

**КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА**
Факультет комп'ютерних наук та кібернетики
Кафедра обчислювальної математики

Кваліфікаційна робота
на здобуття ступеня бакалавра
за спеціальністю 113 Прикладна математика
на тему:

**Адаптивні та швидкі методи для опукло-угнутої оптимізації та
варіаційних нерівностей**

Виконав студент 4-го курсу
Олянін Денис Валерійович

(підпис)

Науковий керівник:
професор, доктор фіз.-мат. наук
Семенов Володимир Вікторович

(підпис)

Засвідчую, що в цій роботі немає
запозичень з праць інших авторів без
відповідних посилань.

Студент

(підпис)

Роботу розглянуто й допущено до захисту
на засіданні кафедри обчислювальної
математики

« ____ » _____ 202_ р.,

протокол № ____
Завідувач кафедри
Ляшко С. В.

(підпис)

Реферат

Робота обсягом в 30 сторінок, містить у собі три леми, три алгоритми та сім рисунків.

Об'єктом роботи є адаптивні алгоритми для опукло-угнутої оптимізації для мінімаксних задач.

Метою роботи є розробка, дослідження алгоритмів оптимізації, експериментальне підтвердження їхньої ефективності.

Методами дослідження є розробка адаптивного алгоритму, аналіз уже існуючих алгоритмів та порівняння їх результатів.

Інструменти розробки. Для реалізації алгоритмів було використано мову програмування Python 3, середовищем розробки було використано інтегроване середовище Microsoft Visual Code.

Результат роботи. Було проаналізовано уже існуючі адаптивні алгоритми оптимізації. Також було розроблено адаптивний метод Mirror-Prox з універсальною схемою.

ЗМІСТ

Реферат	2
ВСТУП.....	4
ТЕОРЕТИЧНА ЧАСТИНА	6
Варіаційні нерівності	6
Опукла оптимізація	8
Опукло-угнуті ігри з нульовою сумою	8
Дзеркальний оператор для ігор з нульовою сумою	9
Опукла гра з нульовою сумою	10
Опис алгоритмів	11
ODG (online Gradient descent).....	11
Mirror-Prox	13
Адаптивна схема.....	15
Чисельні дослідження.....	18
Матричні ігри в змішаних стратегіях	18
Логістична регресія.....	20
Лінійна регресія	22
Проблема спільного використання ресурсів.....	24
Висновки	26
Список літератури.....	27

ВСТУП

Завдання математичного програмування зустрічаються в самих різних додатках і вельми актуальна проблема розробки ефективних алгоритмічних процедур для їх чисельного рішення. Серед цих завдань особливо можна виділити різні класи задач опуклою оптимізації. Опуклий аналіз і опукла оптимізація засновані на солідному математичному фундаменті, розробленому в основному в першій половині 20-го століття.

При вирішенні конкретних завдань оптимізації дослідників попередньо слід вибрати математичний метод, який приводить до кінцевих результатів із найменшими затратами на обчислення або же дає можливість отримати найбільший обсяг інформації про шуканому розв'язку. Вибір того чи іншого методу в значній мірі визначає постановку оптимальних завдань, а також використання математичної моделі об'єкта оптимізації.

Проблема розробки ефективних алгоритмів для оптимізаційних задач з функціоналами різного рівня гладкості досить актуальна у застосунках. Негладкі задачі виникають при розв'язку проблем в проектуванні механічних конструкцій, у задачах розподілу ресурсів, які зводяться до максимізації загальної корисності виробників при спільному використанні даних ресурсів.

Дуже важливою є задача побудови методів для варіаційних нерівностей і сідлових задач з адаптацією як до рівня гладкості оператора, так і до величин похибок. Варіаційні нерівності мають широкий спектр застосувань у техніці, фізиці, економіці, а також і в машинному навчанні. Доцільно їх використовувати у задачах опису і розробки генеративно-змагальних нейронних мережах. Для задач гладкої оптимізації можна вважати аналогом задачу розв'язку варіаційної нерівності з монотонним ліпшицевим оператором. А для задач негладкої оптимізації – варіаційну нерівність з монотонним обмеженим оператором. Найбільш популярні для цього методи: екстраградієнтний і його більш сучасний аналог – проксимальний дзеркальний метод Mirror Prox.

Метою роботи є визначення ефективності адаптивних методів оптимізації,

Завданням дипломної роботи буде розробка універсального адаптивного проксимального дзеркального методу Mirror Prox для опукло-ввігнутої сідлової задачі, експериментально перевірити його швидкість збіжності та порівняти його з іншими алгоритмами оптимізації.

Методами роботи слугуватиме мова програмування Python, середовище Microsoft Visual Code, бібліотеки numpy, pandas,

Розділ 1. ТЕОРЕТИЧНА ЧАСТИНА

Варіаційні нерівності

Основним методом розв'язання різної кількості оптимізаційних задач є варіаційні нерівності. Вони допомагають знайти розв'язок проблем опуклої мінімізації і задач опукло-ввігнутої сідлової точки. Обидві проблеми відіграють велику роль у машинному навчанні та задач оптимізації.

Нехай E – це Банаховий простір, $K \subset E$, та функціональний оператор $F: K \rightarrow E^*$.

Нерівність (1) називатимемо варіаційною

$$\langle F(x), y - x \rangle \geq 0 \quad \forall y \in K \quad (1)$$

де $x \in K$ – це слабкий розв'язок нерівності.

Якщо K є опуклою та компактною множиною, та оператор F є монотонним на K , то слабкі розв'язки існують завжди. Сильним розв'язком варіаційної нерівності є така точка $x^* \in K$, що $\langle F(x^*), y - x^* \rangle \geq 0$ для будь-якого $y \in K$. З монотонності F випливає, що сильний розв'язок є також і слабким.

Для простоти будемо вважати оператор F однозначним, і таким, що для будь-якої пари $(x, y) \in K \times K$

$$(x - y) \cdot (F(x) - F(y)) \geq 0 \quad (2)$$

Нашою ціллю є знайти такий сильний розв'язок x^* варіаційної нерівності, що

$$\forall x^* \in K, (x^* - x) \cdot F(x^*) \leq 0. \quad (3)$$

Для задач опуклої мінімізації оператор F є субградієнтний оператор, а для задач опукло-ввігнутої сідлової точки складається з субградієнта відносно первинної змінної, та від'ємного суперградієнта відносно двох змінних.

Розглянемо загальну структуру варіаційних нерівностей з монотонними операторами і також введемо поняття функції опуклого розриву.

