

Стохастический градиентный спуск. Адаптивные методы. Оптимизация нейронных сетей

МЕТОДЫ ВЫПУКЛОЙ ОПТИМИЗАЦИИ

НЕДЕЛЯ 13

Даня Меркулов



Даня Меркулов, Петр Остроухов

Оптимизация для всех! ЦУ



Задача с конечной суммой

Задача с конечной суммой

Рассмотрим классическую задачу минимизации среднего по 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:

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

- Сходимость с постоянным α или поиском по линии.

Задача с конечной суммой

Рассмотрим классическую задачу минимизации среднего по 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:

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

- Сходимость с постоянным α или поиском по линии.
- Стоимость итерации линейна по n . Для ImageNet $n \approx 1.4 \cdot 10^7$, для WikiText $n \approx 10^8$. Для FineWeb $n \approx 15 \cdot 10^{12}$ токенов.

Задача с конечной суммой

Рассмотрим классическую задачу минимизации среднего по 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:

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

- Сходимость с постоянным α или поиском по линии.
- Стоимость итерации линейна по n . Для ImageNet $n \approx 1.4 \cdot 10^7$, для WikiText $n \approx 10^8$. Для FineWeb $n \approx 15 \cdot 10^{12}$ токенов.

Задача с конечной суммой

Рассмотрим классическую задачу минимизации среднего по 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:

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

- Сходимость с постоянным α или поиском по линии.
- Стоимость итерации линейна по n . Для ImageNet $n \approx 1.4 \cdot 10^7$, для WikiText $n \approx 10^8$. Для FineWeb $n \approx 15 \cdot 10^{12}$ токенов.

Давайте перейдем от полного вычисления градиента к его несмешенной оценке, когда мы случайным образом выбираем индекс i_k точки на каждой итерации равномерно:

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

С $p(i_k = i) = \frac{1}{n}$, стохастический градиент является несмешенной оценкой градиента, которая задается следующим образом:

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

Это означает, что математическое ожидание стохастического градиента равно фактическому градиенту $f(x)$.

Результаты для градиентного спуска

Стохастические итерации в n раз быстрее, но сколько итераций потребуется для достижения заданной точности?

Если ∇f является липшицевым, то мы получаем:

| Предположение | Детерминированный градиентный спуск | Стохастический градиентный спуск |
|---------------|-------------------------------------|----------------------------------|
| PL | $\mathcal{O}(\log(1/\varepsilon))$ | |
| Выпуклый | $\mathcal{O}(1/\varepsilon)$ | |
| Невыпуклый | $\mathcal{O}(1/\varepsilon)$ | |

Результаты для градиентного спуска

Стохастические итерации в n раз быстрее, но сколько итераций потребуется для достижения заданной точности?

Если ∇f является липшицевым, то мы получаем:

| Предположение | Детерминированный градиентный спуск | Стохастический градиентный спуск |
|---------------|-------------------------------------|----------------------------------|
| PL | $\mathcal{O}(\log(1/\varepsilon))$ | $\mathcal{O}(1/\varepsilon)$ |
| Выпуклый | $\mathcal{O}(1/\varepsilon)$ | $\mathcal{O}(1/\varepsilon^2)$ |
| Невыпуклый | $\mathcal{O}(1/\varepsilon)$ | $\mathcal{O}(1/\varepsilon^2)$ |

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

Результаты для градиентного спуска

Стохастические итерации в n раз быстрее, но сколько итераций потребуется для достижения заданной точности?

Если ∇f является липшицевым, то мы получаем:

| Предположение | Детерминированный градиентный спуск | Стохастический градиентный спуск |
|---------------|-------------------------------------|----------------------------------|
| PL | $\mathcal{O}(\log(1/\varepsilon))$ | $\mathcal{O}(1/\varepsilon)$ |
| Выпуклый | $\mathcal{O}(1/\varepsilon)$ | $\mathcal{O}(1/\varepsilon^2)$ |
| Невыпуклый | $\mathcal{O}(1/\varepsilon)$ | $\mathcal{O}(1/\varepsilon^2)$ |

- Стохастический градиентный спуск 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 потребуется для достижения заданной точности?

Если ∇f является липшицевым, то мы получаем:

| Предположение | Детерминированный градиентный спуск | Стохастический градиентный спуск |
|---------------|-------------------------------------|----------------------------------|
| PL | $\mathcal{O}(\log(1/\varepsilon))$ | $\mathcal{O}(1/\varepsilon)$ |
| Выпуклый | $\mathcal{O}(1/\varepsilon)$ | $\mathcal{O}(1/\varepsilon^2)$ |
| Невыпуклый | $\mathcal{O}(1/\varepsilon)$ | $\mathcal{O}(1/\varepsilon^2)$ |

- Стохастический градиентный спуск имеет низкую стоимость итерации, но медленную скорость сходимости.
 - Сублинейная скорость даже в сильно выпуклом случае.
 - Оценки скорости не могут быть улучшены при стандартных предположениях.

Результаты для градиентного спуска

Стохастические итерации в n раз быстрее, но сколько итераций потребуется для достижения заданной точности?

Если ∇f является липшицевым, то мы получаем:

| Предположение | Детерминированный градиентный спуск | Стохастический градиентный спуск |
|---------------|-------------------------------------|----------------------------------|
| PL | $\mathcal{O}(\log(1/\varepsilon))$ | $\mathcal{O}(1/\varepsilon)$ |
| Выпуклый | $\mathcal{O}(1/\varepsilon)$ | $\mathcal{O}(1/\varepsilon^2)$ |
| Невыпуклый | $\mathcal{O}(1/\varepsilon)$ | $\mathcal{O}(1/\varepsilon^2)$ |

- Стохастический градиентный спуск имеет низкую стоимость итерации, но медленную скорость сходимости.
 - Сублинейная скорость даже в сильно выпуклом случае.
 - Оценки скорости не могут быть улучшены при стандартных предположениях.
 - Оракул возвращает несмешенную аппроксимацию градиента с ограниченной дисперсией.

Результаты для градиентного спуска

Стохастические итерации в n раз быстрее, но сколько итераций потребуется для достижения заданной точности?

