Автоматика и телемеханика, № 2, 2011

© 2011 г. **А.В. НАЗИН, д-р физ.-мат. наук,**
Б.Т. ПОЛЯК, д-р техн. наук
(Институт проблем управления им. В. А. Трапезникова РАН, Москва)

РАНДОМИЗИРОВАННЫЙ АЛГОРИТМ НАХОЖДЕНИЯ СОБСТВЕННОГО ВЕКТОРА СТОХАСТИЧЕСКОЙ МАТРИЦЫ С ПРИМЕНЕНИЕМ К ЗАДАЧЕ PAGERANK

Рассматривается задача оценивания собственного вектора, соответствующего наибольшему собственному значению стохастической матрицы. Известны многочисленные ее приложения, возникающие при ранжировании результатов поиска, согласованности действий мультиагентных систем, при управлении в сетях и анализе данных. Стандартная техника решения этой задачи сводится к степенному методу, но при дополнительной регуляризации исходной матрицы. Предлагается новый рандомизированный алгоритм и обосновывается равномерная (во всем классе стохастических матриц данной размерности) верхняя граница скорости сходимости вида $C\sqrt{\ln(N)/n}$, где C – абсолютная постоянная, N – размерность, а n – число итераций. Эта граница представляется обнадеживающей, поскольку величина $\ln(N)$ совсем не велика для очень большой размерности. Алгоритм основан на методе зеркального спуска для задач выпуклой стохастической оптимизации. Обсуждается возможность применения метода к задаче PageRank о ранжировании страниц в Интернете.

1. Введение

Пусть A – стохастическая $(N \times N)$-матрица, т.е. ее столбцы содержатся в стандартном симплексе $\Theta_N = \left\{x \in \mathbb{R}^N \,|\, \forall\, x_i \geqslant 0, \sum_{i=1}^N x_i = 1\right\}$. По теореме Перрона–Фробениуса она имеет хотя бы один собственный вектор, отвечающий наибольшему (по модулю) собственному значению (равному 1), т.е. $Ax_* = x_*$ при $x_* \in \Theta_N$. Отыскание этого собственного вектора является одной из основных задач численного анализа и многочисленных приложений, возникающих при ранжировании результатов поиска, согласованности действий мультиагентных систем, при управлении в сетях и анализе данных. Достаточно упомянуть известную задачу PageRank о ранжировании страниц – основное средство ранжирования для поиска в Google, см. оригинальную статью [1] и недавнюю монографию [2], где можно найти много ссылок. Типичным для таких приложений является огромная размерность. Например, при ранжировании страниц их число N равно нескольким миллиардам. Стандартная техника решения этой задачи сводится к степенному методу. Начиная с начальной аппроксимации $x_0 \in \Theta_N$ метод вычисляет итерации $x_{k+1} = Ax_k$, и при некоторых предположениях (например, если A имеет все положительные элементы) $\lim_{k\to\infty} x_k = x_*$, с учетом единственности x_* в этом случае. Этот метод очень прост и сходится с геометрической скоростью, см. [2]. Вычисление векторов Ax_k может быть легко выполнено, поскольку в типичных приложениях A разреженная. Тем не менее при огромном N метод требует серьезных вычислительных усилий: сообщается, что вычисления PageRank на суперкомпьютерах занимают около недели.

С учетом этого недавно было предложено несколько новых подходов. Некоторые из них учитывают блочную структуру матрицы, другие используют распределенные вычисления. Одно из направлений исследования основано на рандомизированных алгоритмах, см. недавнюю работу [3] и указанную там литературу. Такой подход имеет несколько преимуществ. Первое, каждая итерация существенно дешевле (в смысле объема вычислений), чем при степенном методе. Второе, эти алгоритмы легко позволяют реализовать их распределенные версии. Вообще рандомизированные алгоритмы играют значительную роль в современных методах управления и оптимизации [4]. Настоящая статья следует этой линии исследования (см. также [5, 6]).

Предлагается итеративный рандомизированный метод минимизации квадрата евклидовой нормы невязки $\|Ax - x\|_2^2$. На каждом шаге вычисляется стохастический градиент этой функции, который использует один столбец и одну-две строки матрицы A, выбранных случайным образом в зависимости от $x_k \in \Theta_N$ как вектора распределения в $\{1, \ldots, N\}$. Этот метод представляет собой версию общего стохастического метода зеркального спуска (или, иначе, прямодвойственного метода выпуклой стохастической оптимизации), идея которого восходит к [7] и развита в [8–11]. Получена граница $\mathbb{E}\|A\widehat{x}_n - \widehat{x}_n\|_2^2 \leqslant 8\dfrac{\sqrt{(n+1)\ln N}}{n}$, где оценка $\widehat{x}_n$ получена на n-й итерации (см. также [12]). Зависимость от размерности N в высшей степени слабая – даже для $N = 10^9$ получаем $\sqrt{\ln N} < 5$. Более того, граница выполняется для всех стохастических матриц, она не зависит от свойств конкретной матрицы A (например, она не зависит от второго собственного вектора матрицы, как в случае степенного метода). Интересно сравнить эту границу с полученной в [3], см. формулу (30), которая в наших обозначениях выглядит как $\mathbb{E}\|\widehat{x}_n - x_*\|_2^2 = O(N^{3/2}/n)$. В этом случае зависимость от n лучше, но зависимость от размерности представляется безнадежной: $O(N^{3/2})$. Подчеркнем, что полученная здесь граница справедлива при очень слабых предположениях; например, не предполагается единственности $x_* \in \Theta_N$.