Функція $f: K \rightarrow \mathbb{R}$ є сильно опукла функція з параметром μ на множині K , тоді для будь-якого $x \in K$ і будь-якого $\nabla f(x)$, субградієнта f по x

$$f(y) \geq f(x) + \nabla f(x) \cdot (y - x) + \frac{\mu}{2} \|x - y\|^2; \forall x, y \in K$$

Функція $f: K \rightarrow \mathbb{R}$ є L -гладкою на множині K , якщо для будь-яких $x, y \in K$

$$\|\nabla f(x) - \nabla f(y)\|_* \leq L \|x - y\|^2$$

Також для опуклих диференційовних функцій f визначимо розбіжність Брегмана наступним чином

$$D_f(x, y) = f(x) - f(y) - \nabla f(y) \cdot (x - y)$$

Зазвичай для нерівності (2) ми шукаємо сильний розв'язок $\forall x^* \in K$, що задовільнятиме умові

$$\sup_{x \in K} (x^* - x) \cdot F(x) \leq 0$$

Нехай K – опукла множина, функція $\Delta: K \times K \rightarrow \mathbb{R}$ – функція розривів. Для даного розв'язку $x \in K$ визначаємо розрив двоїстості наступним чином

$$DualGap(x) := \max_{y \in K} \Delta(x, y)$$

Вважаючи, що ми маємо доступ до оракла для F , ми шукаємо такий розв'язок, у якого розрив двоїстості буде приблизно рівний нулю.

Нехай $K \subseteq \mathbb{R}^d$ є опуклою множиною і функція $\Delta: K \times K \rightarrow \mathbb{R}$ є опуклою по відношенню до її першого аргументу. Тоді можна сказати, що функція Δ є функцією розриву, сумісною з монотонним оператором $F: K \rightarrow \mathbb{R}^d$, якщо для будь-яких $x, y \in K$

$$\Delta(x, y) \leq (x - y) \cdot F(x),$$

і $x^* \in K$ є розв'язком нерівності (3) тоді і тільки тоді, якщо

$$DualGap(x^*) := \max_{y \in K} \Delta(x^*, y) = 0$$

Для оператора F будемо припускати, що існує така верхня границя G , що для будь-якого $x \in K$ $\|F(x)\|_* \leq G$. Також деколи нам буде потрібне припущення, що F є L -опуклим по відношенню до норми $\|\cdot\|$, тобто для будь-яких $x, y \in K$

$$\|F(x) - F(y)\|_* \leq L\|x - y\| \quad (4)$$

де $\|\cdot\|_*$ - спряжена норма.

Опукла оптимізація

Будемо вважати, що $K \subseteq \mathbb{R}^d$ є опуклою множиною і функція $f: K \rightarrow \mathbb{R}$ є опуклою на K . В опуклій оптимізації нашою ціллю є мінімізація функції f .

Визначимо функцію розриву і оператор F наступним чином:

$$\Delta(x, y) := f(x) - f(y), \quad \forall x, y \in K$$

$$F(x) := \nabla f(x), \quad \forall x \in K$$

Тоді за нерівністю субградієнтів для опуклих функцій звідси випливає, що Δ є сумісна функція розриву по відношенню до оператора F . Також $\Delta(x, y)$ є опуклою по відношенню до x . Звідси в цьому випадку розрив двоїстості є оптимальною величиною, тобто

$$DualGap(x) := \max_{y \in K} \Delta(x, y) = f(x) - \min_{y \in K} f(y)$$

Крім того, якщо f є L -опуклою функцією по відношенню до норми $\|\cdot\|$, то і самий оператор теж є опуклим до тієї ж норми.

Опукло-увігнуті ігри з нульовою сумою

Нехай функціонал $\varphi: U \times V \rightarrow \mathbb{R}$ опуклий в U та увігнутий в V , де $U \subseteq \mathbb{R}^{d_1}$, $U \subseteq \mathbb{R}^{d_2}$ є компактними множинами. Опукло-увігнута гра з нульовою сумою викликаний функціоналом φ визначається наступним чином

$$\min_{u \in U} \max_{v \in V} \varphi(u, v)$$

Нашим показником ефективності для подібних ігор буде розрив двоїстості, який визначимо як

$$DualGap(u, v) := \max_{v \in V} \varphi(u, v) - \min_{u \in U} \varphi(u, v) \quad (5)$$

Ця величина завжди буде невід’ємною і також ми шукаємо наближену точку рівноваги, тобто таку точку (u^*, v^*) , що $DualGap(u^*, v^*) = 0$

Дану постановку задачі також можна представити у вигляді задачі варіаційної нерівності. А саме як,

$$x := (u, v) \in U \times V, \text{ та } K := U \times V$$

Для будь-якого $x = (u, v)$, $x_0 = (u_0, v_0) \in K$ визначимо функцію розриву і оператор $F: K \rightarrow \mathbb{R}^{d_1+d_2}$ наступним чином

$$\Delta(x, x_0) := \varphi(u, v) - \varphi(u_0, v)$$

$$F(x) := (\nabla_u \varphi(u, v), -\nabla_v \varphi(u, v)).$$

Необхідно показати, що функція розривів Δ спричиняє розрив двоєстості з рівняння (5). Також із опукло-ввігнутості φ випливає, що $\Delta(x, x_0)$ – опукла по x .

Наступна лема показує, що функція розривів Δ є сумісною з оператором F .

Лема. Для будь-яких $x = (u, v)$, $x_0 = (u_0, v_0) \in U \times V$ виконується наступне:

$$\Delta(x, x_0) := \varphi(u, v) - \varphi(u_0, v) \leq F(x) \cdot (x - x_0)$$

Дзеркальний оператор для ігор з нульовою сумою

Для варіаційних нерівностей метод використовує дзеркальний оператор по множині K . Оскільки $K = U \times V$, то відповідно розділимо дзеркальний оператор на дві складові $R_U: U \rightarrow \mathbb{R}$ та $R_V: V \rightarrow \mathbb{R}$. З літератури [Nemirovksi 2011] візьмемо правильний спосіб вираження дзеркального оператора по K , використовуючи R_U та R_V .

Нехай R_U та R_V є 1-сильно опуклі по відношенню до норм $\|\cdot\|_u$ та $\|\cdot\|_v$, а $\|\cdot\|_u^*$ та $\|\cdot\|_v^*$ відповідно їхні спряжені норми. Тоді дзеркальний оператор буде мати вигляд

$$R_K(x) = \frac{1}{D_U^2} R_U(u) + \frac{1}{D_V^2} R_V(v) \quad \forall x = (u, v) \in K,$$

де $D_U^2 = \max_{u \in U} R_U(u) - \min_{u \in U} R_U(u)$ та $D_V^2 = \max_{v \in V} R_V(v) - \min_{v \in V} R_V(v)$.

Тоді $\forall x = (u, v) \in K$

$$\|x\|_K = \sqrt{\frac{\|u\|_U^2}{D_U^2} + \frac{\|v\|_V^2}{D_V^2}}$$

Ця норма є 1-сильно опукла функція відносно норми $\|\cdot\|_K$. Тоді її спряжена норма буде рівна

$$\|x\|_K^* = \sqrt{D_U^2(\|u\|_U^*)^2 + D_V^2(\|v\|_V^*)^2} \quad \forall x = (u, v) \in \mathbb{R}^{d_1} \times \mathbb{R}^{d_2}.$$