Если ∇f является липшицевым, то мы получаем:

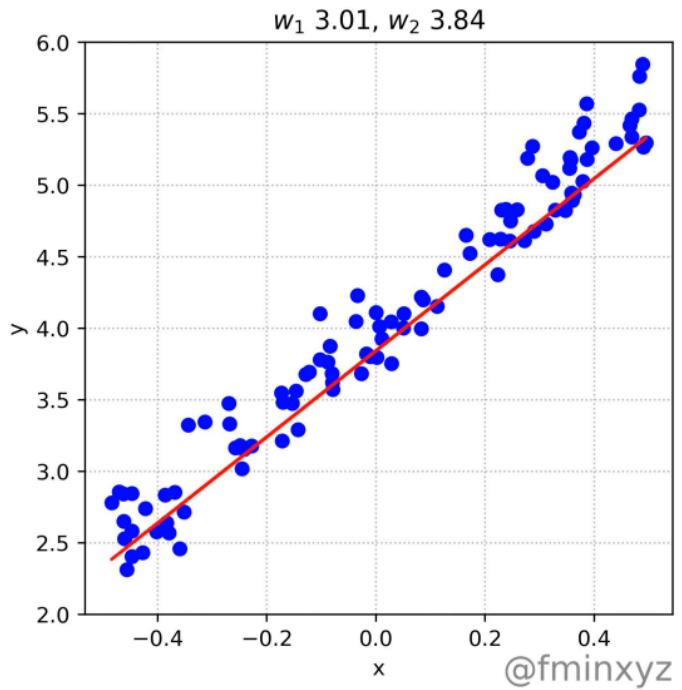
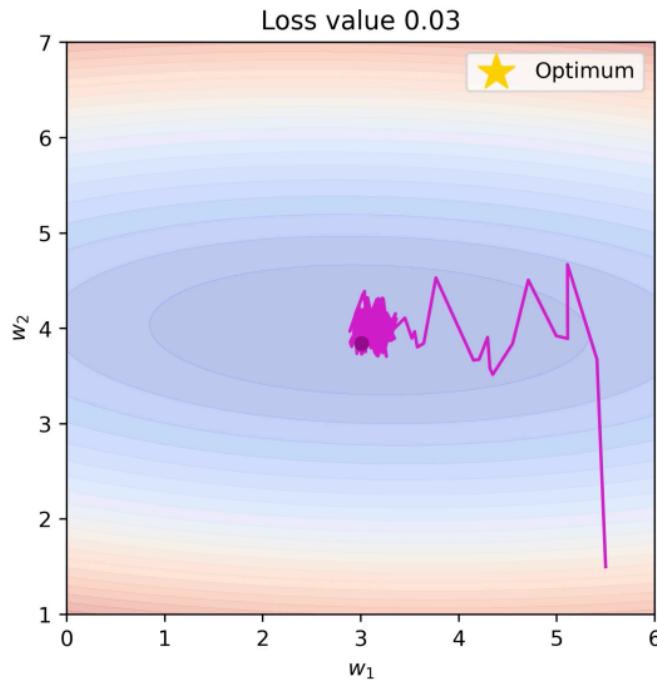
| Предположение | Детерминированный градиентный спуск | Стохастический градиентный спуск |
|---------------|-------------------------------------|----------------------------------|
| PL | $\mathcal{O}(\log(1/\varepsilon))$ | $\mathcal{O}(1/\varepsilon)$ |
| Выпуклый | $\mathcal{O}(1/\varepsilon)$ | $\mathcal{O}(1/\varepsilon^2)$ |
| Невыпуклый | $\mathcal{O}(1/\varepsilon)$ | $\mathcal{O}(1/\varepsilon^2)$ |

- Стохастический градиентный спуск имеет низкую стоимость итерации, но медленную скорость сходимости.
 - Сублинейная скорость даже в сильно выпуклом случае.
 - Оценки скорости не могут быть улучшены при стандартных предположениях.
 - Оракул возвращает несмешенную аппроксимацию градиента с ограниченной дисперсией.
- Методы с моментом и квази-Ньютоновские методы не улучшают скорость в стохастическом случае, а только могут улучшить константные множители (быть линейным горлышко — дисперсия, а не число обусловленности).

Стохастический градиентный спуск (SGD)

Типичное поведение

Stochastic Gradient Descent. Batch = 2



Гладкий PL-случай с постоянным шагом

- i** Пусть f — L -гладкая функция, удовлетворяющая условию Поляка-Лоясиевича (PL) с константой $\mu > 0$, а дисперсия стохастического градиента ограничена: $\mathbb{E}[\|\nabla f_i(x_k)\|^2] \leq \sigma^2$. Тогда стохастический градиентный спуск с постоянным шагом $\alpha < \frac{1}{2\mu}$ гарантирует

$$\mathbb{E}[f(x_k) - f^*] \leq (1 - 2\alpha\mu)^k [f(x_0) - f^*] + \frac{L\sigma^2\alpha}{4\mu}.$$

Гладкий выпуклый случай

Вспомогательные обозначения

Для (возможно) неконстантной последовательности шагов $(\alpha_t)_{t \geq 0}$ определим *взвешенное среднее*

$$\bar{x}_k \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{\sum_{t=0}^{k-1} \alpha_t} \sum_{t=0}^{k-1} \alpha_t x_t, \quad k \geq 1.$$

Везде ниже $f^* \equiv \min_x f(x)$ и $x^* \in \arg \min_x f(x)$.

Гладкий выпуклый случай с постоянным шагом

- i** Пусть f — выпуклая функция (не обязательно гладкая), а дисперсия стохастического градиента ограничена $\mathbb{E}[\|\nabla f_{i_k}(x_k)\|^2] \leq \sigma^2 \forall k$. Если SGD использует постоянный шаг $\alpha_t \equiv \alpha > 0$, то для любого $k \geq 1$

$$\mathbb{E}[f(\bar{x}_k) - f^*] \leq \frac{\|x_0 - x^*\|^2}{2\alpha k} + \frac{\alpha \sigma^2}{2}$$

где $\bar{x}_k = \frac{1}{k} \sum_{t=0}^{k-1} x_t$.

При выборе постоянного $\alpha = \frac{\|x_0 - x^*\|}{\sigma\sqrt{k}}$ (зависящего от k) имеем

$$\mathbb{E}[f(\bar{x}_k) - f^*] \leq \frac{\|x_0 - x^*\|\sigma}{\sqrt{k}} = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\sqrt{k}}\right).$$

Гладкий выпуклый случай с убывающим шагом

$$\alpha_k = \frac{\alpha_0}{\sqrt{k+1}}, \quad 0 < \alpha_0 \leq \frac{1}{4L}$$

i При тех же предположениях, но с убывающим шагом $\alpha_k = \frac{\alpha_0}{\sqrt{k+1}}$

$$\boxed{\mathbb{E}[f(\bar{x}_k) - f^*] \leq \frac{5\|x_0 - x^*\|^2}{4\alpha_0\sqrt{k}} + 5\alpha_0\sigma^2 \frac{\log(k+1)}{\sqrt{k}}} = \mathcal{O}\left(\frac{\log k}{\sqrt{k}}\right).$$



Мини-батч SGD

Мини-батч SGD

Подход 1: контролировать размер выборки

Детерминированный метод использует все n градиентов:

$$\nabla f(x_k) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \nabla f_i(x_k).$$

Стохастический метод аппроксимирует это, используя только 1 элемент:

$$\nabla f_{ik}(x_k) \approx \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \nabla f_i(x_k).$$

Распространнёный вариант — использовать выборку элементов B_k ("мини-батч"):

$$\frac{1}{|B_k|} \sum_{i \in B_k} \nabla f_i(x_k) \approx \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \nabla f_i(x_k),$$

особенно полезно для векторизации и параллелизации.