2. Постановка задачи

Пусть $A = \|a_{ij}\|_{N\times N}$ – стохастическая матрица, т.е. ее столбцы представляют собой стохастические векторы $A^{(j)} = (a_{1j}, \ldots, a_{Nj})^T$: $\sum_{i=1}^N a_{ij} = 1, \forall\, a_{ij} \geqslant 0$. Множество всех таких стохастических матриц A обозначим через $\mathcal{A}_N$. Обозначим строки матрицы A как $A_{(i)} = (a_{i1}, \ldots, a_{iN})$, а стандартный симплекс как $\Theta_N = \{x \in \mathbb{R}^N \mid \forall\, x_i \geqslant 0, \sum_{i=1}^N x_i = 1\}$. Рассмотрим систему линейных уравнений

$$(1) \qquad Ax = x, \quad x \in \mathbb{R}^N.$$

В силу теоремы Перрона–Фробениуса существует хотя бы одно решение $x_* \in \Theta_N$ этой системы – стационарное распределение соответствующей марковской цепи. Множество таких решений образуют выпуклый компакт $X_* = \operatorname{Arg}\min\limits_{x\in\Theta_N} \|Ax - x\|_2 = \{x \in \Theta_N : Ax = x\}$. Если матрица A соответствует строго связной марковской цепи (или, что эквивалентно, неприводимой), то множество X_* состоит из единственной точки, т.е. собственный вектор x_*, отвечающий наибольшему абсолютному собственному значению (равному 1), единствен. При более строгом предположении положительности всех элементов матрицы A гарантируется сходимость степенного метода. В общем случае такой сходимости нет, например для $N = 2$, $a_{11} = a_{22} = 0$, $a_{21} = a_{12} = 1$. Ниже рассматривается общая ситуация, когда $A \in \mathcal{A}_N$, и цель состоит в отыскании произвольной точки в X_*, т.е. в минимизации

$$(2) \qquad Q(x) = \frac{1}{2}\,\|Ax - x\|_2^2 \;\to \min_{x\in\Theta_N}.$$

Идея итеративного алгоритма минимизации $Q(x)$ состоит в построении стохастического градиента этой функции с помощью случайного выбора строк и столбцов A и последующем применении метода зеркального спуска для минимизации в Θ_N.

3. Стохастический градиент

Пусть на k-й итерации получена оценка $x_k = (x_k^{(1)}, \ldots, x_k^{(N)})^T \in \Theta_N$. Тогда вектор $Ax_k = \sum_{j=1}^N A^{(j)} x_k^{(j)}$ может рассматриваться как условное математическое ожидание столбца $A^{(\eta_k)}$ со случайным индексом $\eta_k \in \{1, \ldots, N\}$, имеющем условное распределение вероятностей $(x_k^{(1)}, \ldots, x_k^{(N)})$, т.е.

$$\mathbb{P}\left(\eta_k = j \mid x_k\right) = x_k^{(j)}, \quad j = 1, \ldots, N. \tag{3}$$

Заметим, что впервые идея такой случайной реализации вектора Ax была высказана в [10]. Далее, градиент в (2) есть $\nabla Q(x) = (A - I)^T (A - I)x = A^T A x - A^T x - Ax + x$. Выберем второй случайный индекс $\xi_k \in \{1, \ldots, N\}$ с условным распределением вероятностей $(a_{1\eta_k}, \ldots, a_{N\eta_k})$, т.е. используем стохастический вектор $A^{(\eta_k)}$:

$$\mathbb{P}\left(\xi_k = i \mid x_k, \eta_k\right) = a_{i\eta_k}, \quad i = 1, \ldots, N. \tag{4}$$

Таким образом, последовательно выбирая два случайных индекса η_k и ξ_k, формируем реализацию стохастического градиента на текущей итерации, а именно:

$$\zeta_k \triangleq \left(A_{(\xi_k)}\right)^T - \left(A_{(\eta_k)}\right)^T - A^{(\eta_k)} + x_k. \tag{5}$$

Тогда, $\mathbb{E}\left(\zeta_k \mid x_k\right) = \nabla Q(x_k)$, поскольку

$$\begin{aligned}
&\mathbb{E}\left(\zeta_k \mid x_k\right) = \mathbb{E}\left\{\mathbb{E}\left(\zeta_k \mid x_k, \eta_k\right) \mid x_k\right\} = \\
&= \sum_{i,j=1}^N x_k^{(j)} a_{ij} \left(A_{(i)}\right)^T + x_k - A^T x_k - A x_k = \\
&= \left(A^T A - A^T - A + I\right) x_k = \nabla Q(x_k).
\end{aligned}$$

Отметим важное свойство вектора ζ_k в (5): его ∞-норма ограничена двойкой, т.е.

$$\|\zeta_k\|_\infty \leqslant \|\left(A_{(\xi_k)}\right)^T - \left(A_{(\eta_k)}\right)^T\|_\infty + \|x_k - A^{(\eta_k)}\|_\infty \le 2. \tag{6}$$

Это неравенство позволяет контролировать квадратичный член движения алгоритма (т.е. изменения взвешенной суммы стохастических градиентов в двойственном пространстве); см. предложение 3 и его доказательство, изложенные в Приложении.