Опукла гра з нульовою сумою

Можна показати, що градієнтні відображення $\nabla_u \varphi(u, v)$ і $\nabla_v \varphi(u, v)$ є L-неперервними по відношенню до u і v , тоді оператор F також є гладким. Нехай $\|\cdot\|_u$ та $\|\cdot\|_v$ – норми над U і V , а $\|\cdot\|_u^*$ та $\|\cdot\|_v^*$ відповідно їхні спряжені норми. Тоді виконується наступне:

$$\forall u, u' \in U, \forall v, v' \in V,$$

$$\|\nabla_u \varphi(u, v) - \nabla_u \varphi(u', v)\|_u^* \leq L_{11} \|u - u'\|_u$$

$$\|\nabla_u \varphi(u, v) - \nabla_u \varphi(u, v')\|_v^* \leq L_{12} \|v - v'\|_v$$

$$\|\nabla_v \varphi(u, v) - \nabla_v \varphi(u, v')\|_v^* \leq L_{22} \|v - v'\|_v$$

$$\|\nabla_v \varphi(u, v) - \nabla_v \varphi(u', v)\|_u^* \leq L_{21} \|u - u'\|_u$$

Тоді, можна показати, що $\forall x, x' \in K$

$$\|F(x) - F(x')\|_K^* \leq L \|x - x'\|_K$$

де $L = 2 \max\{L_{11}D_U^2, L_{22}D_V^2, L_{12}D_uD_v, L_{21}D_uD_v\}$

Опис алгоритмів

У даному розділі розглянемо деякі алгоритми опуклої оптимізації, такі як Online Gradient Descent, Mirror-Prox та універсальний адаптивний Mirror-Prox.

ODG (online Gradient descent)

Завдання онлайнної опуклої оптимізації може бути сформульована як повторювана гра між гравцем і супротивником. На раунді t гравець вибирає дію x_t з деякої опуклої підмножини $K \subseteq \mathbb{R}^n$, а потім противник вибирає опуклу функцію втрат f_t . Гравець прагне до того, щоб загальні втрати, $\sum_{t=1}^T f_t(x_t)$, були не набагато більші, ніж найменший сумарний збиток $\sum_{t=1}^T f_t(x)$ будь-якої фіксованої дії x .

Різниця між сумарним збитком і його оптимальним значенням для фіксованої дії називається смутком, який ми позначаємо

$$Regret = \sum_{t=1}^T f_t(x_t) - \min_{x \in K} \sum_{t=1}^T f_t(x)$$

Багато проблем онлайн прогнозування окремих послідовностей можна розглядати як окремі випадки онлайн опуклої оптимізації, включаючи прогнозування за допомогою порад експертів, послідовний розподіл ймовірностей і послідовне інвестування. Центральним питанням у всіх цих випадках є те, як зростає смуток зі збільшенням кількості раундів гри.

Метою цієї гри є мінімізація смутку по відношенню до будь-якого конкурентного f_t .

Також важливо пам'ятати, чому мінімізація смутку є хорошою метою: враховуючи, що ми нічого не припускаємо про те, як противник генерує функції втрат, мінімізація смутку є хорошою метрикою, яка враховує складність проблеми. Якщо алгоритм онлайн-навчання здатний гарантувати сублінійний смуток, це означає, що його продуктивність в середньому наближається до продуктивності будь-якої фіксованої стратегії. Як вже було сказано, ми

побачимо, що в багатьох ситуаціях, якщо противник "слабкий", наприклад, є фіксованим стохастичним розподілом по функціям втрат, то готовність до найгіршого сценарію не завадить нам у будь-якому випадку отримати найкращу гарантію.

Розглянемо алгоритм послідовного градієнтного спуску з кроком $\eta_t = O(1/\sqrt{t})$.

Алгоритм 1 Online Gradient Descent (OGD)

1: Вхід: довільне x_t .

2: початок циклу $t = 1 \dots T$ виконувати

3: Передбачити x_t , спостерігатимемо f_t .

4: Оновимо $x_{t+1} = \Pi_K(x_t - \eta_{t+1} \nabla f_t(x_t)) = \arg \min_{x \in K} \|x_t - \eta_t \nabla f_t(x_t) - x\|_2$

5: кінець циклу

де $\Pi_K(x)$ - Евклідова проекція x на опуклу множину K .

Спочатку згадаємо дві леми, перша з них доводить, що Евклідова проекція завжди знижує відстань між точками всередині множини.

Лема 1. Нехай $x \in \mathbb{R}^n$ і $y \in K$, де $K \subseteq \mathbb{R}^n$ є непорожньою закритою множиною і визначимо Евклідову проекцію

$$\Pi_K(x) = \arg \min_{y \in K} \|x - y\|_2.$$

Тоді

$$\left\| \Pi_K(x) - y \right\|_2 \leq \|x - y\|_2.$$

Наступна лема обмежує зверху смуток в одній ітерації алгоритму.

Лема 2. Нехай $K \subset \mathbb{R}^n$ замкнена непорожня опукла множина і $f_t: \mathbb{R}^n \rightarrow (-\infty, +\infty]$ є опуклою функцією, диференційовною в відкритій множині, що містить K . Тоді $\forall y \in K$ виконується наступне

$$\begin{aligned}\eta_t(\nabla f_t(x_t) - \nabla f_t(y)) &\leq \eta_t \langle \nabla f_t(x_t), x_t - y \rangle \\ &\leq \frac{1}{2} \|x_t - y\|_2^2 - \frac{1}{2} \|x_{t+1} - y\|_2^2 - \frac{\eta_t^2}{2} \|\nabla f_t(x_t)\|_2^2.\end{aligned}$$

Рахлін і Східхаран припустили у своїй праці [2], що крім функцій витрат f_t можна також отримувати допоміжні “вектори-підказки” $M_t \in \mathbb{R}^n$. Тобто у кожному раунді t , перед вибором x_t гравець отримує на розгляд вектор-підказку $M_t \in \mathbb{R}^n$. Тоді ці вектори є хорошими передбаченнями для векторів витрат, тобто $M_t \approx f_t$.

$$x_t \leftarrow \arg \min_{x \in K} M_t \cdot x + \frac{1}{\eta_t} D_R(x, y_{t-1}), \text{ та } y_t \leftarrow \arg \min_{x \in K} M_t \cdot x + \frac{1}{\eta_t} D_R(x, y_{t-1}), \quad (5)$$

де $R(\cdot)$ – 1-сильно опукла функція на K по відношенню до данної норми $\|\cdot\|$, $D_R(\cdot)$ - розбіжність Брегмана функції R .

Mirror-Prox

Mirror-Prox є популярним алгоритмом для розв’язування опукло-ввігнутих мінімаксних задач. Він збігається зі швидкістю $O\left(\frac{1}{T}\right)$ для первинного двоїстого розриву. Сам алгоритм був розроблений Аркадієм Неміровським для мінімізації гладкої опуклої функції f на компактній опуклій множині $X \in \mathbb{R}^n$.

Нехай $\Phi: D \rightarrow \mathbb{R}$ буде відповідністю на X і $x_i \in \underset{x \in X \cap D}{\operatorname{argmin}} \Phi(x)$. Тоді алгоритм

MirrorProx описується наступними рівняннями:

$$\nabla \Phi(y'_{t+1}) = \nabla \Phi(x_t) - \eta \nabla f(x_t)$$

$$y_{t+1} \in \underset{x \in X \cap D}{\operatorname{argmin}} D_\Phi(x, y'_{t+1})$$

$$\nabla \Phi(x'_{t+1}) = \nabla \Phi(x_t) - \eta \nabla f(y_{t+1})$$

$$x_{t+1} \in \underset{x \in X \cap D}{\operatorname{argmin}} D_\Phi(x, x'_{t+1})$$

Алгоритм спочатку робить крок Дзеркального спуску з x_t до y_{t+1} . Потім він робить аналогічний крок, щоб отримати x_{t+1} , починаючи з x_t , але цього разу

використовуючи градієнт f , обчислений в y_{t+1} , замість x_t . Кожний крок є узагальненою проекцією відносно розбіжності Брегмана D_Φ .

