

# Стохастический градиентный спуск. Адаптивные методы. Оптимизация нейронных сетей

## Семинар

Оптимизация для всех! ЦУ



## Задача конечной суммы

Рассмотрим классическую задачу минимизации среднего на конечной выборке:

$$\min_{x \in \mathbb{R}^p} f(x) = \min_{x \in \mathbb{R}^p} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f_i(x)$$

Градиентный спуск действует следующим образом:

$$x_{k+1} = x_k - \frac{\alpha_k}{n} \sum_{i=1}^n \nabla f_i(x) \quad (\text{GD})$$

## Задача конечной суммы

Рассмотрим классическую задачу минимизации среднего на конечной выборке:

$$\min_{x \in \mathbb{R}^p} f(x) = \min_{x \in \mathbb{R}^p} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f_i(x)$$

Градиентный спуск действует следующим образом:

$$x_{k+1} = x_k - \frac{\alpha_k}{n} \sum_{i=1}^n \nabla f_i(x) \quad (\text{GD})$$

- Сходимость с постоянным  $\alpha$  или линейным поиском.

## Задача конечной суммы

Рассмотрим классическую задачу минимизации среднего на конечной выборке:

$$\min_{x \in \mathbb{R}^p} f(x) = \min_{x \in \mathbb{R}^p} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f_i(x)$$

Градиентный спуск действует следующим образом:

$$x_{k+1} = x_k - \frac{\alpha_k}{n} \sum_{i=1}^n \nabla f_i(x) \quad (\text{GD})$$

- Сходимость с постоянным  $\alpha$  или линейным поиском.
- Стоимость итерации линейна по  $n$ . Для ImageNet  $n \approx 1.4 \cdot 10^7$ , для WikiText  $n \approx 10^8$ .

## Задача конечной суммы

Рассмотрим классическую задачу минимизации среднего на конечной выборке:

$$\min_{x \in \mathbb{R}^p} f(x) = \min_{x \in \mathbb{R}^p} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f_i(x)$$

Градиентный спуск действует следующим образом:

$$x_{k+1} = x_k - \frac{\alpha_k}{n} \sum_{i=1}^n \nabla f_i(x) \quad (\text{GD})$$

- Сходимость с постоянным  $\alpha$  или линейным поиском.
- Стоимость итерации линейна по  $n$ . Для ImageNet  $n \approx 1.4 \cdot 10^7$ , для WikiText  $n \approx 10^8$ .

## Задача конечной суммы

Рассмотрим классическую задачу минимизации среднего на конечной выборке:

$$\min_{x \in \mathbb{R}^p} f(x) = \min_{x \in \mathbb{R}^p} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f_i(x)$$

Градиентный спуск действует следующим образом:

$$x_{k+1} = x_k - \frac{\alpha_k}{n} \sum_{i=1}^n \nabla f_i(x) \quad (\text{GD})$$

- Сходимость с постоянным  $\alpha$  или линейным поиском.
- Стоимость итерации линейна по  $n$ . Для ImageNet  $n \approx 1.4 \cdot 10^7$ , для WikiText  $n \approx 10^8$ .

Перейдем от вычисления полного градиента к его несмещенной оценке, когда мы случайно выбираем индекс  $i_k$  точки на каждой итерации равномерно:

$$x_{k+1} = x_k - \alpha_k \nabla f_{i_k}(x_k) \quad (\text{SGD})$$

При  $p(i_k = i) = \frac{1}{n}$  стохастический градиент является несмещенной оценкой градиента, определяемой как:

$$\mathbb{E}[\nabla f_{i_k}(x)] = \sum_{i=1}^n p(i_k = i) \nabla f_i(x) = \sum_{i=1}^n \frac{1}{n} \nabla f_i(x) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \nabla f_i(x) = \nabla f(x)$$

Это указывает на то, что математическое ожидание стохастического градиента равно фактическому градиенту

## Результаты для градиентного спуска

Стохастические итерации в  $n$  раз быстрее, но сколько итераций требуется?

## Результаты для градиентного спуска

Стохастические итерации в  $n$  раз быстрее, но сколько итераций требуется?

Если  $\nabla f$  является Липшицевым, то мы имеем:

Предположение	Детерминированный градиентный спуск	Стохастический градиентный спуск
PL	$O(\log(1/\varepsilon))$	$O(1/\varepsilon)$
Выпуклая	$O(1/\varepsilon)$	$O(1/\varepsilon^2)$
Невыпуклая	$O(1/\varepsilon)$	$O(1/\varepsilon^2)$

## Результаты для градиентного спуска

Стохастические итерации в  $n$  раз быстрее, но сколько итераций требуется?

Если  $\nabla f$  является Липшицевым, то мы имеем:

Предположение	Детерминированный градиентный спуск	Стохастический градиентный спуск
PL	$O(\log(1/\varepsilon))$	$O(1/\varepsilon)$
Выпуклая	$O(1/\varepsilon)$	$O(1/\varepsilon^2)$
Невыпуклая	$O(1/\varepsilon)$	$O(1/\varepsilon^2)$

- Стохастический метод имеет низкую стоимость итерации, но медленную скорость сходимости.

## Результаты для градиентного спуска

Стохастические итерации в  $n$  раз быстрее, но сколько итераций требуется?

Если  $\nabla f$  является Липшицевым, то мы имеем:

Предположение	Детерминированный градиентный спуск	Стохастический градиентный спуск
PL	$O(\log(1/\varepsilon))$	$O(1/\varepsilon)$
Выпуклая	$O(1/\varepsilon)$	$O(1/\varepsilon^2)$
Невыпуклая	$O(1/\varepsilon)$	$O(1/\varepsilon^2)$

- Стохастический метод имеет низкую стоимость итерации, но медленную скорость сходимости.
  - Сублинейная скорость даже в сильно выпуклом случае.

## Результаты для градиентного спуска

Стохастические итерации в  $n$  раз быстрее, но сколько итераций требуется?

Если  $\nabla f$  является Липшицевым, то мы имеем:

Предположение	Детерминированный градиентный спуск	Стохастический градиентный спуск
PL	$O(\log(1/\varepsilon))$	$O(1/\varepsilon)$
Выпуклая	$O(1/\varepsilon)$	$O(1/\varepsilon^2)$
Невыпуклая	$O(1/\varepsilon)$	$O(1/\varepsilon^2)$

- Стохастический метод имеет низкую стоимость итерации, но медленную скорость сходимости.
  - Сублинейная скорость даже в сильно выпуклом случае.
  - Оценки неулучшаемы при стандартных предположениях.

## Результаты для градиентного спуска

Стохастические итерации в  $n$  раз быстрее, но сколько итераций требуется?

Если  $\nabla f$  является Липшицевым, то мы имеем:

Предположение	Детерминированный градиентный спуск	Стохастический градиентный спуск
PL	$O(\log(1/\varepsilon))$	$O(1/\varepsilon)$
Выпуклая	$O(1/\varepsilon)$	$O(1/\varepsilon^2)$
Невыпуклая	$O(1/\varepsilon)$	$O(1/\varepsilon^2)$

- Стохастический метод имеет низкую стоимость итерации, но медленную скорость сходимости.
  - Сублинейная скорость даже в сильно выпуклом случае.
  - Оценки неулучшаемы при стандартных предположениях.
  - Оракул возвращает несмешенную аппроксимацию градиента с ограниченной дисперсией.

## Результаты для градиентного спуска

Стохастические итерации в  $n$  раз быстрее, но сколько итераций требуется?

Если  $\nabla f$  является Липшицевым, то мы имеем:

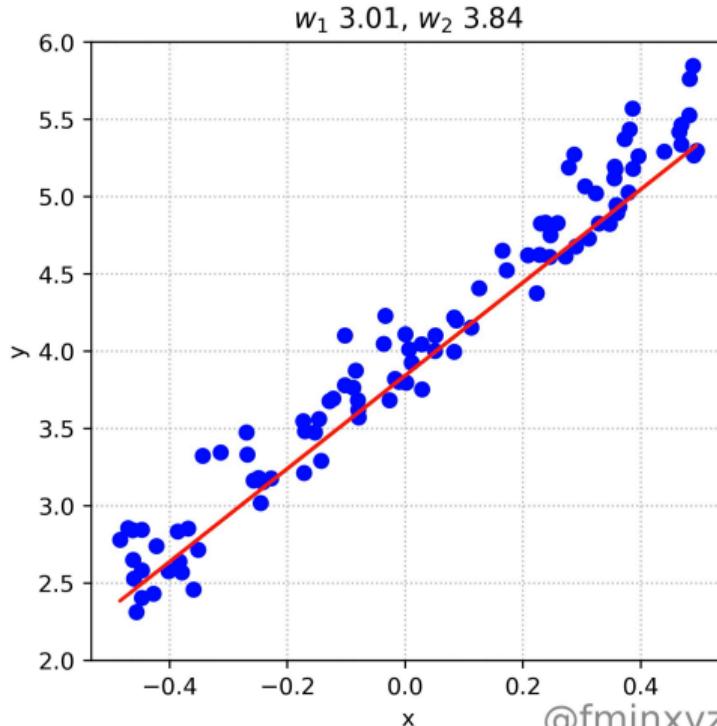
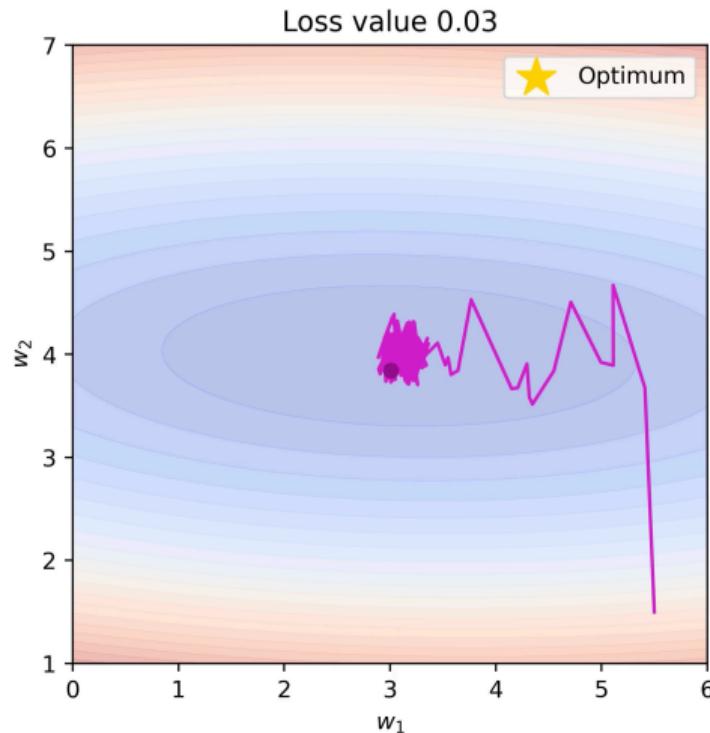
Предположение	Детерминированный градиентный спуск	Стохастический градиентный спуск
PL	$O(\log(1/\varepsilon))$	$O(1/\varepsilon)$
Выпуклая	$O(1/\varepsilon)$	$O(1/\varepsilon^2)$
Невыпуклая	$O(1/\varepsilon)$	$O(1/\varepsilon^2)$

- Стохастический метод имеет низкую стоимость итерации, но медленную скорость сходимости.
  - Сублинейная скорость даже в сильно выпуклом случае.
  - Оценки неулучшаемы при стандартных предположениях.
  - Оракул возвращает несмешенную аппроксимацию градиента с ограниченной дисперсией.
- Momentum и квазиньютоновские методы не улучшают скорость сходимости в стохастическом случае. Могут улучшить только константы (узким местом является дисперсия, а не число обусловленности).



## Типичное поведение

Stochastic Gradient Descent. Batch = 2



@fminxyz

## Вычислительные эксперименты

# Вычислительные эксперименты

Визуализация SGD.

Посмотрим на вычислительные эксперименты для SGD .

## Адаптивность или масштабирование

## Adagrad (Duchi, Hazan, and Singer 2010/Streeter and MacMahan 2010)

Очень популярный адаптивный метод. Пусть  $g^{(k)} = \nabla f_{i_k}(x^{(k-1)})$ , и обновление для  $j = 1, \dots, p$ :

$$v_j^{(k)} = v_j^{k-1} + (g_j^{(k)})^2$$
$$x_j^{(k)} = x_j^{(k-1)} - \alpha \frac{g_j^{(k)}}{\sqrt{v_j^{(k)} + \epsilon}}$$

## Adagrad (Duchi, Hazan, and Singer 2010/Streeter and MacMahan 2010)

Очень популярный адаптивный метод. Пусть  $g^{(k)} = \nabla f_{i_k}(x^{(k-1)})$ , и обновление для  $j = 1, \dots, p$ :

$$v_j^{(k)} = v_j^{k-1} + (g_j^{(k)})^2$$
$$x_j^{(k)} = x_j^{(k-1)} - \alpha \frac{g_j^{(k)}}{\sqrt{v_j^{(k)} + \epsilon}}$$

**Заметки:**

- AdaGrad не требует настройки скорости обучения:  $\alpha > 0$  — фиксированная константа, и скорость обучения естественным образом уменьшается с итерациями.

## Adagrad (Duchi, Hazan, and Singer 2010/Streeter and MacMahan 2010)

Очень популярный адаптивный метод. Пусть  $g^{(k)} = \nabla f_{i_k}(x^{(k-1)})$ , и обновление для  $j = 1, \dots, p$ :

$$v_j^{(k)} = v_j^{k-1} + (g_j^{(k)})^2$$
$$x_j^{(k)} = x_j^{(k-1)} - \alpha \frac{g_j^{(k)}}{\sqrt{v_j^{(k)} + \epsilon}}$$

**Заметки:**

- AdaGrad не требует настройки скорости обучения:  $\alpha > 0$  — фиксированная константа, и скорость обучения естественным образом уменьшается с итерациями.
- Скорость обучения редких информативных признаков уменьшается медленно.

## Adagrad (Duchi, Hazan, and Singer 2010/Streeter and MacMahan 2010)

Очень популярный адаптивный метод. Пусть  $g^{(k)} = \nabla f_{i_k}(x^{(k-1)})$ , и обновление для  $j = 1, \dots, p$ :

$$v_j^{(k)} = v_j^{k-1} + (g_j^{(k)})^2$$
$$x_j^{(k)} = x_j^{(k-1)} - \alpha \frac{g_j^{(k)}}{\sqrt{v_j^{(k)} + \epsilon}}$$

**Заметки:**

- AdaGrad не требует настройки скорости обучения:  $\alpha > 0$  — фиксированная константа, и скорость обучения естественным образом уменьшается с итерациями.
- Скорость обучения редких информативных признаков уменьшается медленно.
- Может значительно превосходить SGD в разреженных задачах.

## Adagrad (Duchi, Hazan, and Singer 2010/Streeter and MacMahan 2010)

Очень популярный адаптивный метод. Пусть  $g^{(k)} = \nabla f_{i_k}(x^{(k-1)})$ , и обновление для  $j = 1, \dots, p$ :

$$v_j^{(k)} = v_j^{k-1} + (g_j^{(k)})^2$$
$$x_j^{(k)} = x_j^{(k-1)} - \alpha \frac{g_j^{(k)}}{\sqrt{v_j^{(k)} + \epsilon}}$$

**Заметки:**

- AdaGrad не требует настройки скорости обучения:  $\alpha > 0$  — фиксированная константа, и скорость обучения естественным образом уменьшается с итерациями.
- Скорость обучения редких информативных признаков уменьшается медленно.
- Может значительно превосходить SGD в разреженных задачах.
- Основным недостатком является монотонное накопление градиентов в знаменателе. AdaDelta, Adam, AMSGrad и др. улучшают это, популярны при обучении глубоких нейронных сетей.