4. Общий вид рандомизированного алгоритма

В Приложении (см. разделы П1 и П2) изложен ряд определений и некоторых фактов из выпуклого анализа [13], которые поясняют структуру метода зеркального спуска и соответствующие алгоритмы. Общий рандомизированный алгоритм содержит две сопряженные переменные:

а) ψ_k – переменная двойственного пространства; она основана на реализациях стохастического градиента ζ_k и представляет собой результат изменения взвешенной суммы стохастических градиентов в этом пространстве;

б) x_k – переменная исходного пространства, представляющая собой “зеркальное отображение” ψ_k в исходное пространство – проектирование ψ_k на Θ_N.

Для правильной настройки алгоритма существенны следующие две последовательности: $(\gamma_k)_{k\geqslant 0}$ (шаговый множитель) и $(\beta_k)_{k\geqslant 0}$ (“температура”) со свойством неубывания: $\beta_k \geqslant \beta_{k-1}$, $\forall\, k \geqslant 1$. Алгоритм зеркального спуска в своей основе использует энтропийную прокси-функцию $V(\theta) = \ln N + \sum_{j=1}^{N} \theta^{(j)} \ln \theta^{(j)}$, β-сопряженную функцию Лежандра-Фенхеля $W_\beta : \mathbb{R}^N \to \mathbb{R}$ и ее потенциал Гиббса $\nabla W_\beta : \mathbb{R}^N \to \Theta_N$:

$$W_\beta(z) = \beta \ln \left(\frac{1}{N} \sum_{k=1}^{N} e^{-z^{(k)}/\beta} \right), \tag{7}$$

$$\frac{\partial W_\beta(z)}{\partial z^{(j)}} = -e^{-z^{(j)}/\beta} \left(\sum_{k=1}^{N} e^{-z^{(k)}/\beta} \right)^{-1}, \quad j = 1, \ldots, N. \tag{8}$$

Пусть задана стохастическая матрица $A \in \mathcal{A}_N$. Общий алгоритм записывается следующим образом.

1. Фиксируются начальные значения $x_0 \in \Theta_N$ и $\psi_0 = 0 \in \mathbb{R}^N$. Определяются положительные числовые последовательности $(\gamma_k)_{k\geqslant 0}$ и $(\beta_k)_{k\geqslant 0}$, а также задается временной горизонт $n \geq 1$.
2. При каждом $k = 0, \ldots, n-1$, когда определены x_k и ψ_k, разыгрываются два случайных индекса η_k и ξ_k соответственно условным распределениям (3) и (4), вычисляется реализация стохастического градиента ζ_k (5), затем выполняется текущий рекуррентный пересчет:

$$\begin{aligned} &\psi_{k+1} = \psi_k + \gamma_k \zeta_k, \\ &x_{k+1} = -\nabla W_{\beta_k}(\psi_{k+1}), \end{aligned} \tag{9}$$

   где ∇W_β задается формулой (8).
3. На n-м шаге определяется выпуклая комбинация – основная оценка

$$\widehat{x}_n = \left(\sum_{k=0}^{n} \gamma_k \right)^{-1} \sum_{k=0}^{n} \gamma_k x_k. \tag{10}$$

5. Рекуррентный алгоритм и основной результат

Выберем конкретные последовательности $(\gamma_k)_{k\geqslant 0}$ и $(\beta_k)_{k\geqslant 0}$:

$$\gamma_k \equiv 1, \quad \beta_k = \beta_0 \sqrt{k+1}, \quad k = 0, 1, \ldots; \tag{11}$$

здесь

$$\beta_0 = 2(\ln N)^{-1/2}. \tag{12}$$

Таким образом, алгоритм принимает вид: $\forall\, k = 0, 1, \ldots, n$,

$$\psi_{k+1} = \psi_k + \zeta_k, \tag{13}$$

$$x_{k+1} = -\nabla W_{\beta_k}(\psi_{k+1}), \tag{14}$$

$$\widehat{x}_{k+1} = \widehat{x}_k - \frac{1}{k+1} (\widehat{x}_k - x_k) \tag{15}$$

с начальными условиями $\psi_0 = 0$, $x_0 \in \Theta_N$ и параметрами $(\beta_k)_{k\geqslant 0}$ из (11), (12). Также используется формула (8) в (14) и обозначение вектора ζ_k в (5). Заметим, что рекуррентная форма (15) априори не требует знания горизонта n и алгоритм является полностью рекуррентным.

Т е о р е м а 1. Пусть $N \geqslant 2$, стохастическая матрица $A \in \mathcal{A}_N$, а оценка $\widehat{x}_n$ определена рандомизированным алгоритмом (11)–(15) со стохастическим градиентом (5). Тогда для всякого $n \geqslant 1$ выполняется неравенство

$$\mathbb{E}\,\|A\widehat{x}_n - \widehat{x}_n\|_2^2 \leqslant 8\,(\ln N)^{1/2}\,\frac{\sqrt{n+1}}{n}. \tag{16}$$

Доказательство теоремы 1 использует методы [9] и приводится в Приложении.