Например, с 16 ядрами установите $|B_k| = 16$ и вычислите 16 градиентов одновременно.

Мини-батч как градиентный спуск с ошибкой

Метод SG с выборкой B_k ("мини-батч") использует итерации:

$$x_{k+1} = x_k - \alpha_k \left(\frac{1}{|B_k|} \sum_{i \in B_k} \nabla f_i(x_k) \right).$$

Посмотрим на это как на "градиентный метод с ошибкой":

$$x_{k+1} = x_k - \alpha_k (\nabla f(x_k) + e_k),$$

где e_k — разница между аппроксимированным и истинным градиентом.

Если вы используете $\alpha_k = \frac{1}{L}$, то используя лемму о спуске, этот алгоритм имеет:

$$f(x_{k+1}) \leq f(x_k) - \frac{1}{2L} \|\nabla f(x_k)\|^2 + \frac{1}{2L} \|e_k\|^2,$$

для любой ошибки e_k .

Влияние ошибки на скорость сходимости

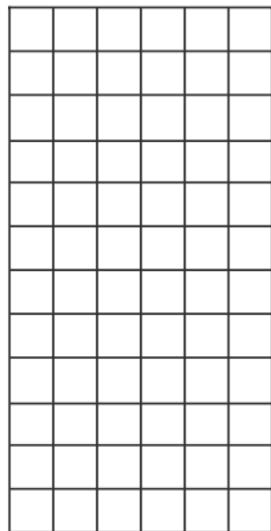
Оценка прогресса с $\alpha_k = \frac{1}{L}$ и ошибкой в градиенте e_k выглядит следующим образом:

$$f(x_{k+1}) \leq f(x_k) - \frac{1}{2L} \|\nabla f(x_k)\|^2 + \frac{1}{2L} \|e_k\|^2.$$