## Adagrad (Duchi, Hazan, and Singer 2010/Streeter and MacMahan 2010)

Очень популярный адаптивный метод. Пусть  $g^{(k)} = \nabla f_{i_k}(x^{(k-1)})$ , и обновление для  $j = 1, \dots, p$ :

$$v_j^{(k)} = v_j^{k-1} + (g_j^{(k)})^2$$
$$x_j^{(k)} = x_j^{(k-1)} - \alpha \frac{g_j^{(k)}}{\sqrt{v_j^{(k)} + \epsilon}}$$

**Заметки:**

- AdaGrad не требует настройки скорости обучения:  $\alpha > 0$  — фиксированная константа, и скорость обучения естественным образом уменьшается с итерациями.
- Скорость обучения редких информативных признаков уменьшается медленно.
- Может значительно превосходить SGD в разреженных задачах.
- Основным недостатком является монотонное накопление градиентов в знаменателе. AdaDelta, Adam, AMSGrad и др. улучшают это, популярны при обучении глубоких нейронных сетей.
- Константа  $\epsilon$  обычно устанавливается равной  $10^{-6}$ , чтобы избежать деления на ноль или слишком больших шагов.

## RMSProp (Tieleman and Hinton, 2012)

Улучшение AdaGrad, решающее проблему агрессивного, монотонно убывающего темпа обучения. Использует скользящее среднее квадратов градиентов для настройки скорости обучения для каждого веса. Пусть  $g^{(k)} = \nabla f_{i_k}(x^{(k-1)})$  и правило обновления для  $j = 1, \dots, p$ :

$$v_j^{(k)} = \gamma v_j^{(k-1)} + (1 - \gamma)(g_j^{(k)})^2$$

$$x_j^{(k)} = x_j^{(k-1)} - \alpha \frac{g_j^{(k)}}{\sqrt{v_j^{(k)} + \epsilon}}$$

## RMSProp (Tieleman and Hinton, 2012)

Улучшение AdaGrad, решающее проблему агрессивного, монотонно убывающего темпа обучения. Использует скользящее среднее квадратов градиентов для настройки скорости обучения для каждого веса. Пусть  $g^{(k)} = \nabla f_{i_k}(x^{(k-1)})$  и правило обновления для  $j = 1, \dots, p$ :

$$v_j^{(k)} = \gamma v_j^{(k-1)} + (1 - \gamma)(g_j^{(k)})^2$$

$$x_j^{(k)} = x_j^{(k-1)} - \alpha \frac{g_j^{(k)}}{\sqrt{v_j^{(k)} + \epsilon}}$$

**Заметки:**

- RMSProp делит скорость обучения для веса на скользящее среднее величин последних градиентов для этого веса.

## RMSProp (Tieleman and Hinton, 2012)

Улучшение AdaGrad, решающее проблему агрессивного, монотонно убывающего темпа обучения. Использует скользящее среднее квадратов градиентов для настройки скорости обучения для каждого веса. Пусть  $g^{(k)} = \nabla f_{i_k}(x^{(k-1)})$  и правило обновления для  $j = 1, \dots, p$ :

$$v_j^{(k)} = \gamma v_j^{(k-1)} + (1 - \gamma)(g_j^{(k)})^2$$

$$x_j^{(k)} = x_j^{(k-1)} - \alpha \frac{g_j^{(k)}}{\sqrt{v_j^{(k)} + \epsilon}}$$

### Заметки:

- RMSProp делит скорость обучения для веса на скользящее среднее величин последних градиентов для этого веса.
- Позволяет более тонко настраивать скорость обучения, чем AdaGrad, что делает его подходящим для неизотропных задач.

## RMSProp (Tieleman and Hinton, 2012)

Улучшение AdaGrad, решающее проблему агрессивного, монотонно убывающего темпа обучения. Использует скользящее среднее квадратов градиентов для настройки скорости обучения для каждого веса. Пусть  $g^{(k)} = \nabla f_{i_k}(x^{(k-1)})$  и правило обновления для  $j = 1, \dots, p$ :

$$v_j^{(k)} = \gamma v_j^{(k-1)} + (1 - \gamma)(g_j^{(k)})^2$$

$$x_j^{(k)} = x_j^{(k-1)} - \alpha \frac{g_j^{(k)}}{\sqrt{v_j^{(k)} + \epsilon}}$$

### Заметки:

- RMSProp делит скорость обучения для веса на скользящее среднее величин последних градиентов для этого веса.
- Позволяет более тонко настраивать скорость обучения, чем AdaGrad, что делает его подходящим для неизотропных задач.
- Часто используется при обучении нейронных сетей, особенно рекуррентных.

## Adam (Kingma and Ba, 2014) <sup>1</sup> <sup>2</sup>

Сочетает в себе элементы как AdaGrad, так и RMSProp. Рассматривает экспоненциально затухающее среднее прошлых градиентов и квадратов градиентов.

EMA:

$$m_j^{(k)} = \beta_1 m_j^{(k-1)} + (1 - \beta_1) g_j^{(k)}$$

$$v_j^{(k)} = \beta_2 v_j^{(k-1)} + (1 - \beta_2) (g_j^{(k)})^2$$

Исправление смещения:

$$\hat{m}_j = \frac{m_j^{(k)}}{1 - \beta_1^k}$$

$$\hat{v}_j = \frac{v_j^{(k)}}{1 - \beta_2^k}$$

Обновление:

$$x_j^{(k)} = x_j^{(k-1)} - \alpha \frac{\hat{m}_j}{\sqrt{\hat{v}_j} + \epsilon}$$

## Adam (Kingma and Ba, 2014) <sup>1</sup> <sup>2</sup>

Сочетает в себе элементы как AdaGrad, так и RMSProp. Рассматривает экспоненциально затухающее среднее прошлых градиентов и квадратов градиентов.

EMA:

$$m_j^{(k)} = \beta_1 m_j^{(k-1)} + (1 - \beta_1) g_j^{(k)}$$

$$v_j^{(k)} = \beta_2 v_j^{(k-1)} + (1 - \beta_2) (g_j^{(k)})^2$$

Исправление смещения:

$$\hat{m}_j = \frac{m_j^{(k)}}{1 - \beta_1^k}$$

$$\hat{v}_j = \frac{v_j^{(k)}}{1 - \beta_2^k}$$

Обновление:

$$x_j^{(k)} = x_j^{(k-1)} - \alpha \frac{\hat{m}_j}{\sqrt{\hat{v}_j} + \epsilon}$$

Заметки:

- Он исправляет смещение к нулю в начальные моменты, наблюдаемое в других методах, таких как RMSProp, делая оценки более точными.

## Adam (Kingma and Ba, 2014) <sup>1</sup> <sup>2</sup>

Сочетает в себе элементы как AdaGrad, так и RMSProp. Рассматривает экспоненциально затухающее среднее прошлых градиентов и квадратов градиентов.

EMA:

$$m_j^{(k)} = \beta_1 m_j^{(k-1)} + (1 - \beta_1) g_j^{(k)}$$

$$v_j^{(k)} = \beta_2 v_j^{(k-1)} + (1 - \beta_2) (g_j^{(k)})^2$$

Исправление смещения:

$$\hat{m}_j = \frac{m_j^{(k)}}{1 - \beta_1^k}$$

$$\hat{v}_j = \frac{v_j^{(k)}}{1 - \beta_2^k}$$

Обновление:

$$x_j^{(k)} = x_j^{(k-1)} - \alpha \frac{\hat{m}_j}{\sqrt{\hat{v}_j} + \epsilon}$$

Заметки:

- Он исправляет смещение к нулю в начальные моменты, наблюдаемое в других методах, таких как RMSProp, делая оценки более точными.
- Одна из самых цитируемых научных статей в мире

## Adam (Kingma and Ba, 2014) <sup>1</sup> <sup>2</sup>

Сочетает в себе элементы как AdaGrad, так и RMSProp. Рассматривает экспоненциально затухающее среднее прошлых градиентов и квадратов градиентов.

EMA:

$$m_j^{(k)} = \beta_1 m_j^{(k-1)} + (1 - \beta_1) g_j^{(k)}$$

$$v_j^{(k)} = \beta_2 v_j^{(k-1)} + (1 - \beta_2) (g_j^{(k)})^2$$

Исправление смещения:

$$\hat{m}_j = \frac{m_j^{(k)}}{1 - \beta_1^k}$$

$$\hat{v}_j = \frac{v_j^{(k)}}{1 - \beta_2^k}$$

Обновление:

$$x_j^{(k)} = x_j^{(k-1)} - \alpha \frac{\hat{m}_j}{\sqrt{\hat{v}_j} + \epsilon}$$

Заметки:

- Он исправляет смещение к нулю в начальные моменты, наблюдаемое в других методах, таких как RMSProp, делая оценки более точными.
- Одна из самых цитируемых научных статей в мире
- В 2018-2019 годах были опубликованы статьи, указывающие на ошибки в оригинальной статье

## Adam (Kingma and Ba, 2014) <sup>1</sup> <sup>2</sup>

Сочетает в себе элементы как AdaGrad, так и RMSProp. Рассматривает экспоненциально затухающее среднее прошлых градиентов и квадратов градиентов.

EMA:

$$m_j^{(k)} = \beta_1 m_j^{(k-1)} + (1 - \beta_1) g_j^{(k)}$$

$$v_j^{(k)} = \beta_2 v_j^{(k-1)} + (1 - \beta_2) (g_j^{(k)})^2$$

Исправление смещения:

$$\hat{m}_j = \frac{m_j^{(k)}}{1 - \beta_1^k}$$

$$\hat{v}_j = \frac{v_j^{(k)}}{1 - \beta_2^k}$$

Обновление:

$$x_j^{(k)} = x_j^{(k-1)} - \alpha \frac{\hat{m}_j}{\sqrt{\hat{v}_j} + \epsilon}$$

Заметки:

- Он исправляет смещение к нулю в начальные моменты, наблюдаемое в других методах, таких как RMSProp, делая оценки более точными.
- Одна из самых цитируемых научных статей в мире
- В 2018-2019 годах были опубликованы статьи, указывающие на ошибки в оригинальной статье
- Не сходится на некоторых простых задачах (даже выпуклых)

## Adam (Kingma and Ba, 2014) <sup>1</sup> <sup>2</sup>

Сочетает в себе элементы как AdaGrad, так и RMSProp. Рассматривает экспоненциально затухающее среднее прошлых градиентов и квадратов градиентов.

EMA:

$$m_j^{(k)} = \beta_1 m_j^{(k-1)} + (1 - \beta_1) g_j^{(k)}$$

$$v_j^{(k)} = \beta_2 v_j^{(k-1)} + (1 - \beta_2) (g_j^{(k)})^2$$

Исправление смещения:

$$\hat{m}_j = \frac{m_j^{(k)}}{1 - \beta_1^k}$$

$$\hat{v}_j = \frac{v_j^{(k)}}{1 - \beta_2^k}$$

Обновление:

$$x_j^{(k)} = x_j^{(k-1)} - \alpha \frac{\hat{m}_j}{\sqrt{\hat{v}_j} + \epsilon}$$

Заметки:

- Он исправляет смещение к нулю в начальные моменты, наблюдаемое в других методах, таких как RMSProp, делая оценки более точными.
- Одна из самых цитируемых научных статей в мире
- В 2018-2019 годах были опубликованы статьи, указывающие на ошибки в оригинальной статье
- Не сходится на некоторых простых задачах (даже выпуклых)
- Каким-то образом работает исключительно хорошо для некоторых сложных задач

## Adam (Kingma and Ba, 2014)<sup>1</sup> <sup>2</sup>

Сочетает в себе элементы как AdaGrad, так и RMSProp. Рассматривает экспоненциально затухающее среднее прошлых градиентов и квадратов градиентов.

EMA:

$$m_j^{(k)} = \beta_1 m_j^{(k-1)} + (1 - \beta_1) g_j^{(k)}$$

$$v_j^{(k)} = \beta_2 v_j^{(k-1)} + (1 - \beta_2) (g_j^{(k)})^2$$

Исправление смещения:

$$\hat{m}_j = \frac{m_j^{(k)}}{1 - \beta_1^k}$$

$$\hat{v}_j = \frac{v_j^{(k)}}{1 - \beta_2^k}$$

Обновление:

$$x_j^{(k)} = x_j^{(k-1)} - \alpha \frac{\hat{m}_j}{\sqrt{\hat{v}_j} + \epsilon}$$

Заметки:

- Он исправляет смещение к нулю в начальные моменты, наблюдаемое в других методах, таких как RMSProp, делая оценки более точными.
- Одна из самых цитируемых научных статей в мире
- В 2018-2019 годах были опубликованы статьи, указывающие на ошибки в оригинальной статье
- Не сходится на некоторых простых задачах (даже выпуклых)
- Каким-то образом работает исключительно хорошо для некоторых сложных задач
- Работает намного лучше для языковых моделей, чем для задач компьютерного зрения — почему?

<sup>1</sup>Adam: A Method for Stochastic Optimization

<sup>2</sup>On the Convergence of Adam and Beyond

## AdamW (Loshchilov & Hutter, 2017)

Решает распространенную проблему с  $\ell_2$  регуляризацией в адаптивных оптимизаторах, таких как Adam. Стандартная  $\ell_2$  регуляризация добавляет  $\lambda \|x\|^2$  к функции потерь, что приводит к слагаемому градиента  $\lambda x$ . В Adam это слагаемое масштабируется адаптивной скоростью обучения  $(\sqrt{\hat{v}_j} + \epsilon)$ , связывая затухание весов с величинами градиента.

AdamW отделяет затухание весов от шага адаптации градиента.

Правило обновления:

$$\begin{aligned} m_j^{(k)} &= \beta_1 m_j^{(k-1)} + (1 - \beta_1) g_j^{(k)} \\ v_j^{(k)} &= \beta_2 v_j^{(k-1)} + (1 - \beta_2) (g_j^{(k)})^2 \\ \hat{m}_j &= \frac{m_j^{(k)}}{1 - \beta_1^k}, \quad \hat{v}_j = \frac{v_j^{(k)}}{1 - \beta_2^k} \\ x_j^{(k)} &= x_j^{(k-1)} - \alpha \left( \frac{\hat{m}_j}{\sqrt{\hat{v}_j} + \epsilon} + \lambda x_j^{(k-1)} \right) \end{aligned}$$

## AdamW (Loshchilov & Hutter, 2017)

Решает распространенную проблему с  $\ell_2$  регуляризацией в адаптивных оптимизаторах, таких как Adam. Стандартная  $\ell_2$  регуляризация добавляет  $\lambda \|x\|^2$  к функции потерь, что приводит к слагаемому градиента  $\lambda x$ . В Adam это слагаемое масштабируется адаптивной скоростью обучения  $(\sqrt{\hat{v}_j} + \epsilon)$ , связывая затухание весов с величинами градиента.

AdamW отделяет затухание весов от шага адаптации градиента.

Правило обновления:

$$\begin{aligned} m_j^{(k)} &= \beta_1 m_j^{(k-1)} + (1 - \beta_1) g_j^{(k)} \\ v_j^{(k)} &= \beta_2 v_j^{(k-1)} + (1 - \beta_2) (g_j^{(k)})^2 \\ \hat{m}_j &= \frac{m_j^{(k)}}{1 - \beta_1^k}, \quad \hat{v}_j = \frac{v_j^{(k)}}{1 - \beta_2^k} \\ x_j^{(k)} &= x_j^{(k-1)} - \alpha \left( \frac{\hat{m}_j}{\sqrt{\hat{v}_j} + \epsilon} + \lambda x_j^{(k-1)} \right) \end{aligned}$$

Заметки:

- Слагаемое затухания весов  $\lambda x_j^{(k-1)}$  добавляется после шага адаптивного градиента.

## AdamW (Loshchilov & Hutter, 2017)

Решает распространенную проблему с  $\ell_2$  регуляризацией в адаптивных оптимизаторах, таких как Adam. Стандартная  $\ell_2$  регуляризация добавляет  $\lambda \|x\|^2$  к функции потерь, что приводит к слагаемому градиента  $\lambda x$ . В Adam это слагаемое масштабируется адаптивной скоростью обучения  $(\sqrt{\hat{v}_j} + \epsilon)$ , связывая затухание весов с величинами градиента.

AdamW отделяет затухание весов от шага адаптации градиента.