6. Обсуждение и комментарии

Укажем несколько способов изменения алгоритма с целью улучшения скорости сходимости.

1. Можно случайным образом генерировать $n_k \in \mathbb{N}_+$ независимых реализаций стохастического градиента $\zeta_k(t)$, $t = 1, \ldots, n_k$ (5) на каждой итерации k и вычислять

$$\bar{\zeta}_k \triangleq \frac{1}{n_k}\sum_{t=1}^{n_k}\zeta_k(t) \tag{17}$$

с целью использовать арифметические средние $\bar{\zeta}_k$ как более точные оценки градиентов $\nabla Q(x_k)$. Это может стать источником более эффективных алгоритмов и основой распределенных версий метода.

2. Существуют также другие версии стохастических градиентов, кроме (5). Так, можно работать не с квадратичной функцией (2), а с функцией

$$Q_1(x) = \|Ax - x\|_2.$$

Действительно, ее субградиент

$$\partial Q_1(x) = \begin{cases} (Ax - x)/\|Ax - x\|_2, & \text{если } Ax \neq x,\\ 0 & \text{иначе,}\end{cases}$$

а ∞-норма

$$\|\partial Q_1(x)\|_\infty \leq 1, \quad x \in \mathbb{R}^N. \tag{18}$$

Следовательно, детерминированный алгоритм (11)–(15) с векторами

$$\zeta_k = \partial Q_1(x_k), \quad k \geqslant 0, \tag{19}$$

и с начальными условиями $\psi_0 = 0 \in \mathbb{R}^N$, $x_0 \in \Theta_N$, будет приводить к неравенству, аналогичному (16), точнее

$$Q_1(\widehat{x}_n) = \|A\widehat{x}_n - \widehat{x}_n\|_2 \leqslant 4\,(\ln N)^{1/2}\,\frac{\sqrt{n+1}}{n}. \tag{20}$$

Поскольку $Q(x) = Q_1^2(x)$, правую часть в (20) следует возвести в квадрат, чтобы непосредственно сравнивать результаты в (16) и (20): получаем $O\left(\sqrt{\frac{\ln N}{n}}\right)$ в (16) и $O\left(\frac{\ln N}{n}\right)$ – возведенную в квадрат верхнюю границу (20), существенно быстрее уменьшающуюся с ростом числа итераций n. Зависимость от размерности N не так существенна из-за логарифма.

Однако вычислительная сложность детерминированного алгоритма (11)–(15) с векторами (19) значительно выше, чем у рандомизированного алгоритма, описанного в теореме 1: в первом случае требуется $O(N^2)$ вычислительных операций на каждой итерации против $O(N)$ во втором (т.е. для алгоритма теоремы 1).

3. Выбор параметров (11) не единственно возможный, и более гибкие стратегии могут привести к более быстрой сходимости. В [6] представлена такая (адаптивная) модификация алгоритма (13)–(15), в которой параметр β_k рекуррентно вычисляется в зависимости от нормы текущего вектора ζ_k:

$$\beta_{k+1} = \left(\beta_k^2 + \frac{\|\zeta_k\|_\infty^2}{\ln N}\right)^{1/2}. \tag{21}$$

Это несколько понижает верхнюю границу типа (16).

4. Улучшение скорости сходимости также должно приводить к правильному выбору начальной точки x_0 при выборе параметров (21). Другая интересная проблема состоит в оценке скорости сходимости по расстоянию к собственному вектору x_*, даже при условии его единственности. Действительно, выше была получена оценка для $\mathbb{E}\,\|A\widehat{x}_n - \widehat{x}_n\|_2^2$. Но что можно сказать о величине $\|\widehat{x}_n - x_*\|_2^2$? Следующее предложение дает некоторую информацию об этом.

Предложение 1. Пусть стохастическая матрица $A \in \mathcal{A}_N$ соответствует неприводимой марковской цепи. Тогда для некоторой постоянной $c = c(A) > 0$ матрица имеет единственный собственный вектор $x_* \in \Theta_N$, и

$$\|Ax - x\|_2^2 \geqslant c\|x - x_*\|_2^2, \quad \forall\, x \in \Theta_N.$$

Однако постоянная c зависит от A (и, в частности, от второго собственного значения A, ближайшего к единице).

7. Приложение к задаче PageRank

Известная задача PageRank [1–3] может рассматриваться в рамках описанной выше постановки, хотя некоторые детали следует упомянуть особо. Матрица A исходных связей представляется графом с N узлами (страницами). Ее элементы таковы: $a_{ij} = 1/n_j$, если страница j имеет исходящую дугу к странице i (n_j – общее число исходящих из j дуг), и $a_{ij} = 0$ в противном случае. Желаемые ранги $x^{(j)}$ страниц удовлетворяют уравнению $Ax = x$. Матрица A может быть не стохастической благодаря существованию висящих узлов, т.е. страниц, не имеющих исходящих дуг. Чтобы избежать эту трудность, матрица переопределяется: $a_{ij} = 1/N$, $i = 1, \ldots, N$ для всех висящих узлов j. Теперь матрица A становится стохастической и собственный вектор $x_* \in \Theta_N$, т.е. $Ax_* = x_*$, всегда существует. Однако он может быть не единственным. Традиционно, чтобы преодолеть эту трудность, вводят