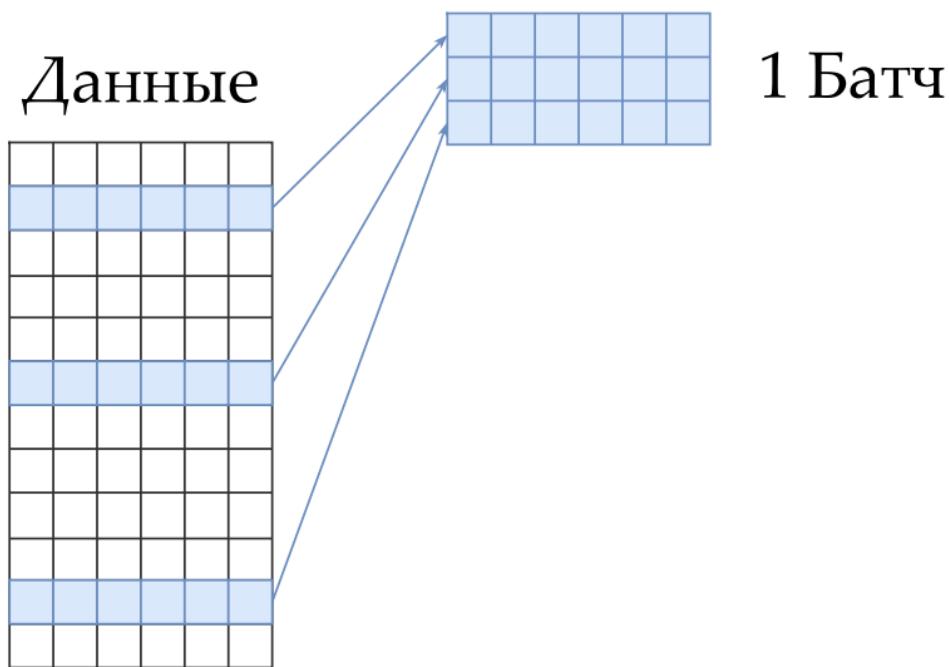
Идея SGD и батчей



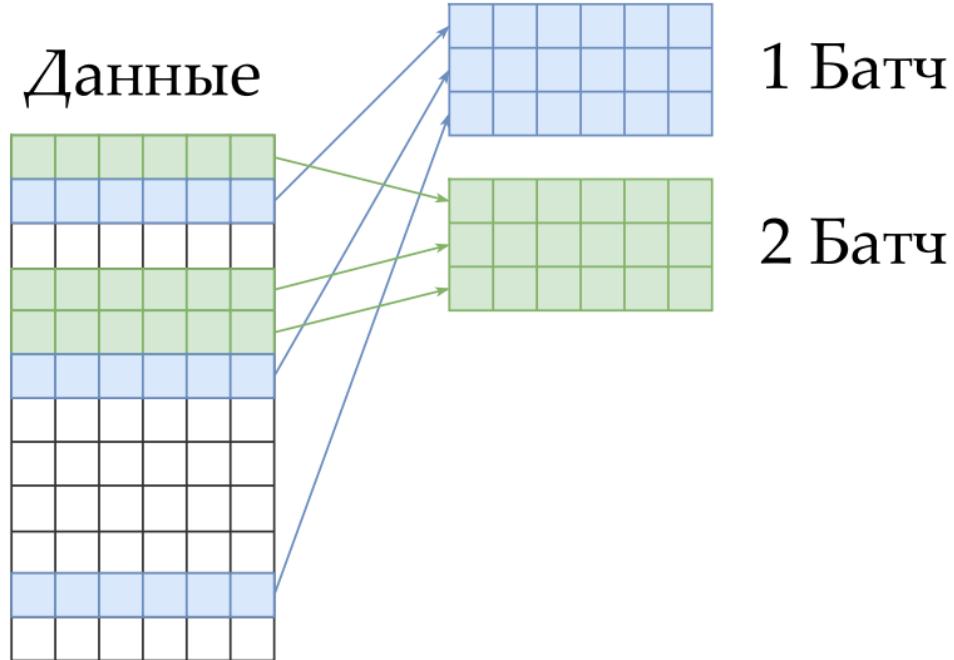
Данные



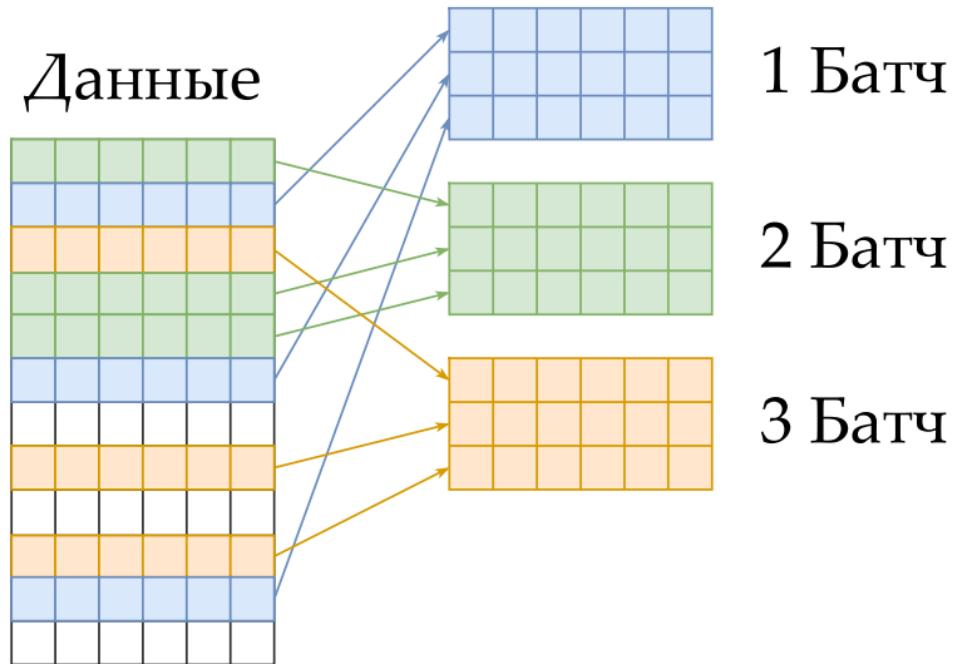
Идея SGD и батчей



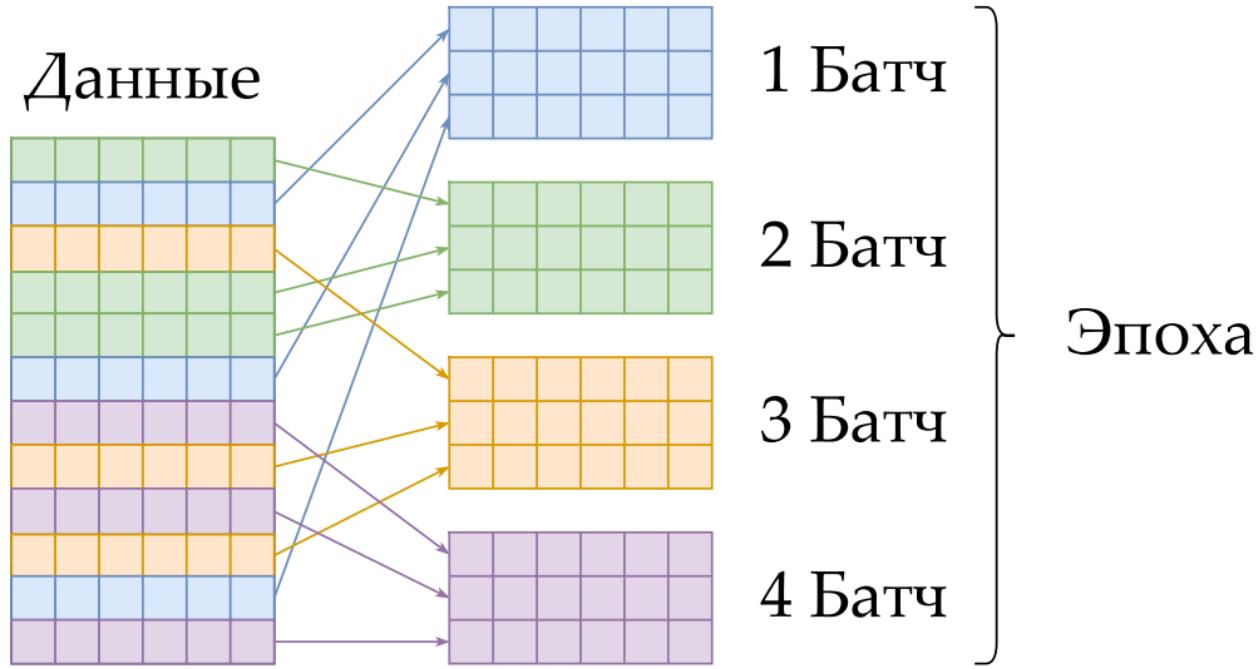
Идея SGD и батчей



Идея SGD и батчей



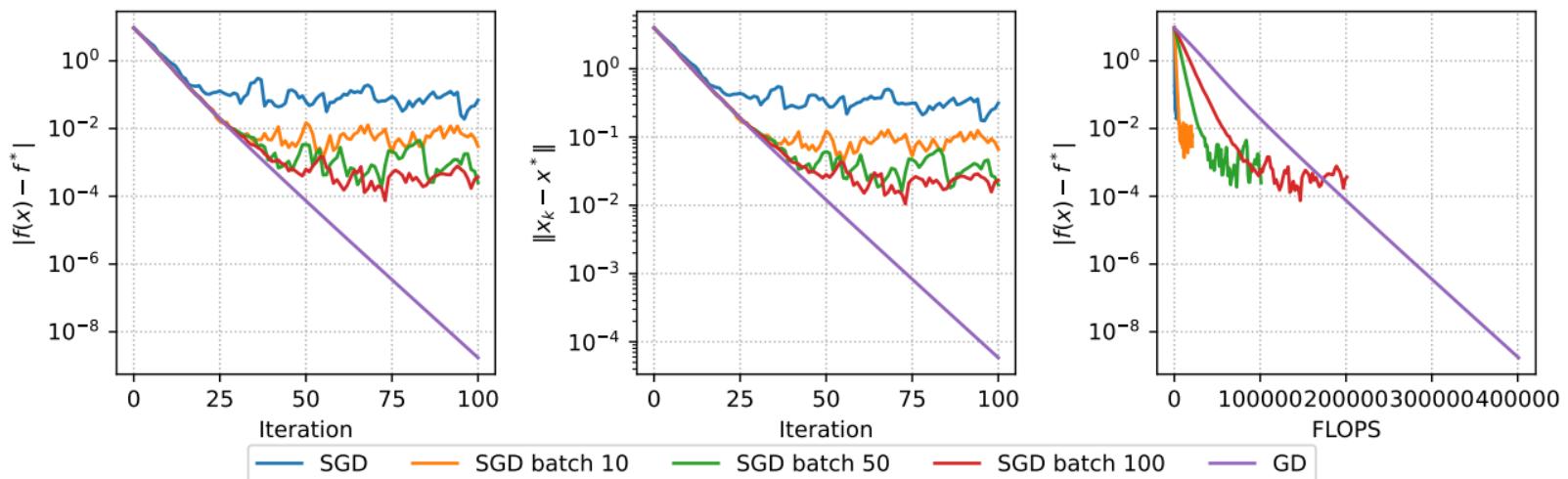
Идея SGD и батчей



Основная проблема SGD

$$f(x) = \frac{\mu}{2} \|x\|_2^2 + \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \log(1 + \exp(-y_i \langle a_i, x \rangle)) \rightarrow \min_{x \in \mathbb{R}^n}$$

Strongly convex binary logistic regression. m=200, n=10, mu=1.