Важливість MirrorProx переважно полягає у його застосуванні для обчислення сідлової точки гладкої опукло-ввігнутої функції. Дійсно, ключове спостереження в тому, що багато негладких опуклих функцій можна представити у гладкому вигляді. З таким представленням MirrorProx збігається зі швидкістю $O\left(\frac{1}{T}\right)$, навіть якщо первинна функція була негладкою.

Основна ідея (MP) полягає в тому, що при кожному $t = 1, 2, \dots$ оракул викликається в базовому стані x_t для генерації проміжного, провідного стану $x_{t+1/2}$; згодом базовий стан оновлюється інформацією оракула з провідного стану $x_{t+1/2}$, і процес повторюється. В зв'язку з цим, MirrorProx, по суті, намагається "передбачити" зміну Φ уздовж кроку і використовувати цю "випереджальну" інформацію для досягнення більш високої швидкості збіжності, ніж звичайні схеми прямого / зворотного / градієнтного спуску. Для того щоб ця випереджальна схема працювала, варіація оператора Φ має бути досить поступовим, звідси необхідність безперервності по Ліпшицю. Якщо ця варіація не обмежена, цей механізм випередження може повністю зламатися, і алгоритм може не сходитися взагалі.

Алгоритм 2: Mirror-Prox

Вхід: T – кількість ітерацій

$$y_0 = \arg \min_{x \in X} R(x)$$

$$x_0 = y_0$$

для $t = 1..T$ виконувати:

$$m_t = F(y_{t-1})$$

$$x_t = \arg \min_{x \in X} \{\eta_t \langle m_t, x_t \rangle + D_R(x, y_{t-1})\}$$

$$g_t = F(x_t)$$

$$y_t = \arg \min_{x \in X} \{ \eta_t \langle g_t, x_t \rangle + D_R(x, y_{t-1}) \}$$

Повертаємо: $\bar{x}_T = \frac{1}{T} \sum_{t=1}^T x_t$

Алгоритм 2 представляє загальну схему для алгоритму Mirror Prox. На кожній ітерації t , він використовує поточне значення y_{t-1} і $F(y_{t-1})$ для обчислення екстраполявання прогнозу x_{t-1} . На наступній ітерації значення y_t виходить шляхом обчислення оператора $F(x_t)$ в екстраполювати точці x_t і використовуючи розбіжність з y_{t-1} . У класичному Mirror Prox, η_t залежить від параметра гладкості або верхньої межі норми оператора. В універсальному Mirror Prox, η_t залежить від y_{t-1} , x_t і y_t і слабо залежить від варіації R по X або так званого брегмановського діаметра X . Зауважимо, що на виході алгоритму Mirror Prox використовується Ергодичне середнє екстраполюваних точок x_t . В алгоритмі 1, якщо ми поставимо $R = \frac{1}{2} \|\cdot\|_2$, то отримаємо екстраградієнтний алгоритм для евклідового простору.

Адаптивна схема

У праці [2] була представлена наступна швидкість навчання для онлайн градієнтного методу

$$\eta_t = D / \max \left\{ \sqrt{\sum_{t=1}^{t-1} \|g_t - M_t\|^2} + \sqrt{\sum_{t=1}^{t-2} \|g_t - M_t\|^2}, 1 \right\}.$$

Ціль адаптивної схеми в тому, щоб пристосувати метод до гладкості та шуму цільової функції, дозволяючи гравцям комунікувати. У праці [1] була запропонована наступна схема

$$\eta_t = D / \sqrt{G_0^2 + \sum_{\tau=1}^{t-1} Z_\tau^2}, \quad Z_\tau^2 = \frac{\|x_\tau - y_\tau\|^2 + \|x_\tau - y_{\tau-1}\|^2}{5\eta_\tau^2},$$

де $G_0 > 0$ – довільна константа. Найкращим вибором для G_0 буде найбільша вища границя на спряжених нормах g_t та M_t , яку ми позначатимемо за G .

Наприклад $G = \max_{t \in [T]} \max \{\|g_t\|_*, \|M_t\|_*\}$. Ми не маємо ніяких знань щодо G , проте знаємо D .

$$D = \max_{x \in X} R(x) - \min_{x \in X} R(x)$$

Враховуючи, що $Z_\tau \in [0, G]$ для будь-яких $\tau \geq 1$ буде мати місце наступна лема.

Лема 3. Нехай G буде границею спряжених норм $\|g_t\|_*, \|M_t\|_*$. Тоді для x_t, y_t, y_{t-1} , які використовувались у методі Online Gradient Descent, буде виконуватись

$$\|x_\tau - y_{\tau-1}\|/\eta_t \leq G, \text{ та } \|y_\tau - y_{\tau-1}\|/\eta_t \leq G$$

На даний момент було розглянуто онлайн випадок, де “вектори-підказки” і вектори втрат можуть мінятись довільно. Зараз розглянемо випадок, де існує така функція розриву $\Delta: K \times K \rightarrow \mathbb{R}$, що є сумісною з даним оператором $F: K \rightarrow \mathbb{R}^d$. У нашій постановці наша ціль мінімізувати функцію двоїстого розриву, породжену Δ . Для цього виберемо $g_t = F(x_t)$ і $M_t = F(y_{t-1})$.

Таким чином розглянемо алгоритм, що слугуватиме нам для розв’язування варіаційних нерівностей.

Алгоритм 3 Універсальний Mirror-Prox

Вхід: T – кількість ітерацій, $y_0 = \arg \min_{x \in X} R(x)$, швидкість навчання $\{\eta_t\}_t$

Початок циклу: для $t = 1..T$ виконувати

$$M_t = F(y_{t-1})$$

$$x_t = \arg \min_{x \in X} M_t \cdot x + \frac{1}{\eta_t} D_R(x, y_{t-1})$$

$$g_t = F(x_t)$$

$$y_t = \arg \min_{x \in X} g_t \cdot x + \frac{1}{\eta_t} D_R(x, y_{t-1})$$

Кінець циклу

Вивід: $\bar{x}_T = \frac{1}{T} \sum_{t=1}^T x_t$

Чисельні дослідження

У цьому розділі було проведено чисельні дослідження алгоритмів, наведених у попередньому розділі. Для експериментів було вибрано матричні ігри, логістична та лінійна регресія.