Правило обновления:

$$\begin{aligned} m_j^{(k)} &= \beta_1 m_j^{(k-1)} + (1 - \beta_1) g_j^{(k)} \\ v_j^{(k)} &= \beta_2 v_j^{(k-1)} + (1 - \beta_2) (g_j^{(k)})^2 \\ \hat{m}_j &= \frac{m_j^{(k)}}{1 - \beta_1^k}, \quad \hat{v}_j = \frac{v_j^{(k)}}{1 - \beta_2^k} \\ x_j^{(k)} &= x_j^{(k-1)} - \alpha \left( \frac{\hat{m}_j}{\sqrt{\hat{v}_j} + \epsilon} + \lambda x_j^{(k-1)} \right) \end{aligned}$$

Заметки:

- Слагаемое затухания весов  $\lambda x_j^{(k-1)}$  добавляется после шага адаптивного градиента.
- Широко применяется при обучении трансформеров и других больших моделей. Выбор по умолчанию для `huggingface trainer`.

## Shampoo<sup>3</sup>

Расшифровывается как **Stochastic Hessian-Approximation Matrix Preconditioning for Optimization Of deep networks**. Это метод, вдохновленный оптимизацией второго порядка, разработанный для глубокого обучения больших моделей.

**Основная идея:** Апроксимирует полноматричный предобуславливатель AdaGrad, используя эффективные матричные структуры, в частности произведения Кронекера.

Для матрицы весов  $W \in \mathbb{R}^{m \times n}$  обновление включает предобуславливание с использованием аппроксимаций матриц статистики  $L \approx \sum_k G_k G_k^T$  и  $R \approx \sum_k G_k^T G_k$ , где  $G_k$  — градиенты.

Упрощенная концепция:

1. Вычислить градиент  $G_k$ .

## Shampoo<sup>3</sup>

Расшифровывается как **Stochastic Hessian-Approximation Matrix Preconditioning for Optimization Of deep networks**. Это метод, вдохновленный оптимизацией второго порядка, разработанный для глубокого обучения больших моделей.

**Основная идея:** Апроксимирует полноматричный предобуславливатель AdaGrad, используя эффективные матричные структуры, в частности произведения Кронекера.

Для матрицы весов  $W \in \mathbb{R}^{m \times n}$  обновление включает предобуславливание с использованием аппроксимаций матриц статистики  $L \approx \sum_k G_k G_k^T$  и  $R \approx \sum_k G_k^T G_k$ , где  $G_k$  — градиенты.

Упрощенная концепция:

1. Вычислить градиент  $G_k$ .
2. Обновить статистики  $L_k = \beta L_{k-1} + (1 - \beta) G_k G_k^T$  и  $R_k = \beta R_{k-1} + (1 - \beta) G_k^T G_k$ .

## Shampoo<sup>3</sup>

Расшифровывается как **Stochastic Hessian-Approximation Matrix Preconditioning for Optimization Of deep networks**. Это метод, вдохновленный оптимизацией второго порядка, разработанный для глубокого обучения больших моделей.

**Основная идея:** Апроксимирует полноматричный предобуславливатель AdaGrad, используя эффективные матричные структуры, в частности произведения Кронекера.

Для матрицы весов  $W \in \mathbb{R}^{m \times n}$  обновление включает предобуславливание с использованием аппроксимаций матриц статистики  $L \approx \sum_k G_k G_k^T$  и  $R \approx \sum_k G_k^T G_k$ , где  $G_k$  — градиенты.

Упрощенная концепция:

1. Вычислить градиент  $G_k$ .
2. Обновить статистики  $L_k = \beta L_{k-1} + (1 - \beta) G_k G_k^T$  и  $R_k = \beta R_{k-1} + (1 - \beta) G_k^T G_k$ .
3. Вычислить предобуславливатели  $P_L = L_k^{-1/4}$  и  $P_R = R_k^{-1/4}$ . (Обратный матричный корень)

## Shampoo<sup>3</sup>

Расшифровывается как **Stochastic Hessian-Approximation Matrix Preconditioning for Optimization Of deep networks**. Это метод, вдохновленный оптимизацией второго порядка, разработанный для глубокого обучения больших моделей.

**Основная идея:** Апроксимирует полноматричный предобуславливатель AdaGrad, используя эффективные матричные структуры, в частности произведения Кронекера.

Для матрицы весов  $W \in \mathbb{R}^{m \times n}$  обновление включает предобуславливание с использованием аппроксимаций матриц статистики  $L \approx \sum_k G_k G_k^T$  и  $R \approx \sum_k G_k^T G_k$ , где  $G_k$  — градиенты.

Упрощенная концепция:

1. Вычислить градиент  $G_k$ .
2. Обновить статистики  $L_k = \beta L_{k-1} + (1 - \beta) G_k G_k^T$  и  $R_k = \beta R_{k-1} + (1 - \beta) G_k^T G_k$ .
3. Вычислить предобуславливатели  $P_L = L_k^{-1/4}$  и  $P_R = R_k^{-1/4}$ . (Обратный матричный корень)
4. Обновить:  $W_{k+1} = W_k - \alpha P_L G_k P_R$ .

## Shampoo<sup>3</sup>

Расшифровывается как **Stochastic Hessian-Approximation Matrix Preconditioning for Optimization Of deep networks**. Это метод, вдохновленный оптимизацией второго порядка, разработанный для глубокого обучения больших моделей.

**Основная идея:** Апроксимирует полноматричный предобуславливатель AdaGrad, используя эффективные матричные структуры, в частности произведения Кронекера.

Для матрицы весов  $W \in \mathbb{R}^{m \times n}$  обновление включает предобуславливание с использованием аппроксимаций матриц статистики  $L \approx \sum_k G_k G_k^T$  и  $R \approx \sum_k G_k^T G_k$ , где  $G_k$  — градиенты.

Упрощенная концепция:

1. Вычислить градиент  $G_k$ .
2. Обновить статистики  $L_k = \beta L_{k-1} + (1 - \beta) G_k G_k^T$  и  $R_k = \beta R_{k-1} + (1 - \beta) G_k^T G_k$ .
3. Вычислить предобуславливатели  $P_L = L_k^{-1/4}$  и  $P_R = R_k^{-1/4}$ . (Обратный матричный корень)
4. Обновить:  $W_{k+1} = W_k - \alpha P_L G_k P_R$ .

## Shampoo<sup>3</sup>

Расшифровывается как **Stochastic Hessian-Approximation Matrix Preconditioning for Optimization Of deep networks**. Это метод, вдохновленный оптимизацией второго порядка, разработанный для глубокого обучения больших моделей.

**Основная идея:** Апроксимирует полноматричный предобуславливатель AdaGrad, используя эффективные матричные структуры, в частности произведения Кронекера.

Для матрицы весов  $W \in \mathbb{R}^{m \times n}$  обновление включает предобуславливание с использованием аппроксимаций матриц статистики  $L \approx \sum_k G_k G_k^T$  и  $R \approx \sum_k G_k^T G_k$ , где  $G_k$  — градиенты.

Упрощенная концепция:

1. Вычислить градиент  $G_k$ .
2. Обновить статистики  $L_k = \beta L_{k-1} + (1 - \beta) G_k G_k^T$  и  $R_k = \beta R_{k-1} + (1 - \beta) G_k^T G_k$ .
3. Вычислить предобуславливатели  $P_L = L_k^{-1/4}$  и  $P_R = R_k^{-1/4}$ . (Обратный матричный корень)
4. Обновить:  $W_{k+1} = W_k - \alpha P_L G_k P_R$ .

**Заметки:**

- Нацелен на более эффективный учет информации о кривизне, чем методы первого порядка.

## Shampoo<sup>3</sup>

Расшифровывается как **Stochastic Hessian-Approximation Matrix Preconditioning for Optimization Of deep networks**. Это метод, вдохновленный оптимизацией второго порядка, разработанный для глубокого обучения больших моделей.

**Основная идея:** Апроксимирует полноматричный предобуславливатель AdaGrad, используя эффективные матричные структуры, в частности произведения Кронекера.

Для матрицы весов  $W \in \mathbb{R}^{m \times n}$  обновление включает предобуславливание с использованием аппроксимаций матриц статистики  $L \approx \sum_k G_k G_k^T$  и  $R \approx \sum_k G_k^T G_k$ , где  $G_k$  — градиенты.

Упрощенная концепция:

1. Вычислить градиент  $G_k$ .
2. Обновить статистики  $L_k = \beta L_{k-1} + (1 - \beta) G_k G_k^T$  и  $R_k = \beta R_{k-1} + (1 - \beta) G_k^T G_k$ .
3. Вычислить предобуславливатели  $P_L = L_k^{-1/4}$  и  $P_R = R_k^{-1/4}$ . (Обратный матричный корень)
4. Обновить:  $W_{k+1} = W_k - \alpha P_L G_k P_R$ .

**Заметки:**

- Нацелен на более эффективный учет информации о кривизне, чем методы первого порядка.
- Вычислительно дороже, чем Adam, но может сходиться быстрее или к лучшим решениям с точки зрения количества шагов.

## Shampoo<sup>3</sup>

Расшифровывается как **Stochastic Hessian-Approximation Matrix Preconditioning for Optimization Of deep networks**. Это метод, вдохновленный оптимизацией второго порядка, разработанный для глубокого обучения больших моделей.

**Основная идея:** Апроксимирует полноматричный предобуславливатель AdaGrad, используя эффективные матричные структуры, в частности произведения Кронекера.

Для матрицы весов  $W \in \mathbb{R}^{m \times n}$  обновление включает предобуславливание с использованием аппроксимаций матриц статистики  $L \approx \sum_k G_k G_k^T$  и  $R \approx \sum_k G_k^T G_k$ , где  $G_k$  — градиенты.

Упрощенная концепция:

1. Вычислить градиент  $G_k$ .
2. Обновить статистики  $L_k = \beta L_{k-1} + (1 - \beta) G_k G_k^T$  и  $R_k = \beta R_{k-1} + (1 - \beta) G_k^T G_k$ .
3. Вычислить предобуславливатели  $P_L = L_k^{-1/4}$  и  $P_R = R_k^{-1/4}$ . (Обратный матричный корень)
4. Обновить:  $W_{k+1} = W_k - \alpha P_L G_k P_R$ .

**Заметки:**

- Нацелен на более эффективный учет информации о кривизне, чем методы первого порядка.
- Вычислительно дороже, чем Adam, но может сходиться быстрее или к лучшим решениям с точки зрения количества шагов.
- Требует тщательной реализации для эффективности (например, эффективное вычисление обратных матричных корней, работа с большими матрицами).

## Shampoo<sup>3</sup>

Расшифровывается как **Stochastic Hessian-Approximation Matrix Preconditioning for Optimization Of deep networks**. Это метод, вдохновленный оптимизацией второго порядка, разработанный для глубокого обучения больших моделей.

**Основная идея:** Апроксимирует полноматричный предобуславливатель AdaGrad, используя эффективные матричные структуры, в частности произведения Кронекера.

Для матрицы весов  $W \in \mathbb{R}^{m \times n}$  обновление включает предобуславливание с использованием аппроксимаций матриц статистики  $L \approx \sum_k G_k G_k^T$  и  $R \approx \sum_k G_k^T G_k$ , где  $G_k$  — градиенты.

Упрощенная концепция:

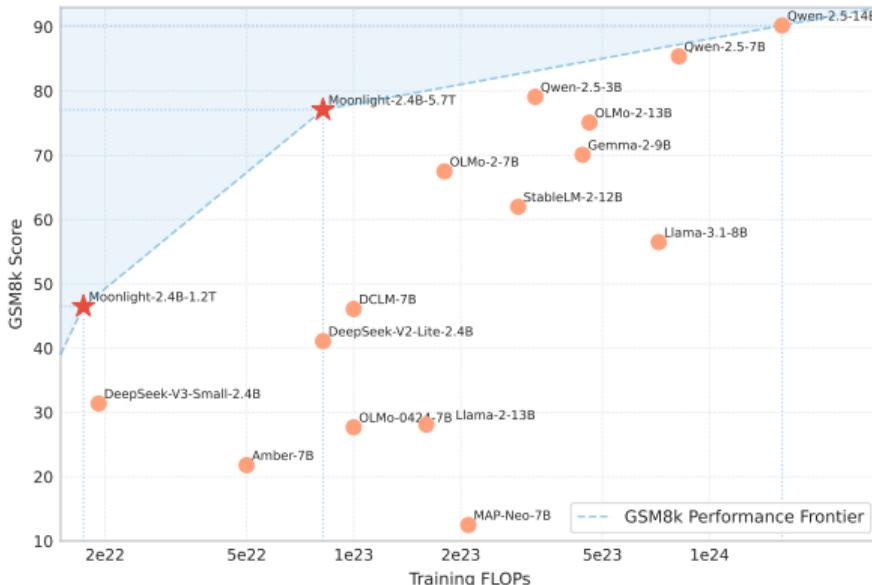
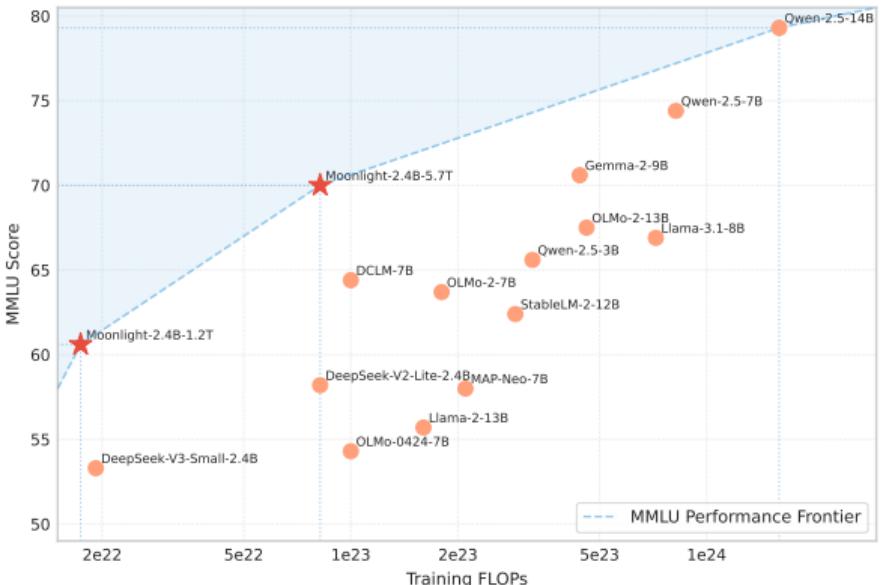
1. Вычислить градиент  $G_k$ .
2. Обновить статистики  $L_k = \beta L_{k-1} + (1 - \beta) G_k G_k^T$  и  $R_k = \beta R_{k-1} + (1 - \beta) G_k^T G_k$ .
3. Вычислить предобуславливатели  $P_L = L_k^{-1/4}$  и  $P_R = R_k^{-1/4}$ . (Обратный матричный корень)
4. Обновить:  $W_{k+1} = W_k - \alpha P_L G_k P_R$ .

**Заметки:**

- Нацелен на более эффективный учет информации о кривизне, чем методы первого порядка.
- Вычислительно дороже, чем Adam, но может сходиться быстрее или к лучшим решениям с точки зрения количества шагов.
- Требует тщательной реализации для эффективности (например, эффективное вычисление обратных матричных корней, работа с большими матрицами).



# Новый подход к оптимизации<sup>4</sup>



Модели, отмеченные звёздочкой, были обучены методом Мион, остальные модели были обучены другими алгоритмами оптимизации.