Основные результаты сходимости SGD

- Пусть f - L -гладкая μ -сильно выпуклая функция, а дисперсия стохастического градиента конечна ($\mathbb{E}[\|\nabla f_i(x_k)\|^2] \leq \sigma^2$). Тогда траектория стохастического градиентного спуска с постоянным шагом $\alpha < \frac{1}{2\mu}$ будет гарантировать:

$$\mathbb{E}[f(x_{k+1}) - f^*] \leq (1 - 2\alpha\mu)^k [f(x_0) - f^*] + \frac{L\sigma^2\alpha}{4\mu}.$$

Основные результаты сходимости SGD

- i** Пусть f - L -гладкая μ -сильно выпуклая функция, а дисперсия стохастического градиента конечна ($\mathbb{E}[\|\nabla f_i(x_k)\|^2] \leq \sigma^2$). Тогда траектория стохастического градиентного спуска с постоянным шагом $\alpha < \frac{1}{2\mu}$ будет гарантировать:

$$\mathbb{E}[f(x_{k+1}) - f^*] \leq (1 - 2\alpha\mu)^k [f(x_0) - f^*] + \frac{L\sigma^2\alpha}{4\mu}.$$

- i** Пусть f - L -гладкая μ -сильно выпуклая функция, а дисперсия стохастического градиента конечна ($\mathbb{E}[\|\nabla f_i(x_k)\|^2] \leq \sigma^2$). Тогда стохастический градиентный шум с уменьшающимся шагом $\alpha_k = \frac{2k+1}{2\mu(k+1)^2}$ будет сходиться сублинейно:

$$\mathbb{E}[f(x_{k+1}) - f^*] \leq \frac{L\sigma^2}{2\mu^2(k+1)}$$

Summary

- SGD с постоянным шагом не сходится даже для PL (сильно выпуклого) случая

Summary

- SGD с постоянным шагом не сходится даже для PL (сильно выпуклого) случая
- SGD достигает сублинейной сходимости с скоростью $\mathcal{O}\left(\frac{1}{k}\right)$ для PL-случая.

Summary

- SGD с постоянным шагом не сходится даже для PL (сильно выпуклого) случая
- SGD достигает сублинейной сходимости с скоростью $\mathcal{O}\left(\frac{1}{k}\right)$ для PL-случая.
- Ускорения Нестерова/Поляка не улучшают скорость сходимости

Summary

- SGD с постоянным шагом не сходится даже для PL (сильно выпуклого) случая
- SGD достигает сублинейной сходимости с скоростью $\mathcal{O}\left(\frac{1}{k}\right)$ для PL-случая.
- Ускорения Нестерова/Поляка не улучшают скорость сходимости
- Двухфазный Ньютоновский метод достигает $\mathcal{O}\left(\frac{1}{k}\right)$ без сильной выпуклости.

Адаптивность или масштабирование

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

Очень популярный адаптивный метод. Пусть $g^{(k)} = \nabla f_{i_k}(x^{(k-1)})$, правило обновления 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 шага обучения: $\alpha > 0$ — фиксированная константа, и скорость обучения естественно уменьшается по итерациям.

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

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

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

Заметки:

- AdaGrad не требует настройки шага обучения: $\alpha > 0$ — фиксированная константа, и скорость обучения естественно уменьшается по итерациям.
- Шаг обучения для редких информативных признаков убывает медленно.

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

Очень популярный адаптивный метод. Пусть $g^{(k)} = \nabla f_{i_k}(x^{(k-1)})$, правило обновления 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 шага обучения: $\alpha > 0$ — фиксированная константа, и скорость обучения естественно уменьшается по итерациям.
- Шаг обучения для редких информативных признаков убывает медленно.
- Может существенно превосходить SGD на разреженных задачах.

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

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

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

Заметки:

- AdaGrad не требует настройки шага обучения: $\alpha > 0$ — фиксированная константа, и скорость обучения естественно уменьшается по итерациям.
- Шаг обучения для редких информативных признаков убывает медленно.
- Может существенно превосходить SGD на разреженных задачах.
- Основной недостаток — монотонное накопление градиентов в знаменателе. AdaDelta, Adam, AMSGrad и др. улучшают это, популярны в обучении глубоких нейронных сетей.

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

Очень популярный адаптивный метод. Пусть $g^{(k)} = \nabla f_{i_k}(x^{(k-1)})$, правило обновления 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 шага обучения: $\alpha > 0$ — фиксированная константа, и скорость обучения естественно уменьшается по итерациям.
- Шаг обучения для редких информативных признаков убывает медленно.
- Может существенно превосходить SGD на разреженных задачах.
- Основной недостаток — монотонное накопление градиентов в знаменателе. AdaDelta, Adam, AMSGrad и др. улучшают это, популярны в обучении глубоких нейронных сетей.
- Константа ϵ обычно устанавливается в 10^{-6} для обеспечения отсутствия деления на ноль или слишком больших шагов.

RMSProp (Tieleman and Hinton, 2012)

Улучшение AdaGrad, которое устраняет его агрессивный, монотонно убывающий шаг обучения. Использует скользящее среднее квадратов градиентов для настройки шага обучения для каждого веса. Пусть $g^{(k)} = \nabla f_{i_k}(x^{(k-1)})$ и правило обновления для $j = 1, \dots, p$:

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

Заметки:

- RMSProp делит шаг обучения для веса на скользящее среднее величин недавних градиентов для этого веса.

RMSProp (Tieleman and Hinton, 2012)

Улучшение AdaGrad, которое устраняет его агрессивный, монотонно убывающий шаг обучения. Использует скользящее среднее квадратов градиентов для настройки шага обучения для каждого веса. Пусть $g^{(k)} = \nabla f_{i_k}(x^{(k-1)})$ и правило обновления для $j = 1, \dots, p$:

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

Заметки:

- RMSProp делит шаг обучения для веса на скользящее среднее величин недавних градиентов для этого веса.
- Обеспечивает более тонкую настройку шагов обучения, чем AdaGrad, что делает его подходящим для нестационарных задач.

RMSProp (Tieleman and Hinton, 2012)

Улучшение AdaGrad, которое устраняет его агрессивный, монотонно убывающий шаг обучения. Использует скользящее среднее квадратов градиентов для настройки шага обучения для каждого веса. Пусть $g^{(k)} = \nabla f_{i_k}(x^{(k-1)})$ и правило обновления для $j = 1, \dots, p$:

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

Заметки:

- RMSProp делит шаг обучения для веса на скользящее среднее величин недавних градиентов для этого веса.
- Обеспечивает более тонкую настройку шагов обучения, чем AdaGrad, что делает его подходящим для нестационарных задач.
- Широко используется при обучении нейронных сетей, особенно рекуррентных.

Adam (Kingma and Ba, 2014)



Объединяет элементы из AdaGrad и RMSProp. Учитывает экспоненциально убывающее среднее прошлых градиентов и квадратов градиентов.