Матричні ігри в змішаних стратегіях

У цьому експерименті будемо знаходити точку рівноваги Неша для матричної гри. Тобто прийдеться розв'язати задачу сідлової точки:

$$\min_{x \in \Delta_n} \max_{y \in \Delta_m} x^T A y,$$

де $x = (x_1, x_2, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n$ та $y = (y_1, y_2, \dots, y_m) \in \mathbb{R}^m$, Δ_n – це стандартний симплекс в $\mathbb{R}^n$, тобто $\Delta_n = \{(t_1, t_2, \dots, t_n) \mid t_i \geq 0, \sum_{i=1}^n t_i = 1\}$, Δ_m – стандартний симплекс в $\mathbb{R}^m$, A – матриця виграшів для y -го гравця. В усіх експериментах розподіли виграшу центровані в нулі. Візьмемо оператор $g(u)$, який є монотонним на $K = \Delta_n \times \Delta_m$.

$$g(u) = \begin{pmatrix} \nabla_x(x^T A y) \\ -\nabla_y(x^T A y) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A^T y \\ -A x \end{pmatrix},$$

де $u = (x, y) \in K$. З цим оператором варіаційна нерівність (4) має такий же розв'язок що і задача сідлової точки. Отже, можна використати представлений алгоритм Мілгром-Прох для знаходження розв'язку.

Для розбіжності Брегмана для матричних ігор будемо використовувати ентропійну прокси-функцію:

$$f(x) = \sum_{i=1}^n x_i \ln x_i$$

Спочатку обчислимо експериментальну кількість ітерацій для адаптивного методу і порівняємо з теоретичним наближенням $N = \frac{C}{\varepsilon}$, для деякого $C > 0$. Для цього експерименту ми проведемо симуляцію двох класів випадкових матричних ігор розмірності 10×10 та 100×100 з нормально розподіленими матрицями виплат. Для цієї постановки ми створюємо 50 випадкових ігор і рахуємо середню експериментальну кількість ітерацій для всіх ігор. На рисунку 1 зображені результати для різних ε .