<sup>4</sup>KIMI K2: OPEN AGENTIC INTELLIGENCE

## Интуиция за методом Мион<sup>5</sup>

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

$$f(x) = f(x_k) + \langle \nabla f(x_k), x - x_k \rangle + \mathcal{O}(\|x - x_k\|_2^2).$$

## Интуиция за методом Мион<sup>5</sup>

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

Функция потерь



$$f(x) = f(x_k) + \langle \nabla f(x_k), x - x_k \rangle + \mathcal{O}(\|x - x_k\|_2^2).$$

## Интуиция за методом Мион<sup>5</sup>

Функция потерь

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

$$f(x) = \underbrace{f(x_k) + \langle \nabla f(x_k), x - x_k \rangle}_{\text{Линейная аппроксимация}} + \mathcal{O}(\|x - x_k\|_2^2).$$

## Интуиция за методом Мион<sup>5</sup>

$$f(x) = \underbrace{f(x_k) + \langle \nabla f(x_k), x - x_k \rangle}_{\text{Линейная аппроксимация}} + \mathcal{O}(\|x - x_k\|_2^2).$$

Функция потерь

Хорошее приближение в окрестности  $x_k$

<sup>5</sup>Презентация R. Gower

## Интуиция за методом Мион. Градиентный спуск

$$x_{k+1} = \underset{x \in \mathbb{R}^p}{\operatorname{argmin}} \left( f(x_k) + \langle \nabla f(x_k), x - x_k \rangle + \frac{1}{2\alpha} \|x - x_k\|_2^2 \right)$$

## Интуиция за методом Миоп. Градиентный спуск

$$\begin{aligned}x_{k+1} &= \underset{x \in \mathbb{R}^p}{\operatorname{argmin}} \left( f(x_k) + \langle \nabla f(x_k), x - x_k \rangle + \frac{1}{2\alpha} \|x - x_k\|_2^2 \right) \\&= x_k - \alpha \nabla f(x_k)\end{aligned}$$

## Интуиция за методом Миоп. Градиентный спуск

Штраф за  
дальность от  $x_k$

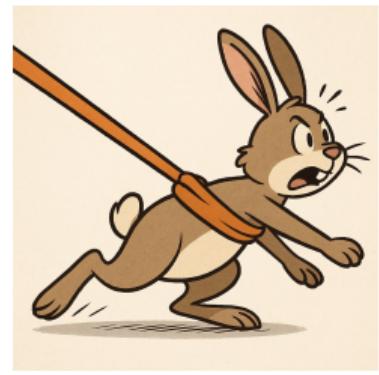
$$\begin{aligned}x_{k+1} &= \underset{x \in \mathbb{R}^p}{\operatorname{argmin}} \left( f(x_k) + \langle \nabla f(x_k), x - x_k \rangle + \frac{1}{2\alpha} \|x - x_k\|_2^2 \right) \\&= x_k - \alpha \nabla f(x_k)\end{aligned}$$

## Интуиция за методом Мион. Градиентный спуск

$$x_{k+1} = \underset{x \in \mathbb{R}^p}{\operatorname{argmin}} \left( f(x_k) + \langle \nabla f(x_k), x - x_k \rangle + \frac{1}{2\alpha} \|x - x_k\|_2^2 \right)$$
$$= x_k - \alpha \nabla f(x_k)$$

Шаг обучения /  
коэффициент регуляризации

Штраф за  
дальность от  $x_k$



## Интуиция за методом Мион. Нормированный градиентный спуск

$$x_{k+1} = \underset{\|x - x_k\|_2 = \alpha}{\operatorname{argmin}} (f(x_k) + \langle \nabla f(x_k), x - x_k \rangle)$$

## Интуиция за методом Миоп. Нормированный градиентный спуск

$$\begin{aligned}x_{k+1} &= \underset{\|x - x_k\|_2 = \alpha}{\operatorname{argmin}} (f(x_k) + \langle \nabla f(x_k), x - x_k \rangle) \\&= x_k - \alpha \frac{\nabla f(x_k)}{\|\nabla f(x_k)\|_2}\end{aligned}$$

## Интуиция за методом Миоп. Нормированный градиентный спуск

$$\begin{aligned}x_{k+1} &= \underset{\|x - x_k\|_2 = \alpha}{\operatorname{argmin}} (f(x_k) + \langle \nabla f(x_k), x - x_k \rangle) \\&= x_k - \alpha \frac{\nabla f(x_k)}{\|\nabla f(x_k)\|_2}\end{aligned}$$

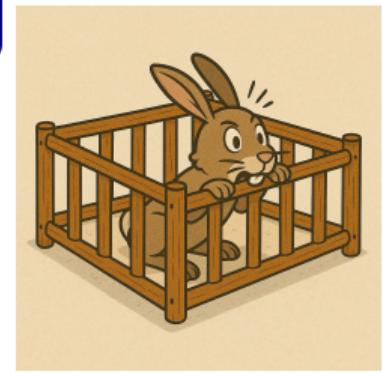
Ограничение на  
длину шага

## Интуиция за методом Мион. Нормированный градиентный спуск

$$\begin{aligned}x_{k+1} &= \underset{\|x - x_k\|_2 = \alpha}{\operatorname{argmin}} (f(x_k) + \langle \nabla f(x_k), x - x_k \rangle) \\&= x_k - \alpha \frac{\nabla f(x_k)}{\|\nabla f(x_k)\|_2}\end{aligned}$$

Параметр ограничения / шаг обучения

Ограничение на длину шага



# Что насчёт других норм?

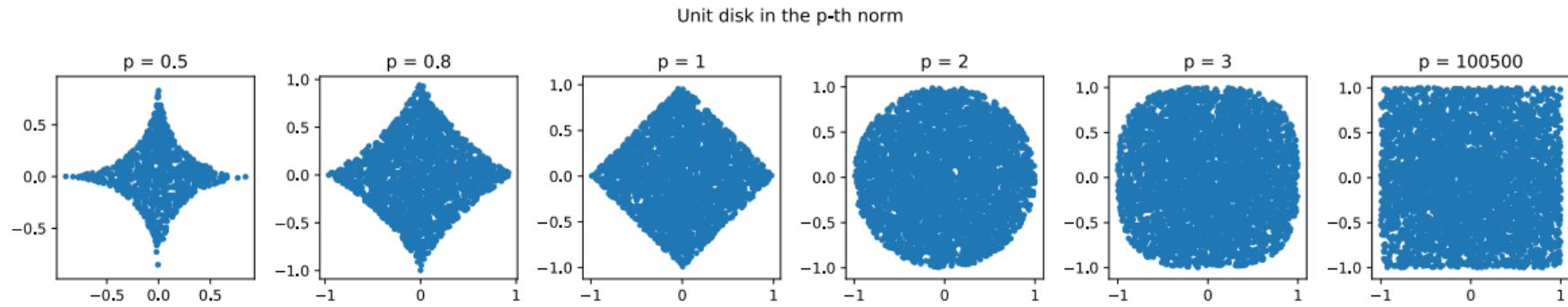


Рис. 2: Примеры шаров в разных нормах

## Неевклидовы записи методов<sup>6</sup>

Linear Minimization Oracle:

$$\text{LMO}_{\|\cdot\|}(g) = \underset{\|x\|=1}{\operatorname{argmin}} \langle g, x \rangle$$

### ! Неевклидов градиентный спуск

Для вектора градиента  $g = \nabla f(x_k)$  и шага  $\alpha > 0$ :

$$x_{k+1} = \underset{x \in \mathbb{R}^p}{\operatorname{argmin}} \left( f(x_k) + \langle g, x - x_k \rangle + \frac{1}{2\alpha} \|x - x_k\|^2 \right)$$

<sup>6</sup>Old Optimizer, New Norm: An Anthology

## Неевклидовы записи методов<sup>6</sup>

Linear Minimization Oracle:

$$\text{LMO}_{\|\cdot\|}(g) = \underset{\|x\|=1}{\operatorname{argmin}} \langle g, x \rangle$$

### ! Неевклидов градиентный спуск

Для вектора градиента  $g = \nabla f(x_k)$  и шага  $\alpha > 0$ :

$$x_{k+1} = \underset{x \in \mathbb{R}^p}{\operatorname{argmin}} \left( f(x_k) + \langle g, x - x_k \rangle + \frac{1}{2\alpha} \|x - x_k\|^2 \right)$$

### ! Неевклидов нормированный градиентный спуск

Для вектора градиента  $g = \nabla f(x_k)$  и шага  $\alpha > 0$ :

$$\begin{aligned} x_{k+1} &= \underset{\|x-x_k\|=\alpha}{\operatorname{argmin}} (f(x_k) + \langle g, x - x_k \rangle) \\ &= x_k + \alpha \text{LMO}_{\|\cdot\|}(g) \end{aligned}$$

<sup>6</sup>Old Optimizer, New Norm: An Anthology

## В нейросетях параметры — матрицы

- В линейных слоях, attention, embedding-слоях параметр — матрица весов

$$W \in \mathbb{R}^{d \times n}, \quad G_k = \nabla_W f(W_k) \in \mathbb{R}^{d \times n}.$$

## В нейросетях параметры — матрицы

- В линейных слоях, attention, embedding-слоях параметр — матрица весов

$$W \in \mathbb{R}^{d \times n}, \quad G_k = \nabla_W f(W_k) \in \mathbb{R}^{d \times n}.$$

- Естественно использовать **матричные нормы**: операторную  $\|\cdot\|_{\text{op}}$ , ядерную  $\|\cdot\|_{\text{nuc}}$ , Фробениуса  $\|\cdot\|_F$  и т.п.

## В нейросетях параметры — матрицы

- В линейных слоях, attention, embedding-слоях параметр — матрица весов

$$W \in \mathbb{R}^{d \times n}, \quad G_k = \nabla_W f(W_k) \in \mathbb{R}^{d \times n}.$$

- Естественно использовать **матричные нормы**: операторную  $\|\cdot\|_{\text{op}}$ , ядерную  $\|\cdot\|_{\text{nuc}}$ , Фробениуса  $\|\cdot\|_F$  и т.п.
- Вся логика переносится: вместо вектора ищем «лучшее направление спуска» среди матриц заданной длины.

## В нейросетях параметры — матрицы

- В линейных слоях, attention, embedding-слоях параметр — матрица весов

$$W \in \mathbb{R}^{d \times n}, \quad G_k = \nabla_W f(W_k) \in \mathbb{R}^{d \times n}.$$

- Естественно использовать **матричные нормы**: операторную  $\|\cdot\|_{\text{op}}$ , ядерную  $\|\cdot\|_{\text{nuc}}$ , Фробениуса  $\|\cdot\|_F$  и т.п.
- Вся логика переносится: вместо вектора ищем «лучшее направление спуска» среди матриц заданной длины.
- Скалярное произведение:

$$\langle A, B \rangle := \text{tr}(A^\top B) = \sum_{ij} A_{ij} B_{ij}.$$

## Неевклидов нормированный спуск для матриц

Пусть заданы матричная норма  $\|\cdot\|$  и шаг  $\lambda > 0$ . Тогда нормированный шаг по матрице  $W$ :

$$W_{k+1} = \operatorname{argmin}_{\|W-W_k\|=\lambda} \left( f(W_k) + \langle G_k, W - W_k \rangle \right) = W_k + \lambda \text{LMO}_{\|\cdot\|}(G_k),$$

где

$$\text{LMO}_{\|\cdot\|}(G) = \operatorname{argmin}_{\|W\|=1} \langle G, W \rangle$$

— тот же самый LMO, только теперь он ищет **матрицу** единичной нормы, дающую наибольшее убывание линейного приближения.

## Операторная норма и быстрый расчёт ( $UV^\top$ )

Рассмотрим операторную (спектральную) норму  $\|\cdot\|_{\text{op}}$ . Пусть

$$G_k = U\Sigma V^\top$$

— редуцированное SVD градиента. Тогда

## Операторная норма и быстрый расчёт ( $UV^\top$ )

Рассмотрим операторную (спектральную) норму  $\|\cdot\|_{\text{op}}$ . Пусть

$$G_k = U\Sigma V^\top$$

— редуцированное SVD градиента. Тогда

- LMO (с «max»-формулировкой) по операторной норме:

$$\text{LMO}_{\|\cdot\|}(G) = -UV^\top,$$

то есть оптимальное направление — **polar factor** (matrix sign) матрицы  $G_k$ .

## Операторная норма и быстрый расчёт ( $UV^\top$ )

Рассмотрим операторную (спектральную) норму  $\|\cdot\|_{\text{op}}$ . Пусть

$$G_k = U\Sigma V^\top$$

— редуцированное SVD градиента. Тогда

- LMO (с «max»-формулировкой) по операторной норме:

$$\text{LMO}_{\|\cdot\|}(G) = -UV^\top,$$

то есть оптимальное направление — **polar factor** (matrix sign) матрицы  $G_k$ .

- Проблема: полное SVD на каждом шаге дорого. Хорошая новость: нам нужен только  $(UV^\top)$ , его можно считать гораздо быстрее:

## Операторная норма и быстрый расчёт ( $UV^\top$ )

Рассмотрим операторную (спектральную) норму  $\|\cdot\|_{\text{op}}$ . Пусть

$$G_k = U\Sigma V^\top$$

— редуцированное SVD градиента. Тогда

- LMO (с «max»-формулировкой) по операторной норме:

$$\text{LMO}_{\|\cdot\|}(G) = -UV^\top,$$

то есть оптимальное направление — **polar factor** (matrix sign) матрицы  $G_k$ .

- Проблема: полное SVD на каждом шаге дорого. Хорошая новость: нам нужен только  $(UV^\top)$ , его можно считать гораздо быстрее:
- итерациями **Newton–Schulz/ Polar Express**, которые используют только матричные умножения, дают приближение  $UV^\top$  за несколько шагов и снимают узкое место полного SVD внутри Muon.