$$M = (1 - m)A + \frac{m}{N}\,S$$

с параметром $m \in (0, 1)$ и матрицей S, сплошь состоящей из единиц. Результирующая матрица M состоит из положительных элементов, вектор x_* единственный, а степенной метод можно успешно применить. Его скорость сходимости оценивается неравенством $\|x_n - x_*\|_2 \leqslant c(1 - m)^n$ [2]. Как было предложено в [1], обычно выбирают $m = 0{,}15$. Исследования показывают, что зависимость от параметра m может быть довольно сильной [2], и не очевидно, каков смысл решения x_*, соответствующего $m = 0,15$ (не малому числу). Преимущество метода данной статьи состоит в возможности работать с малым $m > 0$ или даже с $m = 0$, когда степенной метод сходится медленно или вовсе не сходится. Матрица A для задачи PageRank очень разрежена, более того, достаточно хранить только граф связей. Это позволяет эффективно осуществлять предложенный метод. Результаты численных вычислений пока предварительные. Метод тестировался для моделей PageRank-задачи с N порядка 1000–10000, когда вычисления могут быть осуществлены на стандартном персональном компьютере. Получить высокую точность решения было трудно; однако в действительности для PageRank представляют реальный интерес только страницы относительно высокого ранга, и это небольшое число рангов можно восстановить более точно.

8. Заключение

Для стохастических матриц предложен новый рандомизированный численный метод отыскания собственного вектора, отвечающего собственному значению 1. Полученная граница скорости сходимости верна для произвольного числа шагов алгоритма и имеет конкретный численный коэффициент. Более того, граница верна для всего класса стохастических матриц данной размерности, т.е. не зависит от свойств индивидуальной матрицы. Метод может быть применен для задач ранжирования, в частности для решения задачи PageRank с малым параметром m. Возможна последующая работа над ускорением метода.

В заключение авторы считают приятным долгом выразить благодарность Роберто Темпо, который привлек их внимание к PageRank-задаче, и Аркадию Немировскому за важные идеи по рандомизированным методам.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Введем ряд определений и напомним некоторые факты из выпуклого анализа [13].

П1. Сопряженные нормы и прокси-функции. Через $E = \ell_1^N$ будем обозначать пространство $\mathbb{R}^N$, оснащенное нормой

$$\|z\|_1 = \sum_{j=1}^{N} |z^{(j)}|,$$

где $z = (z^{(1)}, \ldots, z^{(N)})^T$, а через $E^* = \ell_\infty^N$ – двойственное пространство, представляющее собой $\mathbb{R}^N$, оснащенное супремум-нормой

$$\|z\|_\infty = \max_{\|\theta\|_1 = 1} z^T\theta = \max_{1 \leqslant j \leqslant N} |z^{(j)}|, \quad \forall\, z \in E^*.$$

Пусть Θ – выпуклое замкнутое подмножество E и пусть заданы параметр $\beta > 0$ и выпуклая функция $V : \Theta \to \mathbb{R}$.

О п р е д е л е н и е 1. *Назовем β-сопряженной функцией к V следующее преобразование Лежандра-Фенхеля W_β от произведения βV:*

$$W_\beta(z) = \sup_{\theta \in \Theta} \left\{ -z^T\theta - \beta V(\theta) \right\}, \quad \forall\, z \in E^*. \tag{П.1}$$

Введем теперь ключевое свойство (L) – условие Липшица в смешанных нормах $\|\cdot\|_1$ и $\|\cdot\|_\infty$, которое будет использовано при доказательстве теоремы 1.

О п р е д е л е н и е 2. *Будем говорить, что выпуклая функция $V : \Theta \to \mathbb{R}$ имеет свойство (L), если ее β-сопряженная W_β непрерывно дифференцируема на E^* с* *градиентом ∇W_β, удовлетворяющим неравенству*

$$\|\nabla W_\beta(z) - \nabla W_\beta(\,\tilde{z}\,)\|_1 \leqslant \frac{1}{\alpha\beta}\|z-\tilde{z}\|_\infty, \quad \forall\, z, \tilde{z} \in E^*,\ \beta > 0,$$

причем $\alpha > 0$ не зависит от β.

Как известно (см., например, [13, 14]), это свойство связано со следующим понятием сильной выпуклости функции V.

Определение 3. Пусть $\alpha > 0$. Выпуклая функция $V : \Theta \to \mathbb{R}$ называется α-сильно выпуклой относительно нормы $\|\cdot\|_1$, если

$$V(sx + (1-s)y) \leqslant sV(x) + (1-s)V(y) - \frac{\alpha}{2}s(1-s)\|x-y\|_1^2 \tag{П.2}$$

при любых $x, y \in \Theta$ и $s \in [0, 1]$.

В следующем предложении приводятся свойства β-сопряженных функций и, в частности, дается достаточное условие выполнения свойства (L).

Предложение 2. Пусть функция $V : \Theta \to \mathbb{R}$ выпукла, а параметр β положителен. Тогда β-сопряженная к V функция W_β обладает следующими свойствами.