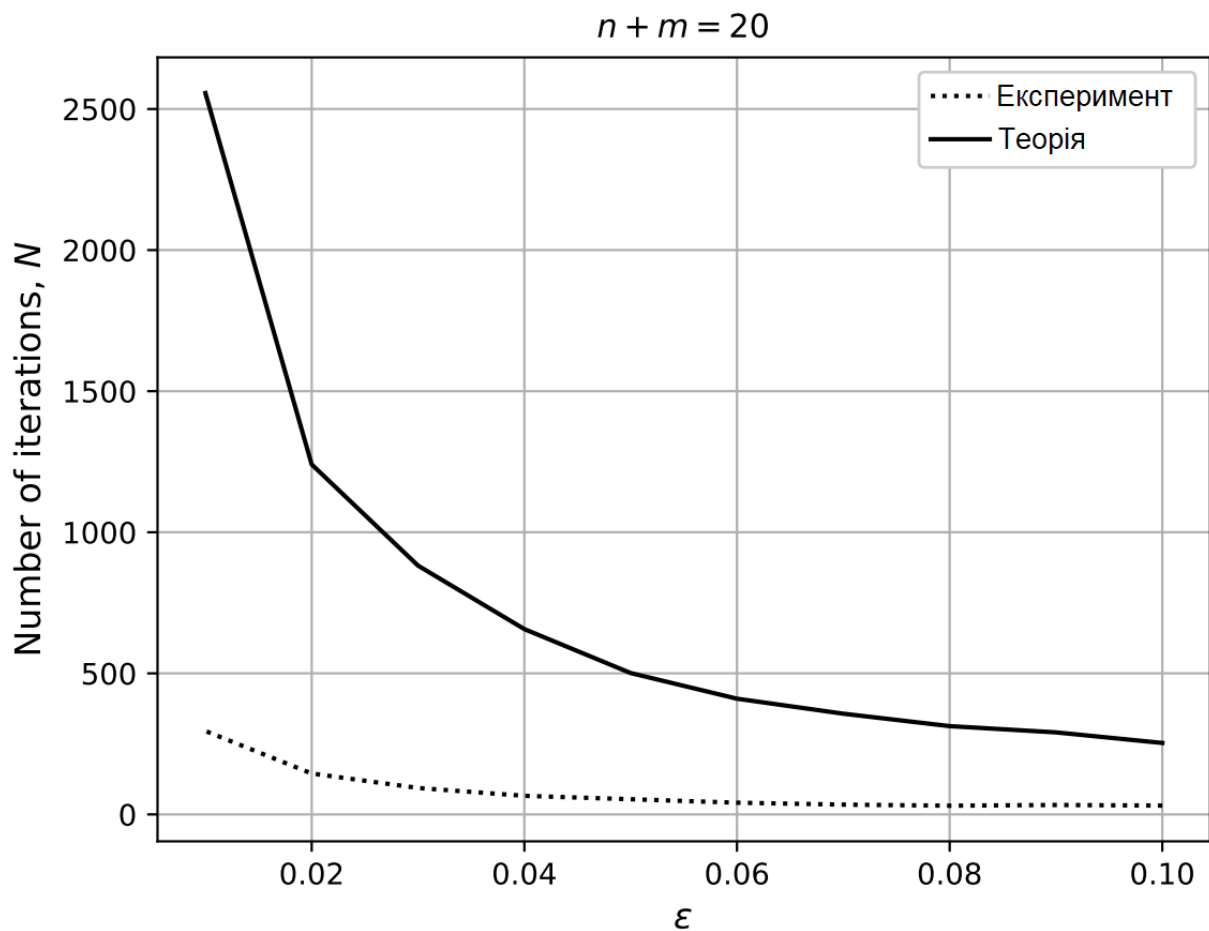


Рис. 1. Кількість ітерацій для матриць A , розмірності 10×10

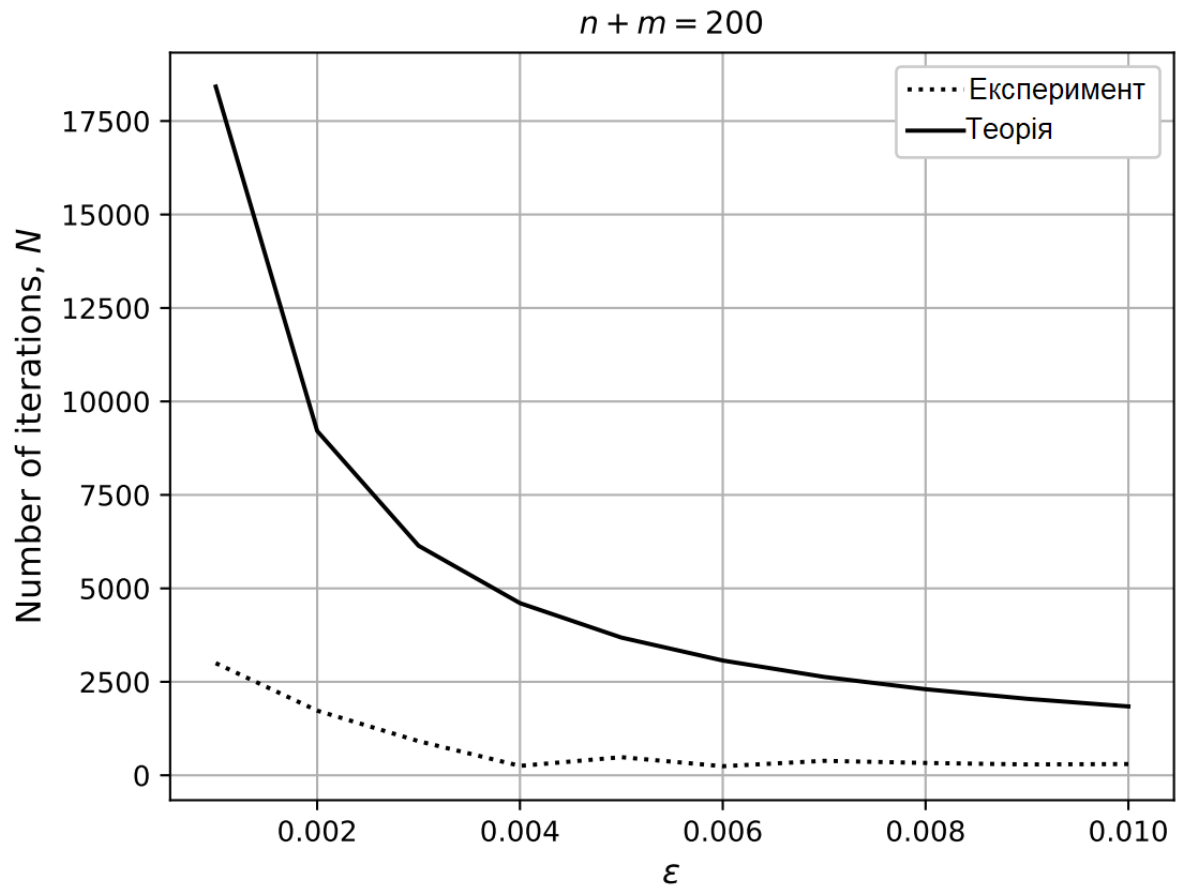


Рис. 2. Кількість ітерацій для матриць A розмірності 10×10

З рисунків можемо зробити висновок, що експериментальна кількість ітерацій менша, ніж теоретична в усіх випадках.

Логістична регресія

Для проведення наступних експериментів була використана вибірка чоловіків у регіоні з високим ризиком серцево судинних захворювань у Південній Африці, описаний у Медичному Журналі Південної Африки.

Після нормалізації даних, ініціалізуємо випадковим чином ваги $\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_n$ в межах $[0,1)$. Далі визначимо сигмоїду

$$S(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}},$$

де $x = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \dots + \beta_n x_n$.

Для обчислення бінарної кросс-ентропійної функції втрат виберемо наступну функцію

$$RMSE = \sqrt{\sum \frac{y_t \log(1 - \bar{y}_t) + (1 - y_t) \log(\bar{y}_t)}{T}}.$$

І за допомогою Mirror-Prox та Online Gradient Descent мінімізуємо функцію витрат. На наступних рисунках представлені результати методів при різних кількостях ітерацій.

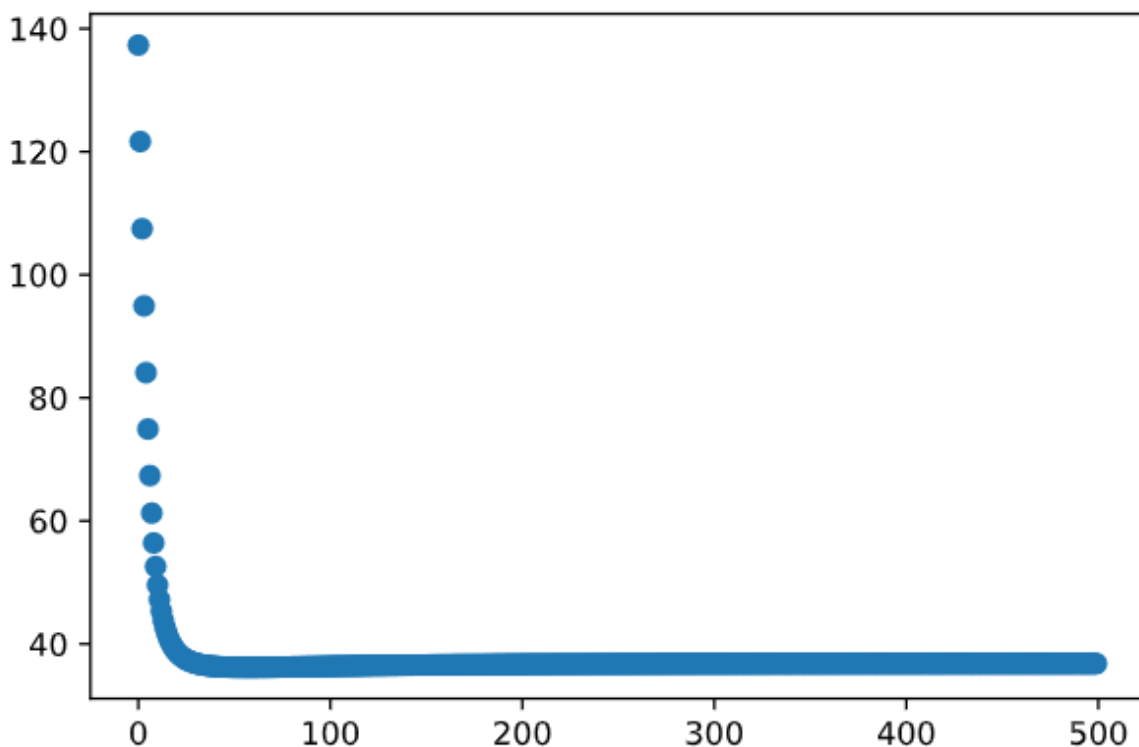


Рис. 3 Логістична регресія з Mirror-Prox

На рисунку 3 представлені результати роботи методу Mirror-Prox. Як бачимо, функція втрат досягла мінімуму приблизно за 50 ітерацій. Отже, швидкість збіжності цього методу досить висока, що не можна сказати про Online Gradient Descent. Результати даного методу представлені на рисунку 4. Функція витрат мінімізувалась майже за 1000 ітерацій.