# Обучение GPT-2 (124M) на FineWeb

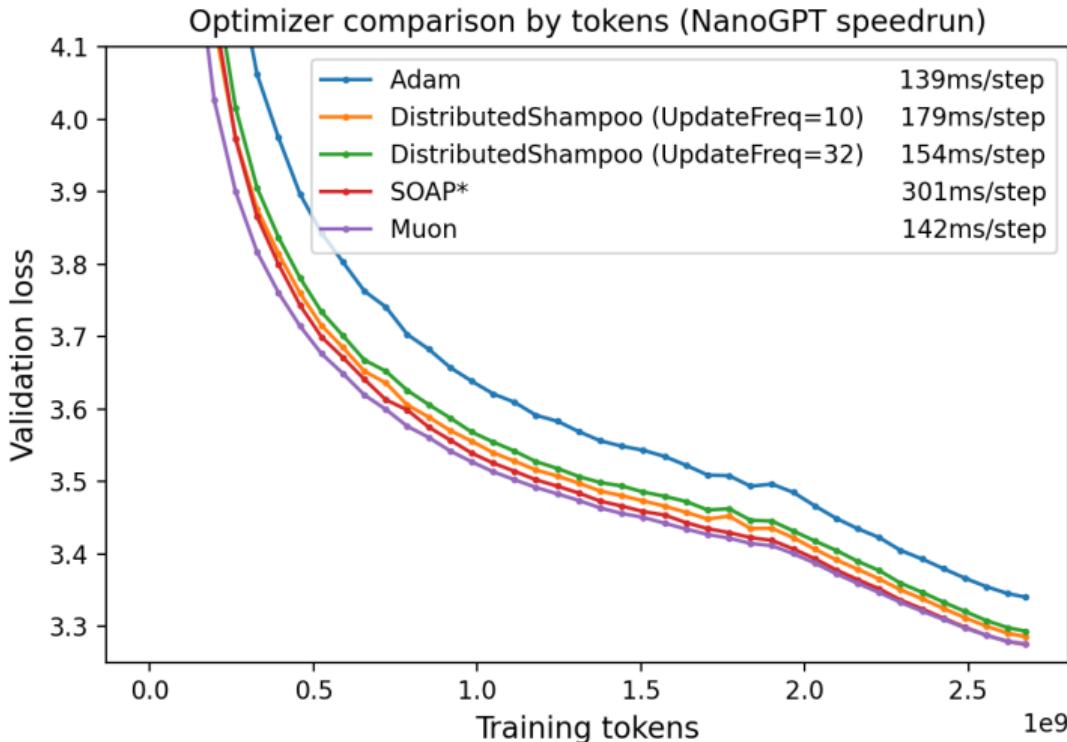


Рис. 3: NanoGPT speedrun

# Обучение GPT-2 (124M) на FineWeb

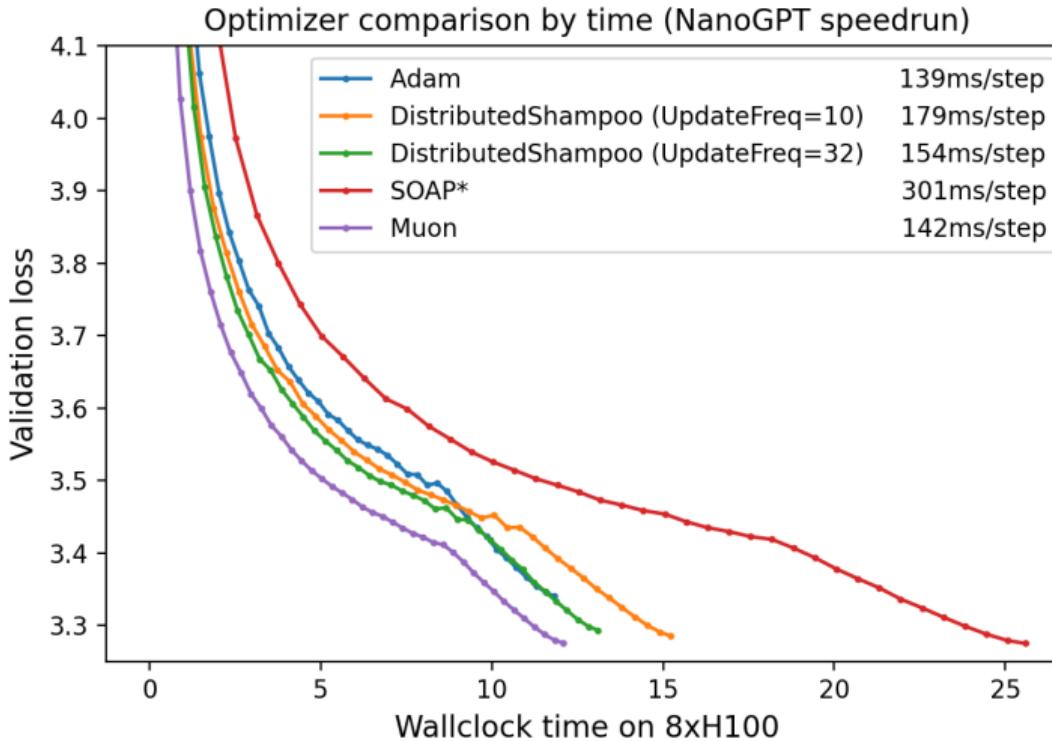


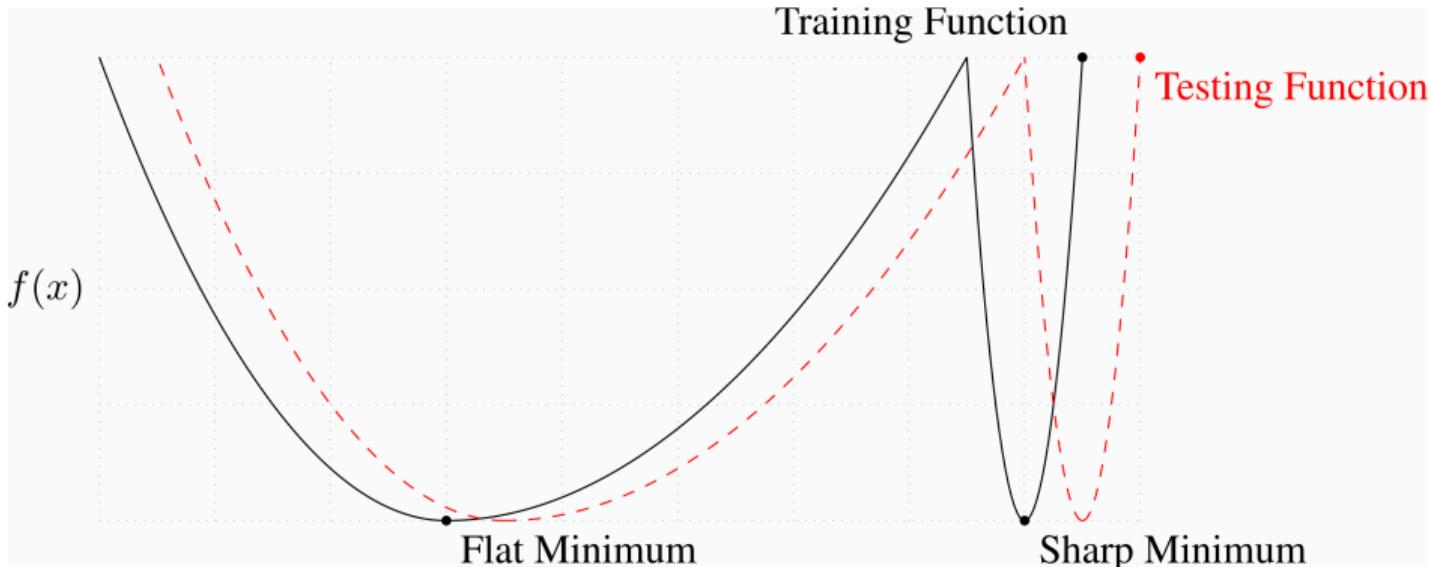
Рис. 4: NanoGPT speedrun

# Сравнение Muon с AdamW на LogReg

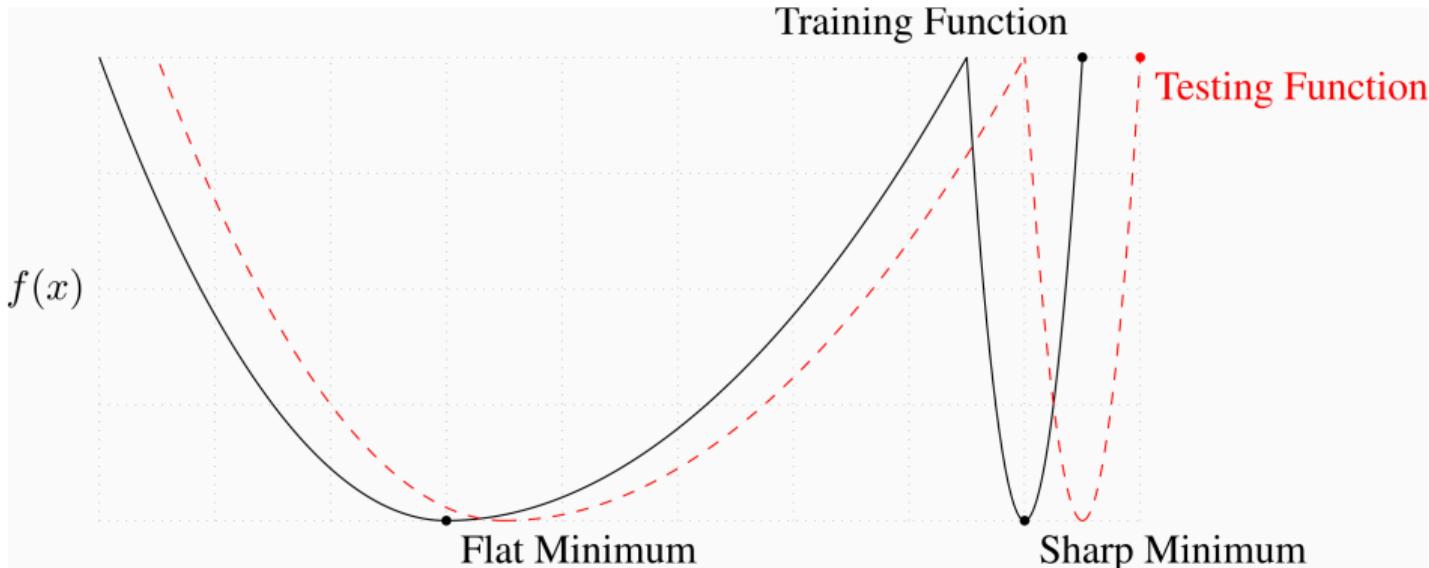
⌚ Простое сравнение Muon и AdamW на небольшой задаче LogReg

**SAM**

## Плоский минимум vs Острый минимум



## Плоский минимум vs Острый минимум



### Question

Что не так с острым минимумом?

## Sharpness-Aware Minimization <sup>7</sup>

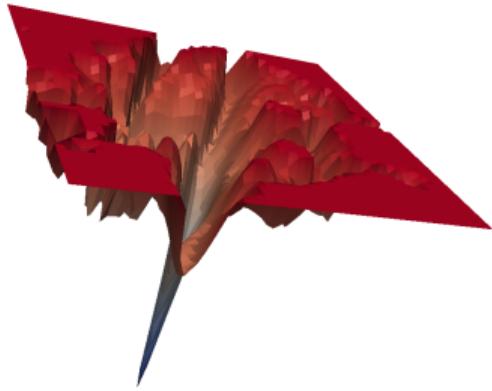


Рис. 5: Острый минимум, к которому сошлась ResNet, обученная с помощью SGD.

<sup>7</sup>Foret, Pierre, et al. "Sharpness-aware minimization for efficiently improving generalization." (2020)

## Sharpness-Aware Minimization <sup>7</sup>

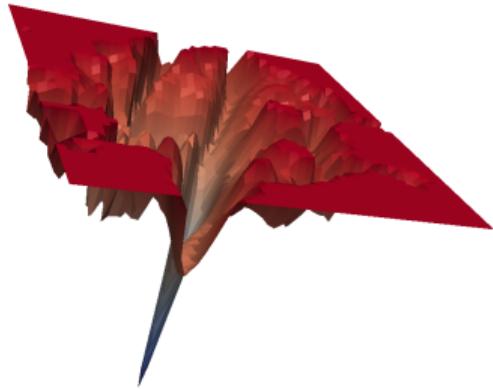


Рис. 5: Острый минимум, к которому сошлась ResNet, обученная с помощью SGD.

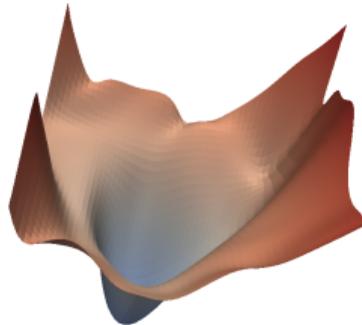


Рис. 6: Широкий минимум, к которому сошлась та же ResNet, обученная с помощью SAM.

<sup>7</sup>Foret, Pierre, et al. "Sharpness-aware minimization for efficiently improving generalization." (2020)

## Sharpness-Aware Minimization<sup>7</sup>

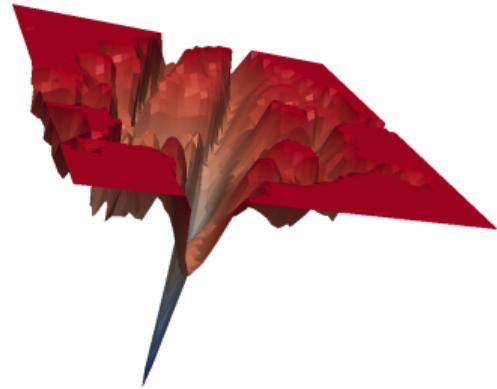


Рис. 5: Острый минимум, к которому сошлась ResNet, обученная с помощью SGD.

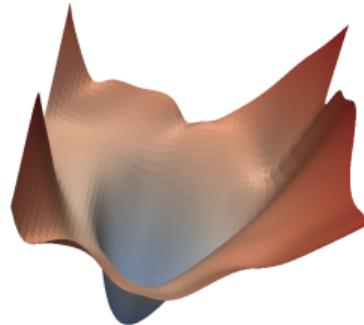


Рис. 6: Широкий минимум, к которому сошлась та же ResNet, обученная с помощью SAM.

Sharpness-Aware Minimization (SAM) — это процедура, целью которой является улучшение обобщающей способности модели путем одновременной минимизации значения функции потерь и **остроты (sharpness) функции потерь**.

<sup>7</sup>Foret, Pierre, et al. "Sharpness-aware minimization for efficiently improving generalization." (2020)

## Постановка задачи обучения

Обучающая выборка, полученная *i.i.d.* из распределения  $D$ :

$$S = \{(x_i, y_i)\}_{i=1}^n,$$

где  $x_i$  — вектор признаков, а  $y_i$  — метка.

## Постановка задачи обучения

Обучающая выборка, полученная *i.i.d.* из распределения  $D$ :

$$S = \{(x_i, y_i)\}_{i=1}^n,$$

где  $x_i$  — вектор признаков, а  $y_i$  — метка.

Функция потерь на обучающей выборке:

$$L_S = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n l(w, x_i, y_i),$$

где  $l$  — функция потерь для одного объекта,  $w$  — параметры.

## Постановка задачи обучения

Обучающая выборка, полученная *i.i.d.* из распределения  $D$ :

$$S = \{(x_i, y_i)\}_{i=1}^n,$$

где  $x_i$  — вектор признаков, а  $y_i$  — метка.

Функция потерь на обучающей выборке:

$$L_S = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n l(w, x_i, y_i),$$

где  $l$  — функция потерь для одного объекта,  $w$  — параметры.

Функция потерь на генеральной совокупности (population loss):

$$L_D = \mathbb{E}_{(x,y)}[l(w, x, y)]$$

## Что такое sharpness (острота)?

### Theorem

Для любого  $\rho > 0$ , с высокой вероятностью по обучающей выборке  $S$ , сгенерированной из распределения  $D$ ,

$$L_D(w) \leq \max_{\|\epsilon\|_2 \leq \rho} L_S(w + \epsilon) + h(\|w\|_2^2 / \rho^2),$$

где  $h : \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}_+$  — строго возрастающая функция (при некоторых технических условиях на  $L_D(w)$ ).

# Что такое sharpness (острота)?

## Theorem

Для любого  $\rho > 0$ , с высокой вероятностью по обучающей выборке  $S$ , сгенерированной из распределения  $D$ ,

$$L_D(w) \leq \max_{\|\epsilon\|_2 \leq \rho} L_S(w + \epsilon) + h(\|w\|_2^2 / \rho^2),$$

где  $h : \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}_+$  — строго возрастающая функция (при некоторых технических условиях на  $L_D(w)$ ).

Добавляя и вычитая  $L_S(w)$ :

$$\left[ \max_{\|\epsilon\|_2 \leq \rho} L_S(w + \epsilon) - L_S(w) \right] + L_S(w) + h(\|w\|_2^2 / \rho^2)$$

Слагаемое в квадратных скобках отражает **остроту (sharpness)**  $L_S$  в точке  $w$ , измеряя, как быстро может возрасти ошибка обучения при переходе от  $w$  к близкому значению параметров.

## Sharpness-Aware Minimization

Функция  $h$  заменяется на более простую константу  $\lambda$ . Авторы предлагают выбирать значения параметров, решая следующую задачу Sharpness-Aware Minimization (SAM):

$$\min_w L_S^{SAM}(w) + \lambda \|w\|_2^2 \quad \text{где} \quad L_S^{SAM}(w) \triangleq \max_{\|\epsilon\|_p \leq \rho} L_S(w + \epsilon),$$

с гиперпараметром  $\rho \geq 0$  и  $p$  из  $[1, \infty]$  (небольшое обобщение, хотя  $p = 2$  эмпирически является лучшим выбором).