EMA:

$$\begin{aligned}m_j^{(k)} &= \beta_1 m_j^{(k-1)} + (1 - \beta_1) g_j^{(k)} \\v_j^{(k)} &= \beta_2 v_j^{(k-1)} + (1 - \beta_2) (g_j^{(k)})^2\end{aligned}$$

Коррекция 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:

- Компенсирует смещение к нулю в начальных моментах, наблюдаемое в других методах (например, RMSProp), что делает оценки более точными.

Adam (Kingma and Ba, 2014) ¹²



Объединяет элементы из AdaGrad и RMSProp. Учитывает экспоненциально убывающее среднее прошлых градиентов и квадратов градиентов.

EMA:

$$\begin{aligned}m_j^{(k)} &= \beta_1 m_j^{(k-1)} + (1 - \beta_1) g_j^{(k)} \\v_j^{(k)} &= \beta_2 v_j^{(k-1)} + (1 - \beta_2) (g_j^{(k)})^2\end{aligned}$$

Коррекция 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:

- Компенсирует смещение к нулю в начальных моментах, наблюдаемое в других методах (например, RMSProp), что делает оценки более точными.
- Одна из самых цитируемых научных работ в мире.

Adam (Kingma and Ba, 2014) 12



Объединяет элементы из AdaGrad и RMSProp. Учитывает экспоненциально убывающее среднее прошлых градиентов и квадратов градиентов.

EMA:

$$\begin{aligned}m_j^{(k)} &= \beta_1 m_j^{(k-1)} + (1 - \beta_1) g_j^{(k)} \\v_j^{(k)} &= \beta_2 v_j^{(k-1)} + (1 - \beta_2) (g_j^{(k)})^2\end{aligned}$$

Коррекция 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:

- Компенсирует смещение к нулю в начальных моментах, наблюдаемое в других методах (например, RMSProp), что делает оценки более точными.
- Одна из самых цитируемых научных работ в мире.
- В 2018-2019 годах вышли статьи, указывающие на ошибку в оригинальной статье

Adam (Kingma and Ba, 2014) 12



Объединяет элементы из AdaGrad и RMSProp. Учитывает экспоненциально убывающее среднее прошлых градиентов и квадратов градиентов.

EMA:

$$\begin{aligned}m_j^{(k)} &= \beta_1 m_j^{(k-1)} + (1 - \beta_1) g_j^{(k)} \\v_j^{(k)} &= \beta_2 v_j^{(k-1)} + (1 - \beta_2) (g_j^{(k)})^2\end{aligned}$$

Коррекция 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:

- Компенсирует смещение к нулю в начальных моментах, наблюдаемое в других методах (например, RMSProp), что делает оценки более точными.
- Одна из самых цитируемых научных работ в мире.
- В 2018-2019 годах вышли статьи, указывающие на ошибку в оригинальной статье
- Не сходится для некоторых простых задач (даже выпуклых)

Adam (Kingma and Ba, 2014)



12

Объединяет элементы из AdaGrad и RMSProp. Учитывает экспоненциально убывающее среднее прошлых градиентов и квадратов градиентов.

EMA:

$$\begin{aligned}m_j^{(k)} &= \beta_1 m_j^{(k-1)} + (1 - \beta_1) g_j^{(k)} \\v_j^{(k)} &= \beta_2 v_j^{(k-1)} + (1 - \beta_2) (g_j^{(k)})^2\end{aligned}$$

Коррекция 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:

- Компенсирует смещение к нулю в начальных моментах, наблюдаемое в других методах (например, RMSProp), что делает оценки более точными.
- Одна из самых цитируемых научных работ в мире.
- В 2018-2019 годах вышли статьи, указывающие на ошибку в оригинальной статье
- Не сходится для некоторых простых задач (даже выпуклых)
- Почему-то очень хорошо работает для некоторых сложных задач

Adam (Kingma and Ba, 2014)¹²



Объединяет элементы из AdaGrad и RMSProp. Учитывает экспоненциально убывающее среднее прошлых градиентов и квадратов градиентов.

EMA:

$$\begin{aligned}m_j^{(k)} &= \beta_1 m_j^{(k-1)} + (1 - \beta_1) g_j^{(k)} \\v_j^{(k)} &= \beta_2 v_j^{(k-1)} + (1 - \beta_2) (g_j^{(k)})^2\end{aligned}$$

Коррекция 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:

- Компенсирует смещение к нулю в начальных моментах, наблюдаемое в других методах (например, RMSProp), что делает оценки более точными.
- Одна из самых цитируемых научных работ в мире.
- В 2018-2019 годах вышли статьи, указывающие на ошибку в оригинальной статье
- Не сходится для некоторых простых задач (даже выпуклых)
- Почему-то очень хорошо работает для некоторых сложных задач
- Гораздо лучше работает для языковых моделей, чем для задач компьютерного зрения - почему?

¹Adam: A Method for Stochastic Optimization

²On the Convergence of Adam and Beyond

AdamW (Loshchilov & Hutter, 2017)

Устраняет распространенную проблему с ℓ_2 -регуляризацией в адаптивных оптимизаторах, таких как Adam. Стандартная ℓ_2 -регуляризация добавляет $\lambda \|x\|^2$ к функции потерь, что приводит к градиентному слагаемому λx . В Adam это слагаемое масштабируется адаптивным шагом обучения $(\sqrt{\hat{v}_j} + \epsilon)$, связывая затухание весов (weight decay) с величинами градиента. AdamW разделяет затухание весов от шага адаптации градиентов.

Правило обновления:

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

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

$$\hat{m}_j = \frac{m_j^{(k)}}{1 - \beta_1^k}, \quad \hat{v}_j = \frac{v_j^{(k)}}{1 - \beta_2^k}$$

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

Заметки:

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

AdamW (Loshchilov & Hutter, 2017)

Устраняет распространенную проблему с ℓ_2 -регуляризацией в адаптивных оптимизаторах, таких как Adam. Стандартная ℓ_2 -регуляризация добавляет $\lambda \|x\|^2$ к функции потерь, что приводит к градиентному слагаемому λx . В Adam это слагаемое масштабируется адаптивным шагом обучения $(\sqrt{\hat{v}_j} + \epsilon)$, связывая затухание весов (weight decay) с величинами градиента. AdamW разделяет затухание весов от шага адаптации градиентов.

Правило обновления:

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

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

$$\hat{m}_j = \frac{m_j^{(k)}}{1 - \beta_1^k}, \quad \hat{v}_j = \frac{v_j^{(k)}}{1 - \beta_2^k}$$

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

Заметки:

- Слагаемое затухания весов $\lambda x_j^{(k-1)}$ добавляется после адаптивного шага по градиенту.
- Широко используется в обучении трансформаторов и других крупных моделей. Вариант по умолчанию для Hugging Face Trainer.

Shampoo (Gupta, Anil, et al., 2018; Anil et al., 2020)



Расшифровывается как **Stochastic Hessian-Approximation Matrix Preconditioning for Optimization Of** deep networks: стохастическое предобуславливание матрицей, основанной на аппроксимации гессиана, для оптимизации глубоких сетей. Это метод, вдохновлённый оптимизацией второго порядка и рассчитанный на крупномасштабное глубокое обучение.