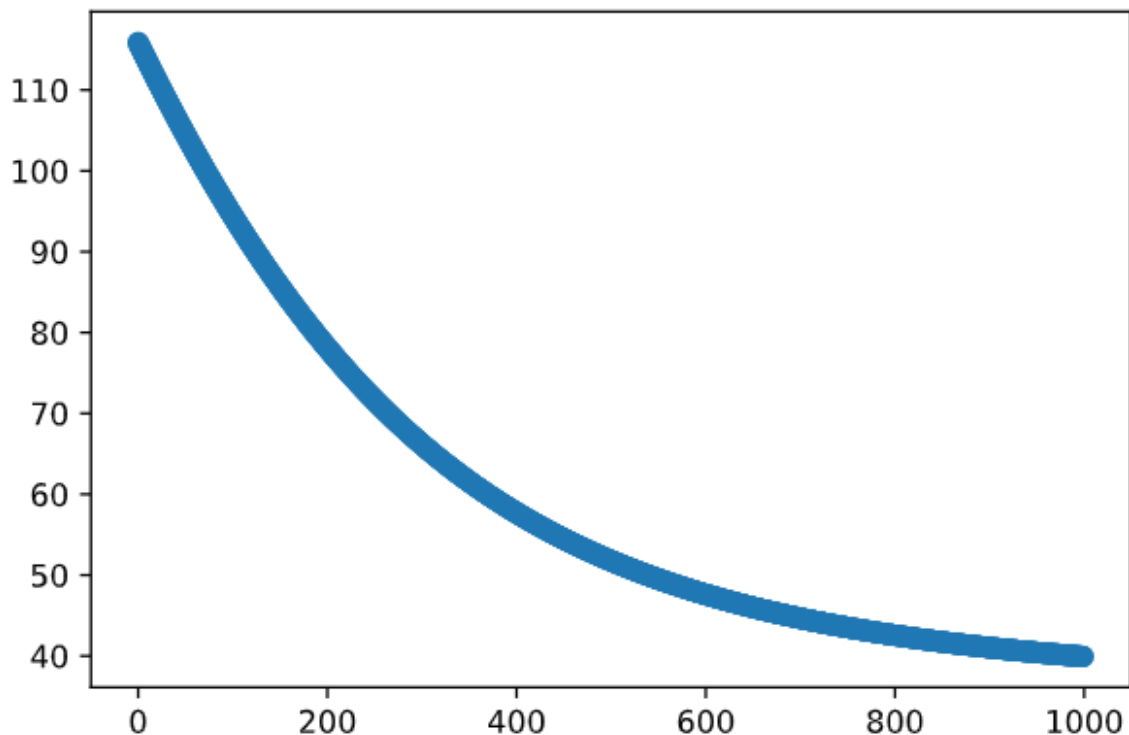


Рис. 4 Логістична регресія з Online Gradient Descent

Лінійна регресія

Продовжимо перевіряти ефективність алгоритму Mirror-Prox на лінійній регресії.

Задано набір з тисячі точок, у яких абсцису задаємо як i , а ординату як $\frac{i}{2} + \gamma$, де γ – випадковий шум в межах $[0; 20)$. Ціль лінійної регресії буде в пошуку такої лінії, яка буде найкраще відповідати заданим точкам. Для кращої роботи, дані будуть нормалізовані.

Рівняння шуканої прямої задано звичайним рівнянням прямої.

$$y(x) = k \cdot x + b \quad (6)$$

Для підгонки коефіцієнтів використаємо представлений метод Mirror-Prox, Adam і OGD. Результати представлені на рисунках. Червоним кольором Adam, синім OGD, зеленим – Mirror-Prox.

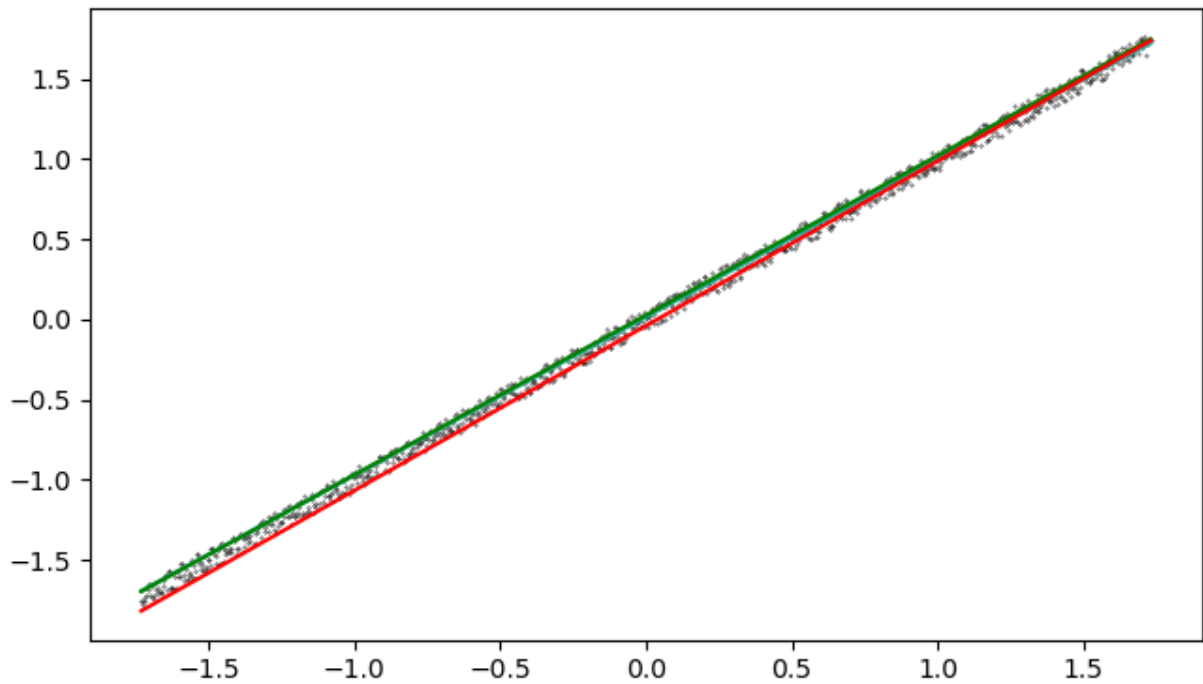


Рис. 5 Візуалізація лінійної регресії

Функцією витрат обрано середньоквадратичне відхилення

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y(x_i) - y_i)^2},$$

де n – кількість точок, y – функція з формули (6).

З результатів можна зробити висновок, що Мілтор-Прокх збігається з найменшою похибкою серед даних методів. Графік похибок представлений нижче.

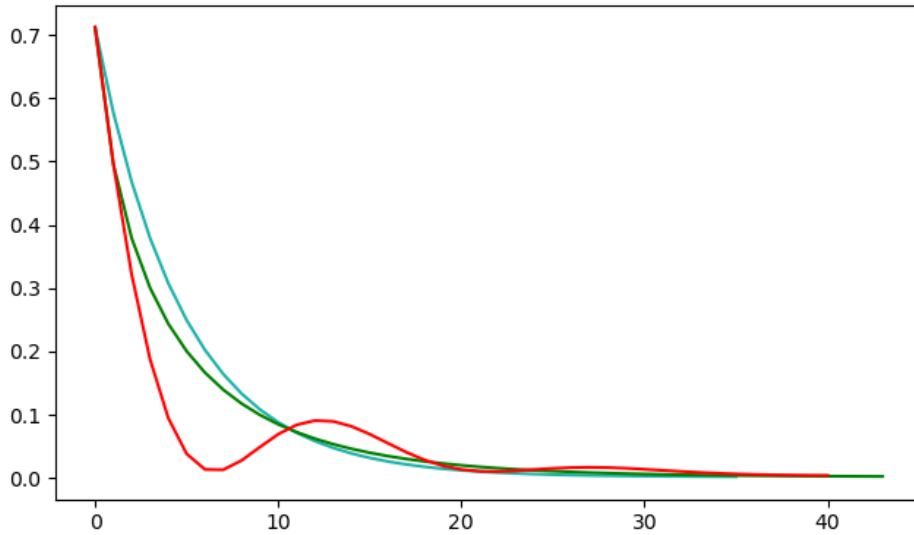


Рис. 6 Візуалізація похибки

Проблема спільного використання ресурсів

Розглянемо множину ресурсів $r \in \mathcal{R} = \{1, \dots, R\}$, які обслуговують потік потреб, які надходять зі швидкістю ρ в одиницю часу. Прикладом слугуватиме кластер графічних процесорів або обчислювальна мережа, яка опрацьовує потік завдань. Нехай навантаження на ресурс r становить x_r , очікуваний час обробки у стандартній моделі буде заданий наступною функцією втрат

$$l_r(x_r) = \frac{1}{c_r - x_r},$$

де c_r – потужність ресурсу.