## Как минимизировать $L_S^{SAM}$ ?

Для минимизации  $L_S^{SAM}$  используется эффективная аппроксимация его градиента. Первым шагом рассматривается разложение Тейлора первого порядка для  $L_S(w + \epsilon)$ :

$$\epsilon^*(w) \triangleq \arg \max_{\|\epsilon\|_p \leq \rho} \{L_S(w + \epsilon)\} \approx \arg \max_{\|\epsilon\|_p \leq \rho} \{L_S(w) + \epsilon^T \nabla_w L_S(w)\} = \arg \max_{\|\epsilon\|_p \leq \rho} \{\epsilon^T \nabla_w L_S(w)\}.$$

## Как минимизировать $L_S^{SAM}$ ?

Для минимизации  $L_S^{SAM}$  используется эффективная аппроксимация его градиента. Первым шагом рассматривается разложение Тейлора первого порядка для  $L_S(w + \epsilon)$ :

$$\epsilon^*(w) \triangleq \arg \max_{\|\epsilon\|_p \leq \rho} \{L_S(w + \epsilon)\} \approx \arg \max_{\|\epsilon\|_p \leq \rho} \{L_S(w) + \epsilon^T \nabla_w L_S(w)\} = \arg \max_{\|\epsilon\|_p \leq \rho} \{\epsilon^T \nabla_w L_S(w)\}.$$

Последнее выражение — это просто argmax скалярного произведения векторов  $\epsilon$  и  $\nabla_w L_S(w)$ , и хорошо известно, какой аргумент его максимизирует:

$$\hat{\epsilon}(w) = \rho \operatorname{sign}(\nabla_w L_S(w)) |\nabla_w L_S(w)|^{q-1} / \left( \|\nabla_w L_S(w)\|_q^q \right)^{1/p},$$

где  $1/p + 1/q = 1$ .

## Как минимизировать $L_S^{SAM}$ ?

Для минимизации  $L_S^{SAM}$  используется эффективная аппроксимация его градиента. Первым шагом рассматривается разложение Тейлора первого порядка для  $L_S(w + \epsilon)$ :

$$\epsilon^*(w) \triangleq \arg \max_{\|\epsilon\|_p \leq \rho} \{L_S(w + \epsilon)\} \approx \arg \max_{\|\epsilon\|_p \leq \rho} \{L_S(w) + \epsilon^T \nabla_w L_S(w)\} = \arg \max_{\|\epsilon\|_p \leq \rho} \{\epsilon^T \nabla_w L_S(w)\}.$$

Последнее выражение — это просто argmax скалярного произведения векторов  $\epsilon$  и  $\nabla_w L_S(w)$ , и хорошо известно, какой аргумент его максимизирует:

$$\hat{\epsilon}(w) = \rho \operatorname{sign}(\nabla_w L_S(w)) |\nabla_w L_S(w)|^{q-1} / \left( \|\nabla_w L_S(w)\|_q^q \right)^{1/p},$$

где  $1/p + 1/q = 1$ .

Таким образом

$$\begin{aligned} \nabla_w L_S^{SAM}(w) &\approx \nabla_w L_S(w + \hat{\epsilon}(w)) = \frac{d(w + \hat{\epsilon}(w))}{dw} \nabla_w L_S(w) \Big|_{w+\hat{\epsilon}(w)} \\ &= \nabla_w L_S(w) \Big|_{w+\hat{\epsilon}(w)} + \frac{d\hat{\epsilon}(w)}{dw} \nabla_w L_S(w) \Big|_{w+\hat{\epsilon}(w)} \end{aligned}$$

## Sharpness-Aware Minimization

Современные фреймворки могут легко вычислить предыдущее приближение. Однако для ускорения вычислений члены второго порядка можно отбросить, получая:

$$\nabla_w L_S^{SAM}(w) \approx \nabla_w L_S(w) \Big|_{w+\hat{\epsilon}(w)}$$

# Sharpness-Aware Minimization

Современные фреймворки могут легко вычислить предыдущее приближение. Однако для ускорения вычислений члены второго порядка можно отбросить, получая:

$$\nabla_w L_S^{SAM}(w) \approx \nabla_w L_S(w)|_{w+\hat{\epsilon}(w)}$$

**Input:** Training set  $\mathcal{S} \triangleq \cup_{i=1}^n \{(\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i)\}$ , Loss function  
 $l : \mathcal{W} \times \mathcal{X} \times \mathcal{Y} \rightarrow \mathbb{R}_+$ , Batch size  $b$ , Step size  $\eta > 0$ ,  
Neighborhood size  $\rho > 0$ .

**Output:** Model trained with SAM

Initialize weights  $w_0$ ,  $t = 0$ ;

**while** not converged **do**

    Sample batch  $\mathcal{B} = \{(\mathbf{x}_1, \mathbf{y}_1), \dots, (\mathbf{x}_b, \mathbf{y}_b)\}$ ;

    Compute gradient  $\nabla_w L_{\mathcal{B}}(w)$  of the batch's training loss;

    Compute  $\hat{\epsilon}(w)$  per equation 2;

    Compute gradient approximation for the SAM objective

    (equation 3):  $\mathbf{g} = \nabla_w L_{\mathcal{B}}(w)|_{w+\hat{\epsilon}(w)}$ ;

    Update weights:  $w_{t+1} = w_t - \eta \mathbf{g}$ ;

$t = t + 1$ ;

**end**

**return**  $w_t$

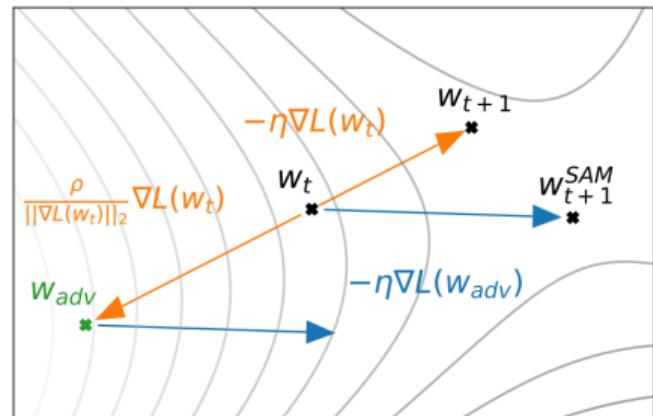


Figure 2: Schematic of the SAM parameter update.

## Результаты SAM

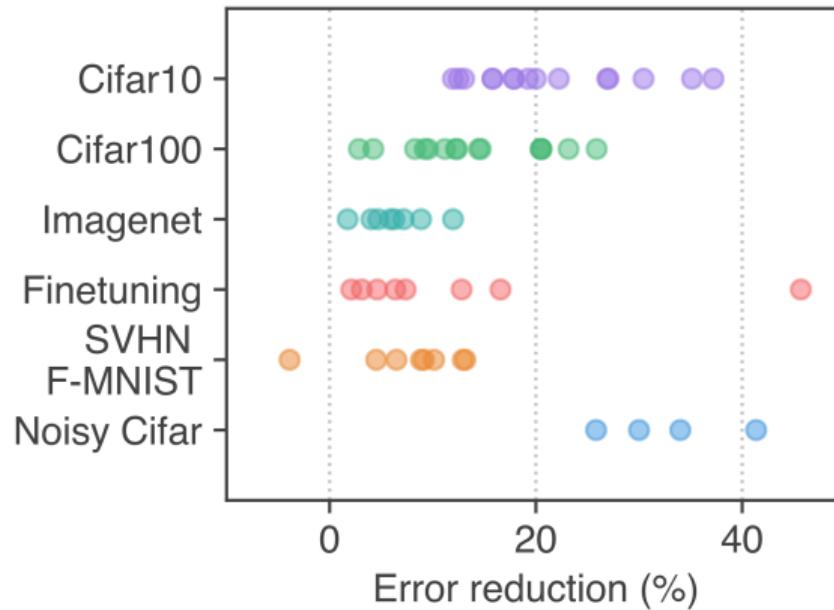


Рис. 8: Снижение частоты ошибок, полученное при переходе на SAM. Каждая точка соответствует отдельному набору данных / модели / аугментации данных.

## Связность мод (Mode Connectivity)

# Связность мод (Mode Connectivity) <sup>8</sup>

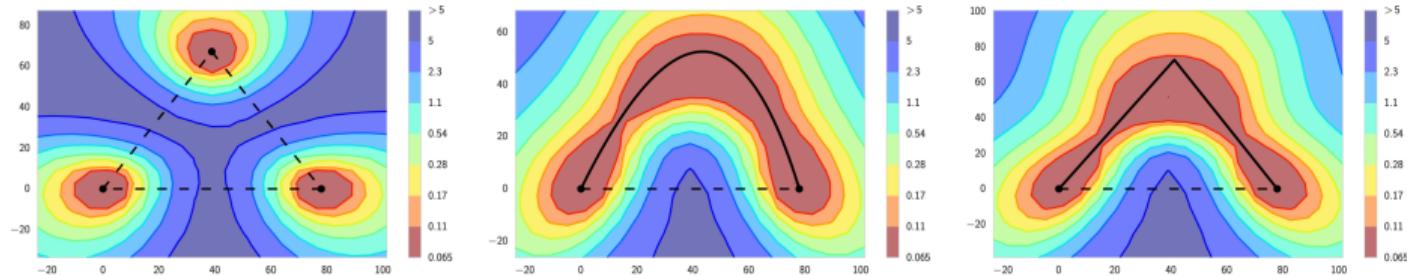


Рис. 9: Поверхность функции потерь (кросс-энтропия с  $l_2$ -регуляризацией) для ResNet-164 на CIFAR-100 как функция весов сети в двумерном подпространстве. На каждом графике горизонтальная ось фиксирована и проходит через оптимумы двух независимо обученных сетей. Вертикальная ось меняется между графиками при смене плоскостей (определенных в основном тексте). Слева: Три оптимума для независимо обученных сетей. В центре и справа: Квадратичная кривая Безье и ломаная с одним изгибом, соединяющие два нижних оптимума с левого графика вдоль пути с почти постоянной функцией потерь. Заметьте, что на каждом графике прямой линейный путь между модами привел бы к высоким потерям.

<sup>8</sup>Garipov, T., Izmailov, P., Podoprikhin, D., Vetrov, D. P., Wilson, A. G. (2018). Loss surfaces, mode connectivity, and fast ensembling of dnns. Advances in neural information processing systems, 31.

## Процедура поиска кривой

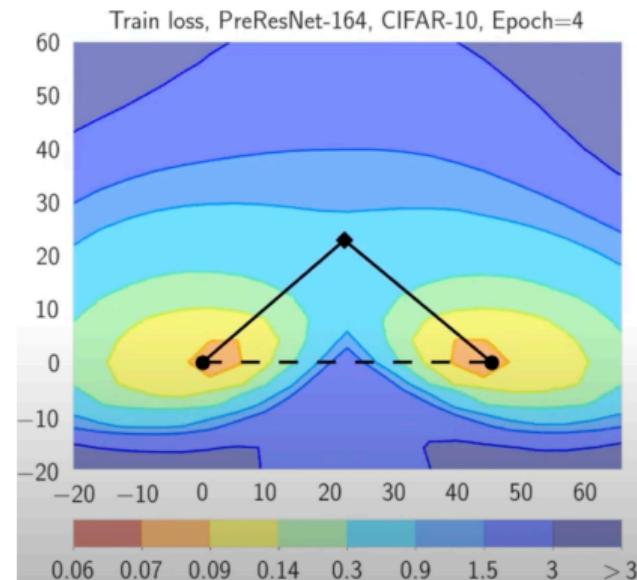
- Веса предобученных сетей:

$$\hat{w}_1, \hat{w}_2 \in \mathbb{R}^{|\text{net}|}$$

$$\phi_\theta(0) = \hat{w}_1, \quad \phi_\theta(1) = \hat{w}_2$$

$$\mathcal{L}(w)$$

$$\underset{\theta}{\text{minimize}} \quad \ell(\theta) = \int_0^1 \mathcal{L}(\phi_\theta(t)) dt = \mathbb{E}_{t \sim U(0,1)} \mathcal{L}(\phi_\theta(t))$$



## Процедура поиска кривой

- Веса предобученных сетей:

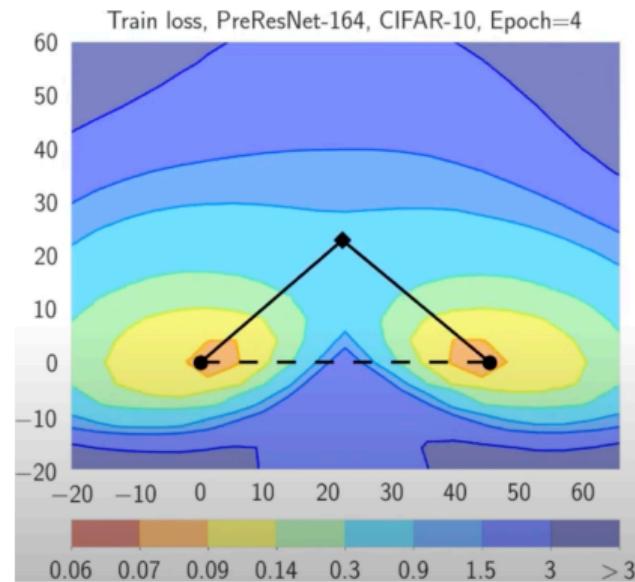
$$\hat{w}_1, \hat{w}_2 \in \mathbb{R}^{|net|}$$

- Определим параметрическую кривую:  
 $\phi_\theta(\cdot) : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}^{|net|}$

$$\phi_\theta(0) = \hat{w}_1, \quad \phi_\theta(1) = \hat{w}_2$$

$$\mathcal{L}(w)$$

$$\underset{\theta}{\text{minimize}} \quad \ell(\theta) = \int_0^1 \mathcal{L}(\phi_\theta(t)) dt = \mathbb{E}_{t \sim U(0,1)} \mathcal{L}(\phi_\theta(t))$$



## Процедура поиска кривой

- Веса предобученных сетей:

$$\hat{w}_1, \hat{w}_2 \in \mathbb{R}^{|net|}$$

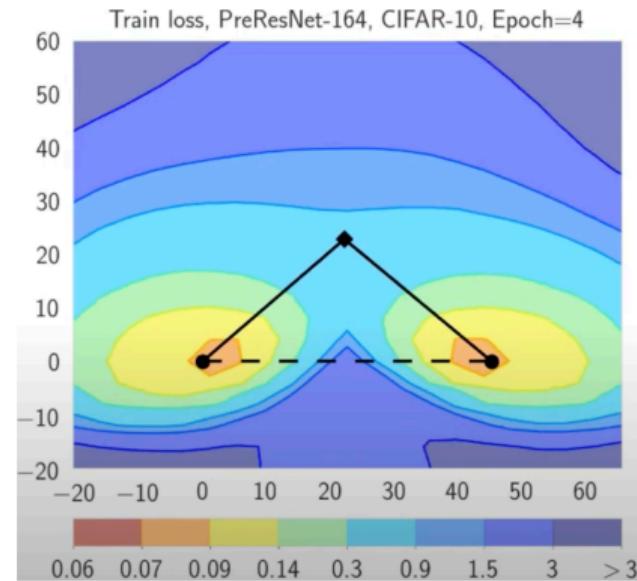
- Определим параметрическую кривую:  
 $\phi_\theta(\cdot) : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}^{|net|}$

$$\phi_\theta(0) = \hat{w}_1, \quad \phi_\theta(1) = \hat{w}_2$$

- Функция потерь DNN:

$$\mathcal{L}(w)$$

$$\underset{\theta}{\text{minimize}} \quad \ell(\theta) = \int_0^1 \mathcal{L}(\phi_\theta(t)) dt = \mathbb{E}_{t \sim U(0,1)} \mathcal{L}(\phi_\theta(t))$$



## Процедура поиска кривой

- Веса предобученных сетей:

$$\hat{w}_1, \hat{w}_2 \in \mathbb{R}^{|net|}$$

- Определим параметрическую кривую:  
 $\phi_\theta(\cdot) : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}^{|net|}$

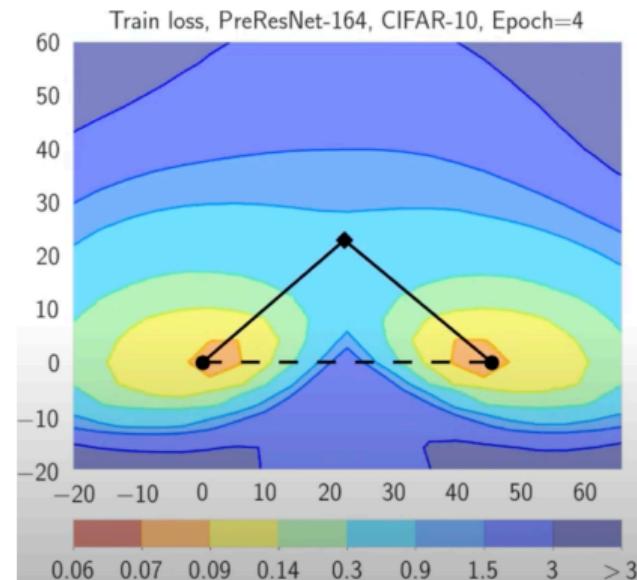
$$\phi_\theta(0) = \hat{w}_1, \quad \phi_\theta(1) = \hat{w}_2$$