1. Функция $W_\beta : E^* \to \mathbb{R}$ выпукла и имеет сопряженную βV, а именно:

$$\beta V(\theta) = \sup_{z \in E^*}\left\{-z^T\theta - W_\beta(z)\right\}, \quad \theta \in \Theta\,.$$

2. Если функция V является α-сильно выпуклой относительно нормы $\|\cdot\|_1$, то
   (i) выполнено свойство (L),
   (ii) $\arg\max_{\theta\in\Theta}\left\{-z^T\theta - \beta V(\theta)\right\} = -\nabla W_\beta(z) \in \Theta.$

Доказательство этого предложения дано в [13, 14].

Определение 4. Назовем функцию $V : \Theta \to \mathbb{R}_+$ прокси-функцией*, если она выпукла и*

(i) существует такая точка $\theta_* \in \Theta$, что $\min_{\theta\in\Theta} V(\theta) = V(\theta_*)$,

(ii) выполнено свойство (L).

П2. Энтропийная прокси-функция. Пусть $\Theta = \Theta_N$ – стандартный симплекс в $\mathbb{R}^N$. Рассмотрим прокси-функцию энтропийного типа

$$V(\theta) = \ln(N) + \sum_{j=1}^{N}\theta^{(j)}\ln\theta^{(j)}\,, \quad \theta \in \Theta_N, \tag{П.3}$$

(где $0\ln 0 \triangleq 0$), имеющую единственную точку минимума $\theta_* = (1/N, \ldots, 1/N)^T$, причем $V(\theta_*) = 0$. Нетрудно проверить неравенство (П.2), т.е. что функция (П.3) является α-сильно выпуклой относительно нормы $\|\cdot\|_1$ с параметром $\alpha = 1$. Важная особенность прокси-функции (П.3) состоит в том, что для нее задача оптимизации в (П.1) может быть решена явно. При этом $W_\beta(z)$ и $\nabla W_\beta(z)$ задаются формулами (7) и (8). Выполнение свойства (L) для функции (П.3) может быть проверено и прямыми вычислениями (см. приложение в [9]): по сути, здесь нет необходимости прибегать к предложению 1.

Известно следующее:

– прокси-функция (П.3) равна информационному расхождению Кульбака между равномерным распределением на множестве $\{1, \ldots, N\}$ и распределением на этом множестве, заданным вероятностями $\theta^{(j)}$, $j = 1, \ldots, N$;

– в силу (8) компоненты вектора $-\nabla W_\beta(z)$ задают на координатах вектора z распределение Гиббса, в котором β играет роль параметра температуры.

П3. К доказательству теоремы 1. Ниже даются краткие выкладки, приводящие к теореме 1 (подробнее см. [9]). Для удобства они проводятся для более общей постановки: рассматривается произвольная прокси-функция V с произвольным выпуклым компактом Θ в E, вплоть до формулы (П.8). Последовательности оценок (θ_i) и $(\widehat{\theta}_i)$ порождены алгоритмом (9)–(10).

Введем обозначения стохастических субградиентов $u_i(\theta)$ и их отклонений $\xi_i(\theta)$:

$$\nabla Q(\theta) = \mathbb{E}\{u_i(\theta) \,|\, \theta_{i-1}\},$$
$$\xi_i(\theta) = u_i(\theta) - \nabla Q(\theta), \quad \theta \in \Theta.$$

Предполагаем неравенство $\mathbb{E}\|u_i(\theta)\|_\infty^2 \leqslant L_Q^2$, $\forall\, \theta \in \Theta$.

П р е д л о ж е н и е 3. *Для любого $\theta \in \Theta$ и любого целого $t \geqslant 1$ справедливо*

$$\sum_{i=1}^{t} \gamma_i (\theta_{i-1} - \theta)^T \nabla Q(\theta_{i-1}) \le$$
$$\leqslant \beta_t V(\theta) - \beta_0 V(\theta_*) - \sum_{i=1}^{t} \gamma_i (\theta_{i-1} - \theta)^T \xi_i(\theta_{i-1}) + \sum_{i=1}^{t} \frac{\gamma_i^2}{2\alpha\beta_{i-1}} \|u_i(\theta_{i-1})\|_\infty^2.$$

Д о к а з а т е л ь с т в о п р е д л о ж е н и я 3. Положим $\zeta_i = u_i(\theta_{i-1})$. Тогда $\psi_i - \psi_{i-1} = \gamma_i \zeta_i$, и в силу свойства (L) и непрерывной дифференцируемости $W_{\beta_{i-1}}$ имеем

$$W_{\beta_{i-1}}(\psi_i) = W_{\beta_{i-1}}(\psi_{i-1}) + \gamma_i \zeta_i^T \nabla W_{\beta_{i-1}}(\psi_{i-1}) +$$
$$+ \gamma_i \int_0^1 \zeta_i^T \Big[\nabla W_{\beta_{i-1}}(\tau\psi_i + (1-\tau)\psi_{i-1}) - \nabla W_{\beta_{i-1}}(\psi_{i-1})\Big] d\tau \leqslant$$
$$\leqslant W_{\beta_{i-1}}(\psi_{i-1}) + \gamma_i \zeta_i^T \nabla W_{\beta_{i-1}}(\psi_{i-1}) + \frac{\gamma_i^2 \|\zeta_i\|_\infty^2}{2\alpha\beta_{i-1}}.$$