У даній постановці множиною виконуваних розподілів ресурсів буде

$$X = \{(x_1, \dots, x_R): 0 \leq x_r \leq c_r, x_1 + \dots + x_R = \rho\}.$$

Нехай розподіл ресурсів $x^* \in X$ знаходиться в рівновазі Неша, якщо

$\forall x \in X$ і $\forall r \in R$, таких що x_r^* виконується

$$l_r(x_r^*) \leq l_r(x_r),$$

тобто немає роботи, яку б потрібно було б перемістити в іншу чергу. Нехай $A: X \rightarrow R$, такий що $A(x) = (l_1(x_1), \dots, l_R(x_R))$. Якщо x^* буде розв'язком варіаційної нерівності для A

$$\langle A(x^*), x - x^* \rangle \geq 0, \quad \forall x \in X,$$

то розподіл x^* буде врівноважений.

Проведено чисельні експерименти по даній задачі з набором $R = 1000$ серверів, розділеними між $N = 100$ клієнтами, кожен з яких має потребу в ресурсах, вибраною випадковим чином з проміжку $[0,1]$. Визначимо потужність c_r кожного сервера $r = 1, \dots, R$ випадковим чином з проміжку $[0,100]$. Для пошуку розв'язку були використані екстраградієнтний, Mirror-Prox та адаптивний Mirror-Prox методи зі сталими кроками $\gamma = 0.001$, $\gamma = 0.005$ та $\gamma = 0.01$.

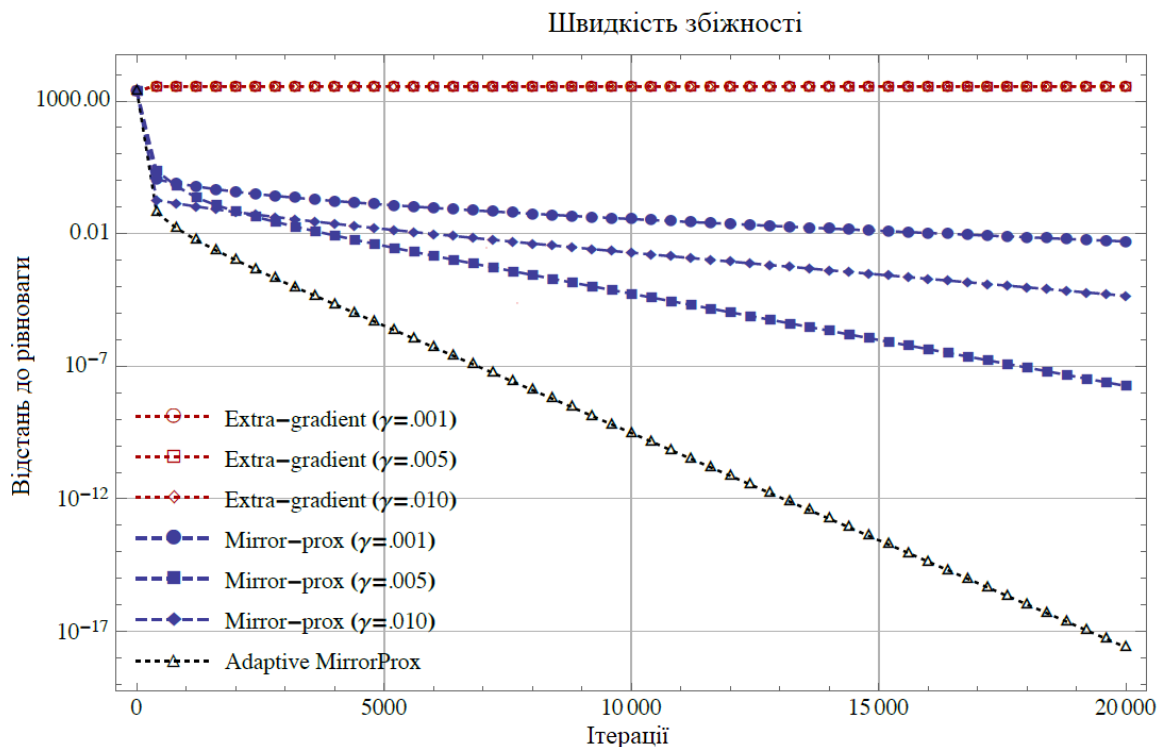


Рис. 7. Швидкості збіжності обраних методів

Екстраградієнтний метод виявився нестабільним та не збігається. Звичайний Mirror-Prox є збіжним, але в залежності від розміру кроку, збігається відносно повільно. Представлений адаптивний Mirror-Prox збігається значно швидше, ніж інші методи.

Висновки

У цій роботі було розглянуто адаптивні методи для опукло-увігнутої оптимізації, а саме представлена універсальна адаптивна схема алгоритму Mirror-Prox. Особлива увага була приділена питанню еквівалентності постановок задачі оптимізації для пошуку рівноваги Неша матричних ігор та розв'язку варіаційних нерівностей. Згідно результатів можна зробити висновок, що адаптивні алгоритми дозволяють отримувати доволі точний розв'язок для даних з шумом. Також варто звернути увагу, що представлена універсальна схема показала хороший результат для задач спільного використання ресурсів.

Дані методи уже використовуються у машинному навчанні, а особливо у навчанні нейронних мереж для робіт із фотографіями. Також алгоритми можуть знайти місце у оптимізації біологічних та хімічних реакцій та банківій справі, де відбувається дуже багато різних операцій, таких як переклади, списання та поповнення грошей.

По представленій у роботі схемі було розроблено універсальний Mirror-Prox, використовуючи мову програмування Python.

Адаптивні методи опукло-увігнутої оптимізації належать до маловивченої галузі математики, тому подальші дослідження в цьому напрямку будуть актуальними ще досить довго.

Список літератури

1. “A Universal Algorithm for Variational Inequalities Adaptive to Smoothness and Noise”, Francis Bach, Kfir Y. Levy, 2019
2. “Optimization, learning, and games with predictable sequences”, Rakhlin S., Sridharan, K, 2013, ст 3066-3074
3. “Mirror Descent and Convex Optimization Problems With Non-Smooth Inequality Constraints”, Bayandina A., Dvurechensky P., Gasnikov A., Stonyakin F., Titov A., 2018
4. “Non-convex Min-Max Optimization: Applications, Challenges, and Recent Theoretical Advances”, Meisam Razaviyayn, Tianjian Huang, Songtao Lu, Maher Nouiehed, Maziar Sanjabi, Mingyi Hong, 2020
5. “Адаптивный проксимальный метод для вариационных неравенств”, Ф. С. Стонякин, А. В. Гасников, П. Е. Двуреченский, А. А. Титов, 2018
6. “Adaptive Online Gradient Descent”, Peter L. Barlett, Elad Hazan, Alexandr Rakhlin, 2007
7. “New Version of Mirror Prox for Variational Inequalities with Adaptation to Inexactness”, Fedor S. Stonyakin, Evgeniya A. Vorontsova, Mohammad S. Alkousa, 2019