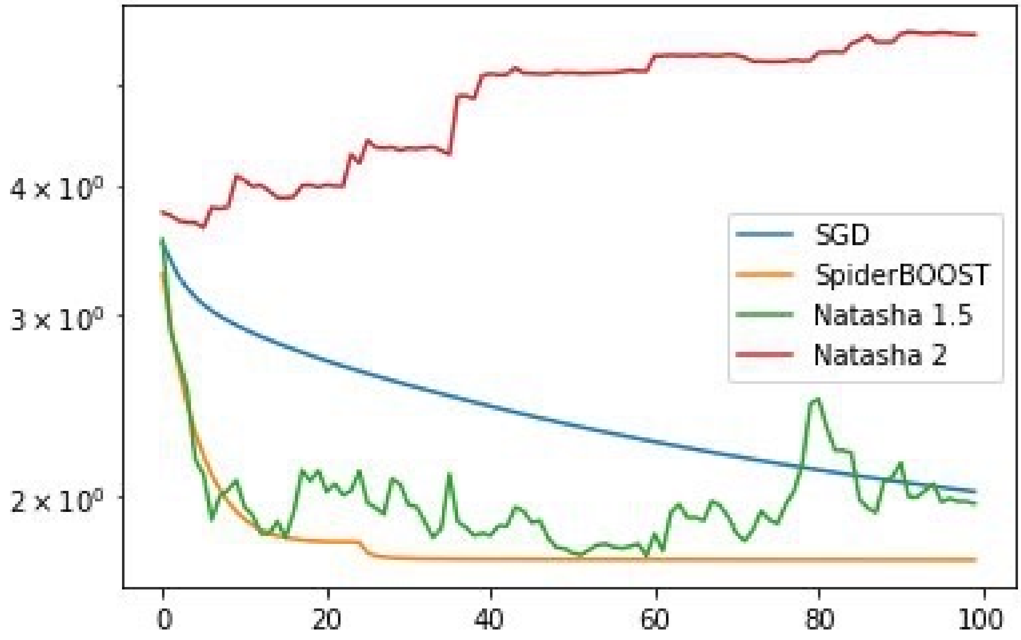






Продолжение в источнике...
`https://github.com/zhestyatsky/mipt-opt-project/blob/master/src/params_dependency.ipynb`

Сравнение работы SpiderBoost и Natasha 1.5



В целом, результаты сравнения алгоритмов SpiderBoost и Natasha2 не в пользу последней

5.2.4 Выводы

По результатам опытов мы видим, что SpiderBoost значительно лучше реализуем и применим на практике чем Natasha 2. Так, скорость сходимости SpiderBoost на логистической регрессии превзошла это значение у SGD. Версия SpiderBoost, ускоренная посредством momentum также превосходит по скорости сходимости Adam, Adagrad и SGD momentum

Такое различие в проблематичности использования алгоритмов SpiderBoost и Natasha 2 во многом объясняется множеством требований последнего к гиперпараметрам.

6 Заключение

Мы рассмотрели стохастические алгоритмы решения оптимизационных задач Natasha 2 и SpiderBoost. Были также проведены теоретические и практические сравнения алгоритмов, по результатом которых мы видим, что, хотя Natasha 2 и SpiderBoost несколько разные задачи с разными запросами, тем не менее, SpiderBoost значительно лучше проявляет себя в применении на практике.