Основная идея: аппроксимировать полноматричный предобуславливатель AdaGrad с помощью эффективных матричных структур, в частности произведений Кронекера.

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

Упрощённая концепция:

1. Вычислить градиент G_k .

Shampoo (Gupta, Anil, et al., 2018; Anil et al., 2020)



Расшифровывается как **Stochastic Hessian-Approximation Matrix Preconditioning for Optimization Of** deep networks: стохастическое предобуславливание матрицей, основанной на аппроксимации гессиана, для оптимизации глубоких сетей. Это метод, вдохновлённый оптимизацией второго порядка и рассчитанный на крупномасштабное глубокое обучение.

Основная идея: аппроксимировать полноматричный предобуславливатель AdaGrad с помощью эффективных матричных структур, в частности произведений Кронекера.

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

Упрощённая концепция:

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

Shampoo (Gupta, Anil, et al., 2018; Anil et al., 2020)



Расшифровывается как **Stochastic Hessian-Approximation Matrix Preconditioning for Optimization Of** deep networks: стохастическое предобуславливание матрицей, основанной на аппроксимации гессиана, для оптимизации глубоких сетей. Это метод, вдохновлённый оптимизацией второго порядка и рассчитанный на крупномасштабное глубокое обучение.

Основная идея: аппроксимировать полноматричный предобуславливатель AdaGrad с помощью эффективных матричных структур, в частности произведений Кронекера.

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

Упрощённая концепция:

1. Вычислить градиент G_k .
2. Обновить статистику $L_k = \beta L_{k-1} + (1 - \beta) G_k G_k^T$ 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 корень матрицы)

Shampoo (Gupta, Anil, et al., 2018; Anil et al., 2020)

Расшифровывается как **Stochastic Hessian-Approximation Matrix Preconditioning for Optimization Of** deep networks: стохастическое предобуславливание матрицей, основанной на аппроксимации гессиана, для оптимизации глубоких сетей. Это метод, вдохновлённый оптимизацией второго порядка и рассчитанный на крупномасштабное глубокое обучение.

Основная идея: аппроксимировать полноматричный предобуславливатель AdaGrad с помощью эффективных матричных структур, в частности произведений Кронекера.

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

Упрощённая концепция:

1. Вычислить градиент G_k .
2. Обновить статистику $L_k = \beta L_{k-1} + (1 - \beta) G_k G_k^T$ 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 корень матрицы)
4. Update: $W_{k+1} = W_k - \alpha P_L G_k P_R$.

Shampoo (Gupta, Anil, et al., 2018; Anil et al., 2020)

Заметки:

- Цель — эффективнее учитывать информацию о кривизне, чем методы первого порядка.

Shampoo (Gupta, Anil, et al., 2018; Anil et al., 2020)

Заметки:

- Цель — эффективнее учитывать информацию о кривизне, чем методы первого порядка.
- Вычислительно дороже, чем Adam, но может сходиться быстрее или приводить к лучшим решениям по числу шагов.

Shampoo (Gupta, Anil, et al., 2018; Anil et al., 2020)



Заметки:

- Цель — эффективнее учитывать информацию о кривизне, чем методы первого порядка.
- Вычислительно дороже, чем Adam, но может сходиться быстрее или приводить к лучшим решениям по числу шагов.
- Требует аккуратной реализации для эффективности (например, эффективного вычисления корней из обратной матрицы, обработки больших матриц).

Shampoo (Gupta, Anil, et al., 2018; Anil et al., 2020)



Заметки:

- Цель — эффективнее учитывать информацию о кривизне, чем методы первого порядка.
- Вычислительно дороже, чем Adam, но может сходиться быстрее или приводить к лучшим решениям по числу шагов.
- Требует аккуратной реализации для эффективности (например, эффективного вычисления корней из обратной матрицы, обработки больших матриц).
- Существуют варианты для разных форм тензоров (например, для свёрточных слоёв).

Muon³

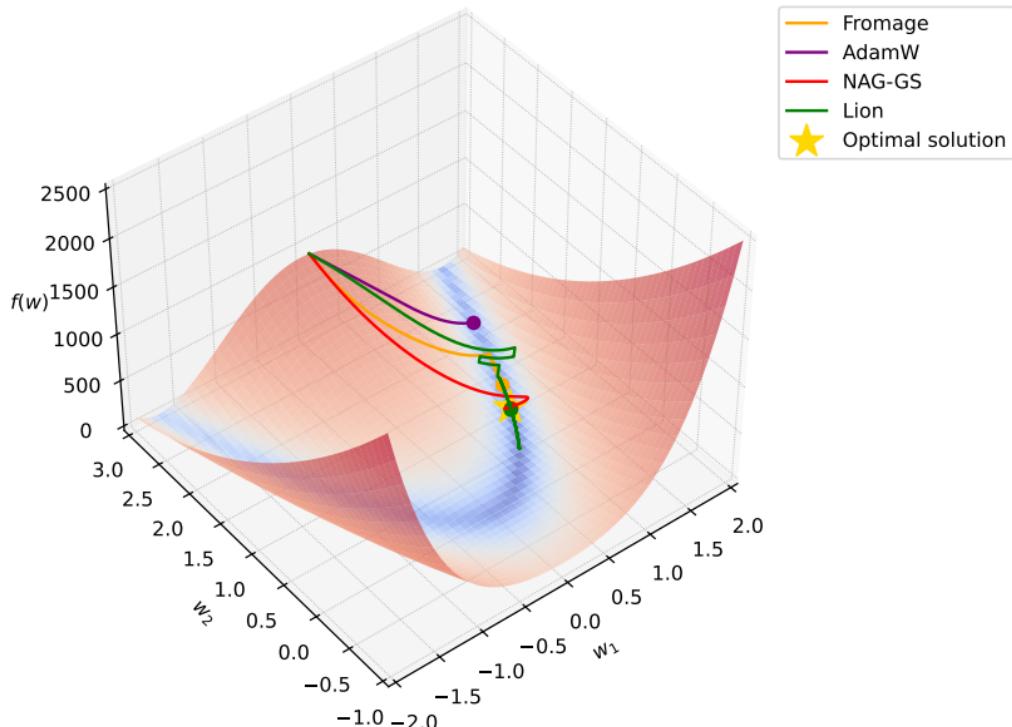


$$\begin{aligned}W_{t+1} &= W_t - \eta(G_t G_t^\top)^{-1/4} G_t (G_t^\top G_t)^{-1/4} \\&= W_t - \eta(US^2U^\top)^{-1/4}(USV^\top)(VS^2V^\top)^{-1/4} \\&= W_t - \eta(US^{-1/2}U^\top)(USV^\top)(VS^{-1/2}V^\top) \\&= W_t - \eta US^{-1/2} SS^{-1/2} V^\top \\&= W_t - \eta UV^\top\end{aligned}$$

³Deriving Muon

Много методов

Rosenbrock Function.
Adaptive stochastic gradient algorithms.
Learning rate 0.003



Оптимизация для глубокого обучения с практической точки зрения



Как их сравнить? AlgoPerf benchmark^{4 5}

- **AlgoPerf Benchmark:** Сравнивает алгоритмы обучения нейросетей по двум режимам:

Как их сравнить? AlgoPerf benchmark^{4 5}



- **AlgoPerf Benchmark:** Сравнивает алгоритмы обучения нейросетей по двум режимам:
 - Внешняя настройка (**External Tuning**): моделирует тюнинг гиперпараметров при ограниченных ресурсах (5 запусков, квазислучайный поиск). Оценка — медианное минимальное время достижения цели по 5 наборам задач.