- Функция потерь DNN:

$$\mathcal{L}(w)$$

- Минимизируем усредненную функцию потерь по  $\theta$ :

$$\underset{\theta}{\text{minimize}} \quad \ell(\theta) = \int_0^1 \mathcal{L}(\phi_\theta(t)) dt = \mathbb{E}_{t \sim U(0,1)} \mathcal{L}(\phi_\theta(t))$$



## Процедура поиска кривой

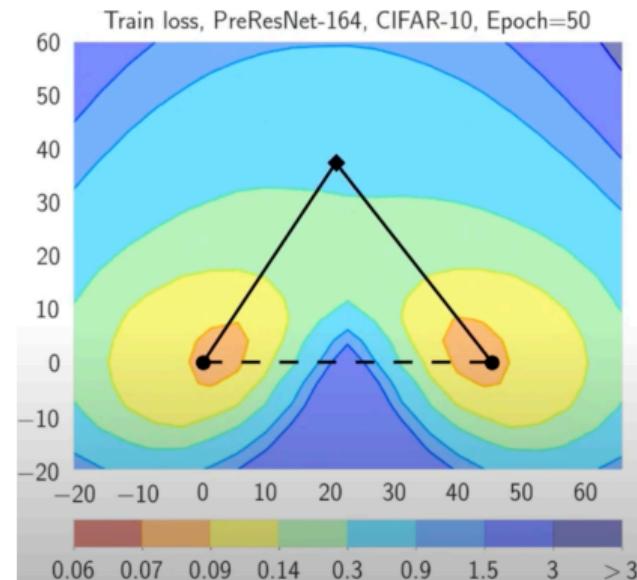
- Веса предобученных сетей:

$$\hat{w}_1, \hat{w}_2 \in \mathbb{R}^{|\text{net}|}$$

$$\phi_\theta(0) = \hat{w}_1, \quad \phi_\theta(1) = \hat{w}_2$$

$$\mathcal{L}(w)$$

$$\underset{\theta}{\text{minimize}} \quad \ell(\theta) = \int_0^1 \mathcal{L}(\phi_\theta(t)) dt = \mathbb{E}_{t \sim U(0,1)} \mathcal{L}(\phi_\theta(t))$$



## Процедура поиска кривой

- Веса предобученных сетей:

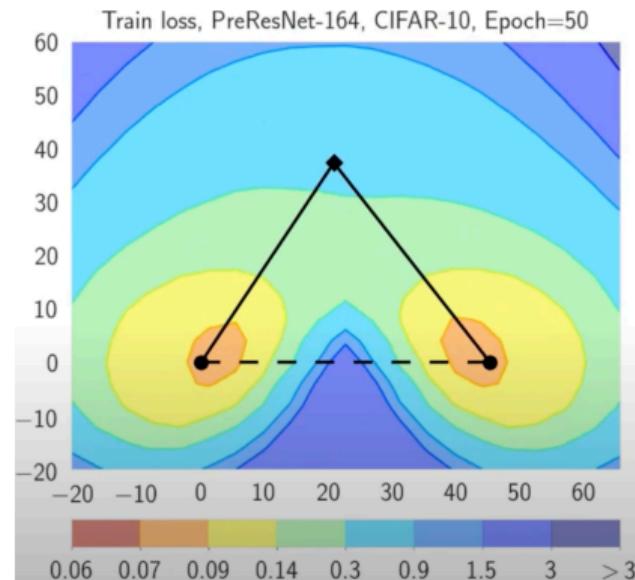
$$\hat{w}_1, \hat{w}_2 \in \mathbb{R}^{|\text{net}|}$$

- Определим параметрическую кривую:  
 $\phi_\theta(\cdot) : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}^{|\text{net}|}$

$$\phi_\theta(0) = \hat{w}_1, \quad \phi_\theta(1) = \hat{w}_2$$

$$\mathcal{L}(w)$$

$$\underset{\theta}{\text{minimize}} \quad \ell(\theta) = \int_0^1 \mathcal{L}(\phi_\theta(t)) dt = \mathbb{E}_{t \sim U(0,1)} \mathcal{L}(\phi_\theta(t))$$



## Процедура поиска кривой

- Веса предобученных сетей:

$$\hat{w}_1, \hat{w}_2 \in \mathbb{R}^{|\text{net}|}$$

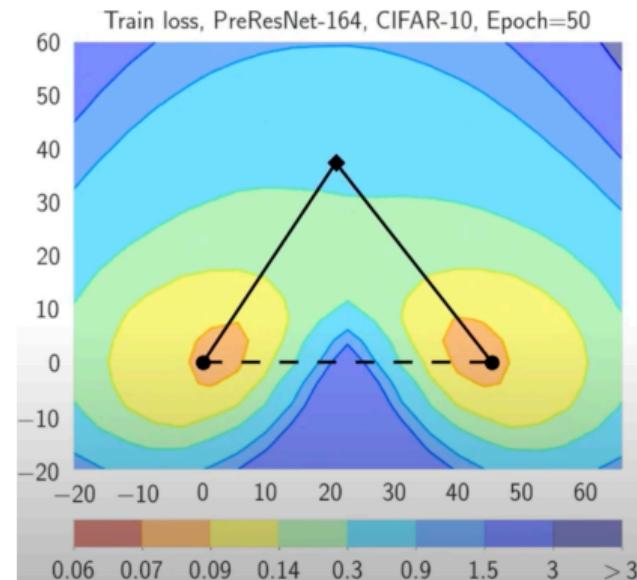
- Определим параметрическую кривую:  
 $\phi_\theta(\cdot) : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}^{|\text{net}|}$

$$\phi_\theta(0) = \hat{w}_1, \quad \phi_\theta(1) = \hat{w}_2$$

- Функция потерь DNN:

$$\mathcal{L}(w)$$

$$\underset{\theta}{\text{minimize}} \quad \ell(\theta) = \int_0^1 \mathcal{L}(\phi_\theta(t)) dt = \mathbb{E}_{t \sim U(0,1)} \mathcal{L}(\phi_\theta(t))$$



## Процедура поиска кривой

- Веса предобученных сетей:

$$\hat{w}_1, \hat{w}_2 \in \mathbb{R}^{|\text{net}|}$$

- Определим параметрическую кривую:  
 $\phi_\theta(\cdot) : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}^{|\text{net}|}$

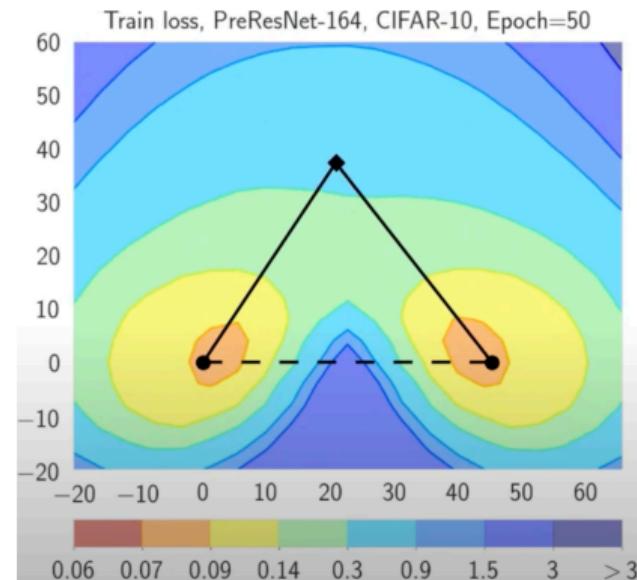
$$\phi_\theta(0) = \hat{w}_1, \quad \phi_\theta(1) = \hat{w}_2$$

- Функция потерь DNN:

$$\mathcal{L}(w)$$

- Минимизируем усредненную функцию потерь по  $\theta$ :

$$\underset{\theta}{\text{minimize}} \quad \ell(\theta) = \int_0^1 \mathcal{L}(\phi_\theta(t)) dt = \mathbb{E}_{t \sim U(0,1)} \mathcal{L}(\phi_\theta(t))$$



## Процедура поиска кривой

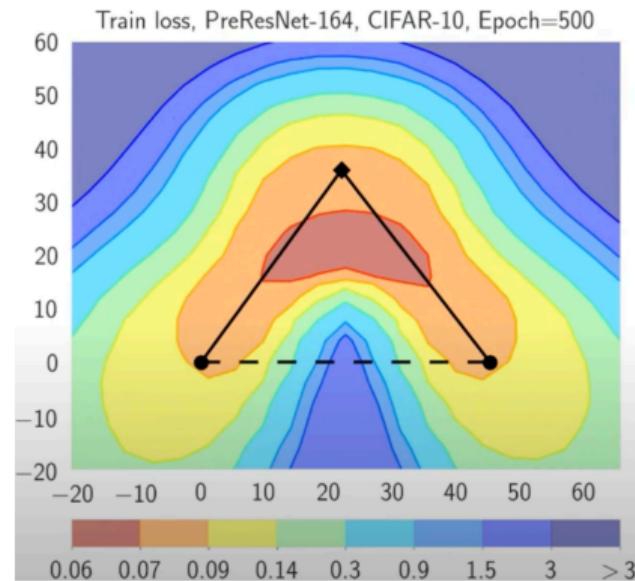
- Веса предобученных сетей:

$$\hat{w}_1, \hat{w}_2 \in \mathbb{R}^{|\text{net}|}$$

$$\phi_\theta(0) = \hat{w}_1, \quad \phi_\theta(1) = \hat{w}_2$$

$$\mathcal{L}(w)$$

$$\underset{\theta}{\text{minimize}} \quad \ell(\theta) = \int_0^1 \mathcal{L}(\phi_\theta(t)) dt = \mathbb{E}_{t \sim U(0,1)} \mathcal{L}(\phi_\theta(t))$$



## Процедура поиска кривой

- Веса предобученных сетей:

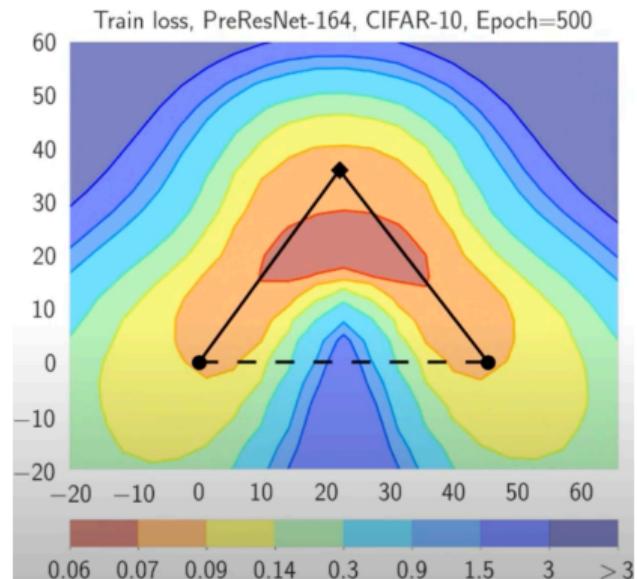
$$\hat{w}_1, \hat{w}_2 \in \mathbb{R}^{|\text{net}|}$$

- Определим параметрическую кривую:  
 $\phi_\theta(\cdot) : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}^{|\text{net}|}$

$$\phi_\theta(0) = \hat{w}_1, \quad \phi_\theta(1) = \hat{w}_2$$

$$\mathcal{L}(w)$$

$$\underset{\theta}{\text{minimize}} \quad \ell(\theta) = \int_0^1 \mathcal{L}(\phi_\theta(t)) dt = \mathbb{E}_{t \sim U(0,1)} \mathcal{L}(\phi_\theta(t))$$



## Процедура поиска кривой

- Веса предобученных сетей:

$$\hat{w}_1, \hat{w}_2 \in \mathbb{R}^{|\text{net}|}$$

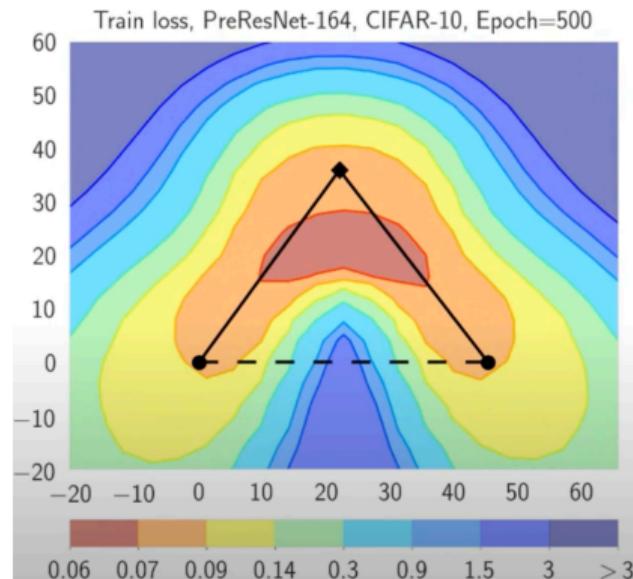
- Определим параметрическую кривую:  
 $\phi_\theta(\cdot) : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}^{|\text{net}|}$

$$\phi_\theta(0) = \hat{w}_1, \quad \phi_\theta(1) = \hat{w}_2$$

- Функция потерь DNN:

$$\mathcal{L}(w)$$

$$\underset{\theta}{\text{minimize}} \quad \ell(\theta) = \int_0^1 \mathcal{L}(\phi_\theta(t)) dt = \mathbb{E}_{t \sim U(0,1)} \mathcal{L}(\phi_\theta(t))$$



## Процедура поиска кривой

- Веса предобученных сетей:

$$\hat{w}_1, \hat{w}_2 \in \mathbb{R}^{|\text{net}|}$$

- Определим параметрическую кривую:  
 $\phi_\theta(\cdot) : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}^{|\text{net}|}$

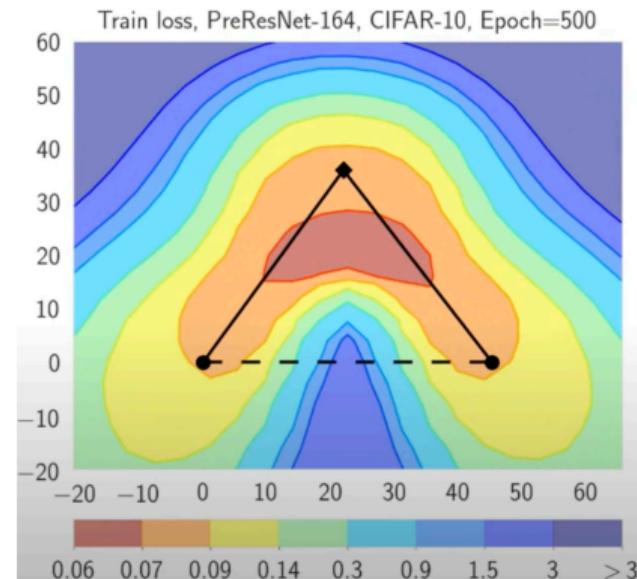
$$\phi_\theta(0) = \hat{w}_1, \quad \phi_\theta(1) = \hat{w}_2$$

- Функция потерь DNN:

$$\mathcal{L}(w)$$

- Минимизируем усредненную функцию потерь по  $\theta$ :

$$\underset{\theta}{\text{minimize}} \quad \ell(\theta) = \int_0^1 \mathcal{L}(\phi_\theta(t)) dt = \mathbb{E}_{t \sim U(0,1)} \mathcal{L}(\phi_\theta(t))$$



## Гроккинг (Grokking)

## Гроккинг (Grokking)<sup>9</sup>

- После достижения нулевой ошибки на обучении веса продолжают изменяться в манере, напоминающей случайное блуждание

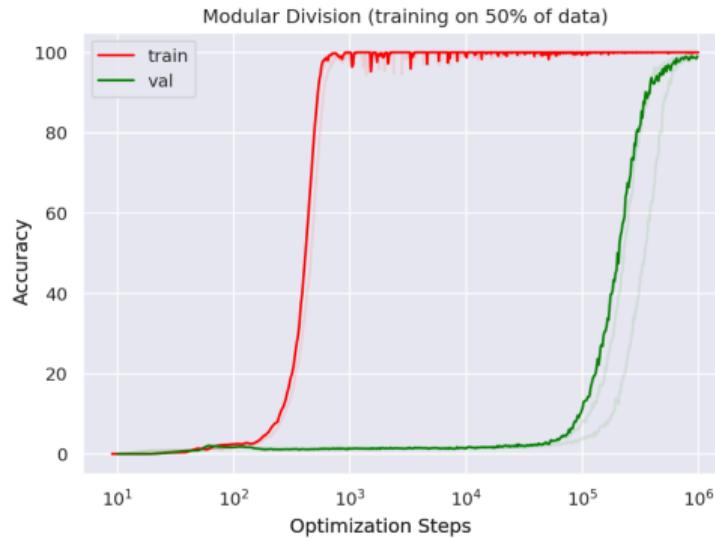


Рис. 10: Гроккинг: Яркий пример обобщения, наступающего намного позже переобучения на алгоритмическом наборе данных.