Используя монотонность последовательности $(\beta_i)_{i \geqslant 1}$ и факт, что для фиксированного z отображение $\beta \mapsto W_\beta(z)$ представляет собой невозрастающую функцию, получаем

$$W_{\beta_i}(\psi_i) \leqslant W_{\beta_{i-1}}(\psi_i) \leqslant W_{\beta_{i-1}}(\psi_{i-1}) - \gamma_i \theta_{i-1}^T \zeta_i + \frac{\gamma_i^2 \|\zeta_i\|_\infty^2}{2\alpha\beta_{i-1}}.$$

Теперь суммируем:

$$\sum_{i=1}^{t} \gamma_i \theta_{i-1}^T \zeta_i \leqslant W_{\beta_0}(\psi_0) - W_{\beta_t}(\psi_t) + \sum_{i=1}^{t} \frac{\gamma_i^2 \|\zeta_i\|_\infty^2}{2\alpha\beta_{i-1}}$$

и используем представление $\psi_t = \sum\limits_{i=1}^{t} \gamma_i \zeta_i$; получаем для всякого $\theta \in \Theta$

$$\sum_{i=1}^{t} \gamma_i (\theta_{i-1} - \theta)^T \zeta_i \leqslant W_{\beta_0}(\psi_0) - W_{\beta_t}(\psi_t) - \psi_t^T \theta + \sum_{i=1}^{t} \frac{\gamma_i^2 \|\zeta_i\|_\infty^2}{2\alpha\beta_{i-1}}.$$

Наконец, поскольку $\zeta_i = \nabla Q(\theta_{i-1}) + \xi_i(\theta_{i-1})$, находим

$$\sum_{i=1}^{t} \gamma_i (\theta_{i-1} - \theta)^T \nabla Q(\theta_{i-1}) \leqslant$$
$$\leqslant W_{\beta_0}(\psi_0) - W_{\beta_t}(\psi_t) - \psi_t^T \theta - \sum_{i=1}^{t} \gamma_i (\theta_{i-1} - \theta)^T \xi_i(\theta_{i-1}) + \sum_{i=1}^{t} \frac{\gamma_i^2 \|\zeta_i\|_\infty^2}{2\alpha\beta_{i-1}}\,.$$

Таким образом, требуемое неравенство вытекает из того, что

$$W_{\beta_0}(\psi_0) = W_{\beta_0}(0) = \beta_0 \sup_{\theta\in\Theta}\{-V(\theta)\} = -\beta_0 V(\theta_*)$$

и $\beta V(\theta) \geqslant -W_\beta(\psi) - \psi^T\theta$ для всех $\psi \in \mathbb{R}^N$. ▲

П р е д л о ж е н и е 4. Для любого целого $t \geqslant 1$ выполняется неравенство

$$\text{(П.4)}\qquad \mathbb{E}\, Q(\widehat{\theta}_t) \leqslant \inf_{\theta\in\Theta} \left(Q(\theta) + \frac{\beta_t V(\theta) - \beta_0 V(\theta_*)}{\sum_{i=1}^t \gamma_i} \right) + \frac{L_Q^2}{\sum_{i=1}^t \gamma_i} \sum_{i=1}^{t} \frac{\gamma_i^2}{2\alpha\beta_{i-1}}$$

и средняя точность оценки $\widehat{\theta}_t$ по Q-риску допускает следующую верхнюю границу:

$$\text{(П.5)}\qquad \mathbb{E}\, Q(\widehat{\theta}_t) - \min_{\theta\in\Theta} Q(\theta) \leqslant \frac{1}{\sum_{i=1}^t \gamma_i} \left(\beta_t V(\theta_Q^*) - \beta_0 V(\theta_*) + L_Q^2 \sum_{i=1}^{t} \frac{\gamma_i^2}{2\alpha\beta_{i-1}} \right),$$

где $\theta_Q^* \in \operatorname*{Arg\,min}_{\theta\in\Theta} Q(\theta)$.

Д о к а з а т е л ь с т в о п р е д л о ж е н и я 4. В силу выпуклости $Q(\cdot)$ получаем

$$\mathbb{E}\, Q(\widehat{\theta}_t) - Q(\theta) \leqslant \frac{\sum_{i=1}^t \gamma_i \left(\mathbb{E}\, Q(\theta_{i-1}) - Q(\theta)\right)}{\sum_{i=1}^t \gamma_i} \leqslant$$
$$\text{(П.6)}\qquad \leqslant \frac{\sum_{i=1}^t \gamma_i \mathbb{E}\left[(\theta_{i-1} - \theta)^T \nabla Q(\theta_{i-1})\right]}{\sum_{i=1}^t \gamma_i}, \quad \forall\, \theta \in \Theta.$$

Взяв условное математическое ожидание относительно θ_{i-1} и используя определение $\xi_i(\theta_{i-1})$, находим $\mathbb{E}\left\{\xi_i(\theta_{i-1}) \,|\, \theta_{i-1}\right\} = 0$. Теперь объединяем (П.6) и неравенство из предложения 3, где используем границу $\sup_{\theta\in\Theta} \mathbb{E}\|u_i(\theta)\|_\infty^2 \leqslant L_Q^2$. Это приводит к неравенству (П.4), которое очевидным образом влечет (П.5). ▲

Заметим, что одновременное (и одинаковое) изменение масштаба последовательностей (β_i) и (γ_i), т.е. умножение их на одну и ту же положительную постоянную, не изменяет полученных в предложениях 3 и 4 верхних оценок; более того, при этом и последовательности оценок (θ_i) и $(\widehat{\theta}_i)$ алгоритма (9)–(10) не изменяются (при $\psi_0 = 0$).