## Гроккинг (Grokking)<sup>9</sup>

- После достижения нулевой ошибки на обучении веса продолжают изменяться в манере, напоминающей случайное блуждание
- Возможно, они медленно дрейфуют к более широкому минимуму

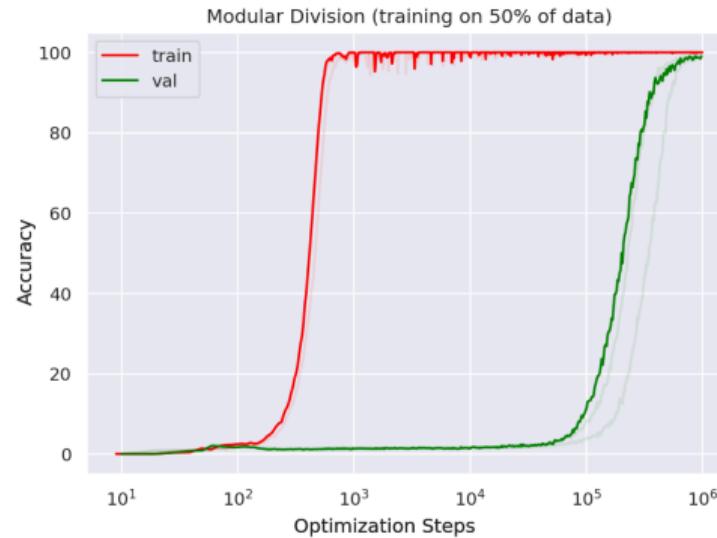


Рис. 10: Гроккинг: Яркий пример обобщения, наступающего намного позже переобучения на алгоритмическом наборе данных.

## Гроккинг (Grokking)<sup>9</sup>

- После достижения нулевой ошибки на обучении веса продолжают изменяться в манере, напоминающей случайное блуждание
- Возможно, они медленно дрейфуют к более широкому минимуму
- Недавно открытый эффект гроккинга подтверждает эту гипотезу

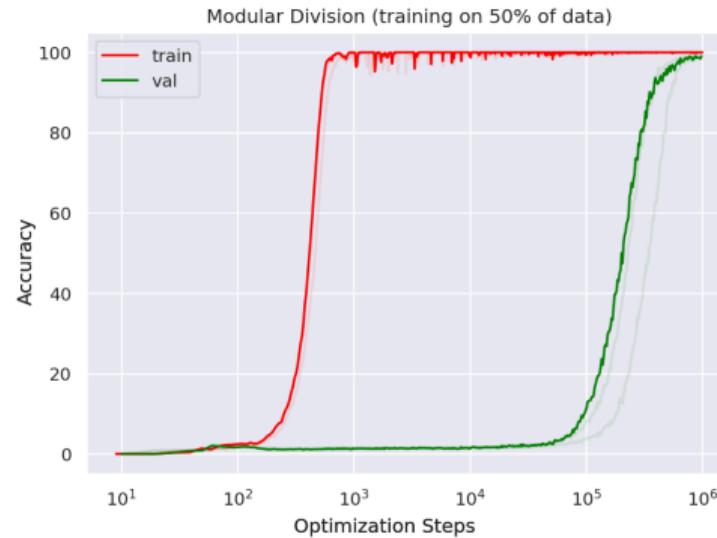


Рис. 10: Гроккинг: Яркий пример обобщения, наступающего намного позже переобучения на алгоритмическом наборе данных.

## Гроккинг (Grokking)<sup>9</sup>

- После достижения нулевой ошибки на обучении веса продолжают изменяться в манере, напоминающей случайное блуждание
- Возможно, они медленно дрейфуют к более широкому минимуму
- Недавно открытый эффект гроккинга подтверждает эту гипотезу
- Рекомендую посмотреть лекцию Дмитрия Ветрова **Удивительные свойства функции потерь в нейронной сети** (*Surprising properties of loss landscape in overparameterized models*). видео, Презентация

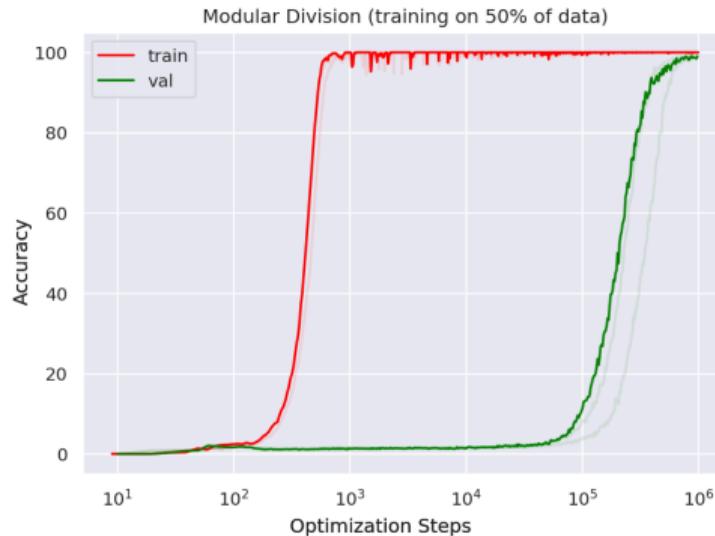


Рис. 10: Гроккинг: Яркий пример обобщения, наступающего намного позже переобучения на алгоритмическом наборе данных.

## Гроккинг (Grokking)<sup>9</sup>

- После достижения нулевой ошибки на обучении веса продолжают изменяться в манере, напоминающей случайное блуждание
- Возможно, они медленно дрейфуют к более широкому минимуму
- Недавно открытый эффект гроккинга подтверждает эту гипотезу
- Рекомендую посмотреть лекцию Дмитрия Ветрова **Удивительные свойства функции потерь в нейронной сети** (*Surprising properties of loss landscape in overparameterized models*). видео, Презентация
- Автор канала Свидетели Градиента собирает интересные наблюдения и эксперименты про гроккинг.

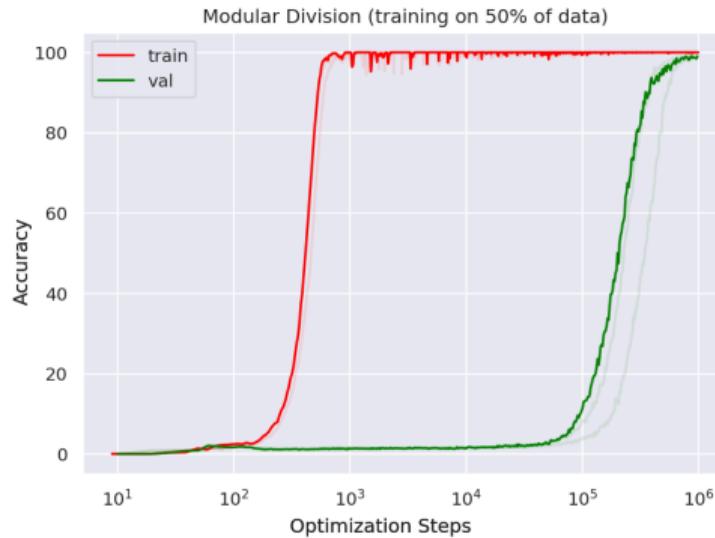


Рис. 10: Гроккинг: Яркий пример обобщения, наступающего намного позже переобучения на алгоритмическом наборе данных.

## Гроккинг (Grokking)<sup>9</sup>

- После достижения нулевой ошибки на обучении веса продолжают изменяться в манере, напоминающей случайное блуждание
- Возможно, они медленно дрейфуют к более широкому минимуму
- Недавно открытый эффект гроккинга подтверждает эту гипотезу
- Рекомендую посмотреть лекцию Дмитрия Ветрова **Удивительные свойства функции потерь в нейронной сети (Surprising properties of loss landscape in overparameterized models)**.  
▶ видео, 📄 Презентация
- Автор ↗ канала Свидетели Градиента собирает интересные наблюдения и эксперименты про гроккинг.
- Также есть ▶ видео с его докладом  
**Чем не является гроккинг.**

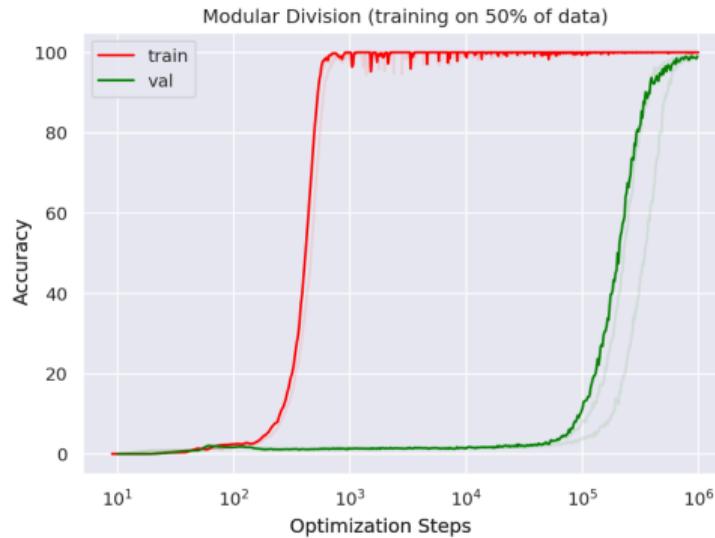


Рис. 10: Гроккинг: Яркий пример обобщения, наступающего намного позже переобучения на алгоритмическом наборе данных.

<sup>9</sup>Power, Alethea, et al. "Grokking: Generalization beyond overfitting on small algorithmic datasets." (2022).

## Двойной спуск (Double Descent)

# Двойной спуск (Double Descent)<sup>10</sup>

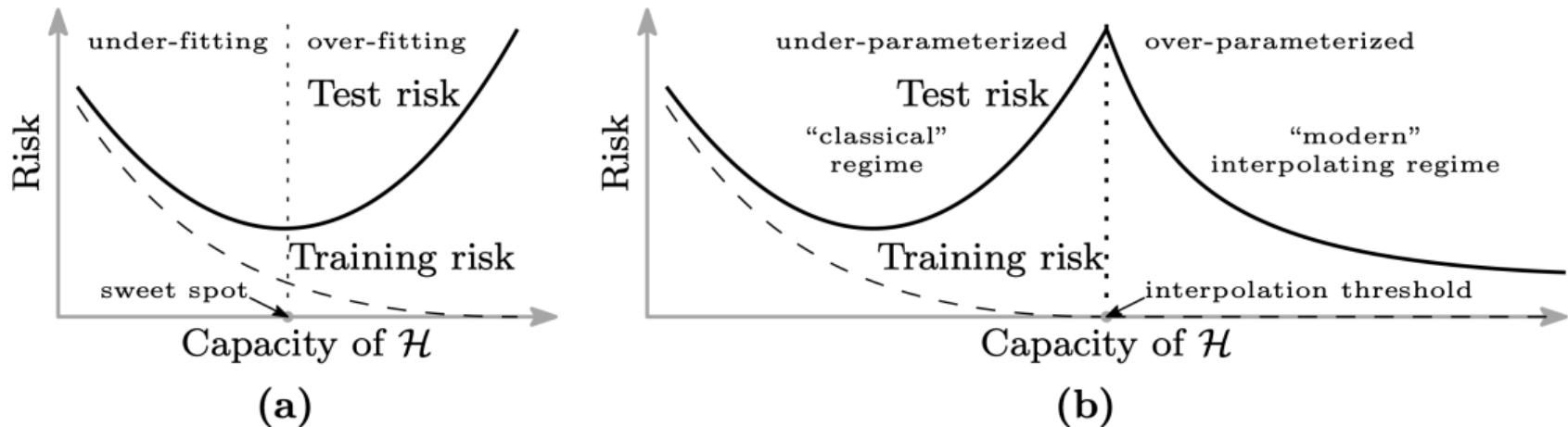
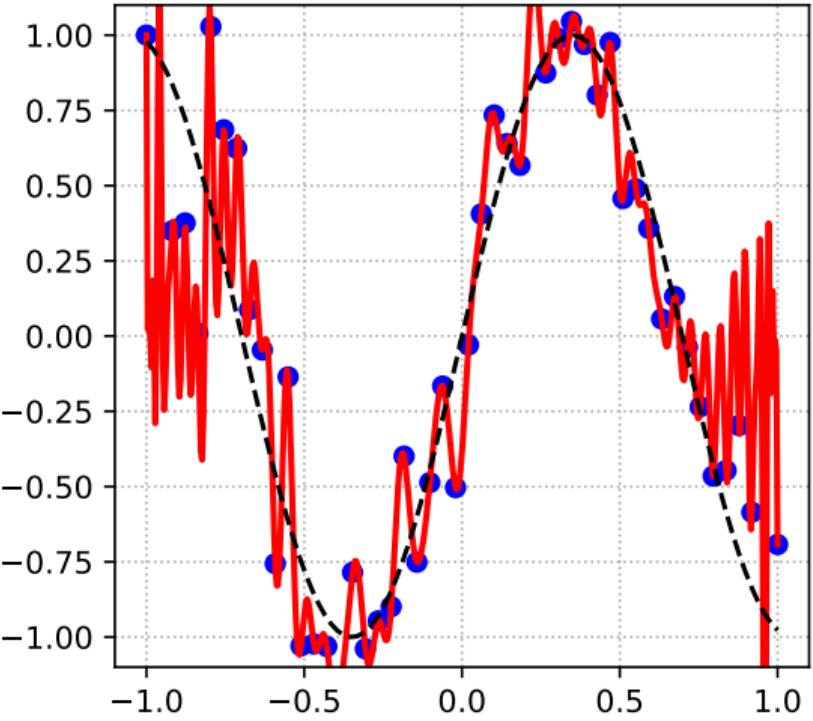


Рис. 11: Кривые риска обучения (пунктирная линия) и тестового риска (сплошная линия). (а) Классическая U-образная кривая риска, возникающая из компромисса смещения и дисперсии (bias-variance trade-off). (б) Кривая риска двойного спуска, которая объединяет U-образную кривую риска (т.е. «классический» режим) с наблюдаемым поведением на моделях высокой размерности (т.е. «современный» интерполяционный режим), разделенных порогом интерполяции. Предикторы справа от порога интерполяции имеют нулевой риск обучения.

<sup>10</sup>Belkin, Mikhail, et al. "Reconciling modern machine-learning practice and the classical bias–variance trade-off." (2019)

# Двойной спуск (Double Descent)

Polynomial Fitting



@fminxyz