Д о к а з а т е л ь с т в о т е о р е м ы 1. Имеем $V(\theta_*) = 0$ и

$$V(\theta_Q^*) \leqslant \max_{\theta\in\Theta} V(\theta) \triangleq V^*.$$

Используя (П.5) при $\gamma_i \equiv 1$ и $\beta_i = \beta_0\sqrt{i+1}$ с некоторым $\beta_0 > 0$, получаем

$$\text{(П.7)}\qquad \mathbb{E}\, Q(\widehat{\theta}_t) - Q(\theta_Q^*) \leqslant \frac{\sqrt{t+1}}{t} \left(\beta_0 V^* + \frac{L_Q^2}{\alpha\beta_0} \right).$$

Минимум этой границы по β_0 достигается при $\beta_0 = L_Q/\sqrt{\alpha V^*}$, что дает оценку

$$\text{(П.8)} \qquad \mathbb{E}\, Q(\widehat{\theta}_t) - Q(\theta^*_Q) \leqslant \frac{2L_Q}{t}\sqrt{\frac{V^*}{\alpha}\,(t+1)}.$$

Пусть теперь $\Theta = \Theta_N$. Напомним, что параметр сильной выпуклости $\alpha = 1$ для прокси-функции V, определенной в (П.3). Кроме того, эта прокси-функция достигает своего максимума в каждой вершине симплекса Θ_N и такова, что $V^* = \max_{\theta\in\Theta_N} V(\theta) = \ln N$. Поэтому оптимальное значение β_0 равно $L_Q(\ln N)^{-1/2}$. Это дает границу точности, указанную в формулировке теоремы 1. ▲

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Brin S., Page L.* The anatomy of a large-scale hypertextual web search engine // Comput. Network ISDN Syst. 1998. V. 30(1–7). P. 107–117.
2. *Langville A.N., Meyer C.D.* Google's PageRank and Beyond: The Science of Search Engine Rankings. Princeton University Press: 2006.
3. *Ishii H., Tempo R.* A distributed randomized approach for the PageRank computation, Parts 1,2 // Proc. 47th IEEE Conf. Decision Control. Cancun, Mexico, 2008. P. 3523–3528; 3529–3534.
4. *Tempo R., Calafiore G., Dabbene F.* Randomized Algorithms for Analysis and Control of Uncertain Systems: An overview // Lecture Notes in Control and Information Sciences. Springer Berlin / Heidelberg. V. 268/2001. 2005. P. 344.
5. *Назин А.В., Поляк Б.Т.* Рандомизированный алгоритм нахождения собственного вектора стохастической матрицы с приложением к PageRank // Докл. АН. 2009. Т. 426. № 6. С. 734–737.
6. *Nazin A.V., Polyak B.T.* Adaptive Randomized Algorithm for Finding Eigenvector of Stochastic Matrix with Application to PageRank // 48th IEEE Conf. Decision Control. Shanghai, P.R. China, December 16–18, 2009.
7. *Немировский А.С., Юдин Д.Б.* Сложность задач и эффективность методов оптимизации. М.: Наука, 1979. С. 384 .
8. *Nesterov Yu.* Primal-dual subgradient methods for convex problems // Math. Programm. 2005. V. 103(1). P. 127–152.
9. *Юдицкий А.Б., Назин А.В., Цыбаков А.Б., Ваятис Н.* Рекуррентное агрегирование оценок методом зеркального спуска с усреднением // Проблемы передачи информации. 2005. Т. 41. № 4. С. 78–96.
10. *Juditsky A., Lan G., Nemirovski A., Shapiro A.* Stochastic Approximation Approach to Stochastic Programming // SIAM J. Optim. 2007. http://www.optimization-online.org/DB–HTML/2007/09/1787.html
11. *Juditsky A., Nemirovski A., Tauvel C.* Solving variational inequalities with Stochastic Mirror-Prox algorithm // SIAM J. Optim. 2008. http://arxiv.org/abs/0809.0815v1
12. *Nazin A.V.* Solution to a Particular Deterministic Problem in Finite High Dimension by the Recursive Randomized Mirror Descent Algorithm // 8th Meeting Math. Statist. CIRM, Luminy, France, 15–19 Dec. 2008. http://www.cirm.univ-mrs.fr
13. *Rockafellar R.T., Wets R.J.B.* Variational Analysis. New York: Springer, 1998. 756 p.
14. *Ben-Tal A., Nemirovski A.* Lectures on modern convex optimization: analysis, algorithms, and engineering applications. Philadelphia, PA, USA, SIAM: 2001. P. 488.

Статья представлена к публикации членом редколлегии А.И. Кибзуном.

Поступила в редакцию 15.06.2010