Как их сравнить? AlgoPerf benchmark^{4 5}



- **AlgoPerf Benchmark:** Сравнивает алгоритмы обучения нейросетей по двум режимам:
 - **Внешняя настройка (External Tuning):** моделирует тюнинг гиперпараметров при ограниченных ресурсах (5 запусков, квазислучайный поиск). Оценка — медианное минимальное время достижения цели по 5 наборам задач.
 - **Самонастройка (Self-Tuning):** моделирует автоматический тюнинг на одной машине (фиксированный/внутрипетлевой тюнинг, бюджет ×3). Оценка — медианное время выполнения по 5 наборам задач.

Как их сравнить? AlgoPerf benchmark^{4 5}



- **AlgoPerf Benchmark:** Сравнивает алгоритмы обучения нейросетей по двум режимам:
 - **Внешняя настройка (External Tuning):** моделирует тюнинг гиперпараметров при ограниченных ресурсах (5 запусков, квазислучайный поиск). Оценка — медианное минимальное время достижения цели по 5 наборам задач.
 - **Самонастройка (Self-Tuning):** моделирует автоматический тюнинг на одной машине (фиксированный/внутрипетлевой тюнинг, бюджет ×3). Оценка — медианное время выполнения по 5 наборам задач.
- **Оценка:** результаты агрегируются с помощью профилей производительности. Профили показывают долю задач, решённых за время, не превышающее фактор τ относительно самой быстрой посылки. Итоговый балл — нормированная площадь под кривой профиля (1.0 = самая быстрая на всех задачах).

Как их сравнить? AlgoPerf benchmark⁴ ⁵



- **AlgoPerf Benchmark:** Сравнивает алгоритмы обучения нейросетей по двум режимам:
 - **Внешняя настройка (External Tuning):** моделирует тюнинг гиперпараметров при ограниченных ресурсах (5 запусков, квазислучайный поиск). Оценка — медианное минимальное время достижения цели по 5 наборам задач.
 - **Самонастройка (Self-Tuning):** моделирует автоматический тюнинг на одной машине (фиксированный/внутрипетлевой тюнинг, бюджет ×3). Оценка — медианное время выполнения по 5 наборам задач.
- **Оценка:** результаты агрегируются с помощью профилей производительности. Профили показывают долю задач, решённых за время, не превышающее фактор τ относительно самой быстрой посылки. Итоговый балл — нормированная площадь под кривой профиля (1.0 = самая быстрая на всех задачах).
- **Вычислительная стоимость:** оценка требует $\sim 49,240$ суммарных часов на 8x NVIDIA V100 GPUs (в среднем $\sim 3469\text{ч}$ /внешняя настройка, $\sim 1847\text{ч}$ /самонастройка).

⁴Benchmarking Neural Network Training Algorithms

⁵Accelerating neural network training: An analysis of the AlgoPerf competition

AlgoPerf benchmark

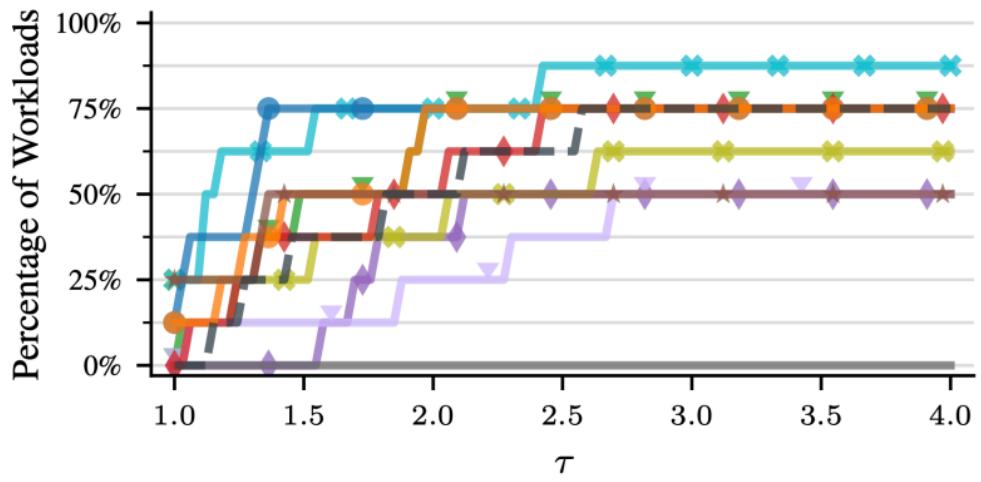
Summary фиксированных базовых задач в AlgoPerf benchmark. Функции потерь включают кросс-энтропию (CE), среднюю абсолютную ошибку (L1) и CTC-потерю (Connectionist Temporal Classification, CTC). Дополнительные метрики оценки: индекс структурного сходства (SSIM), коэффициент ошибок (ER) и доля ошибок по словам (WER), средняя усреднённая точность (mAP) и метрика BLEU (bilingual evaluation understudy). Бюджет времени выполнения соответствует набору правил внешней настройки; набор правил самонастройки допускает обучение, в 3 раза более длительное.

| Задача | Датасет | Модель | Потери | Метрика | Целевое значение на валидации | Бюджет времени |
|-------------------------------|-------------|-------------|--------|---------|-------------------------------|----------------|
| Clickthrough rate prediction | CRITEO 1TB | DLRMSMALL | CE | CE | 0.123735 | 7703 |
| MRI reconstruction | FASTMRI | U-NET | L1 | SSIM | 0.7344 | 8859 |
| Image classification | IMAGENET | ResNet-50 | CE | ER | 0.22569 | 63,008 |
| | | ViT | CE | ER | 0.22691 | 77,520 |
| Speech recognition | LIBRISPEECH | Conformer | CTC | WER | 0.085884 | 61,068 |
| | | DeepSpeech | CTC | WER | 0.119936 | 55,506 |
| Molecular property prediction | OGBG | GNN | CE | mAP | 0.28098 | 18,477 |
| Translation | WMT | Transformer | CE | BLEU | 30.8491 | 48,151 |

AlgoPerf benchmark

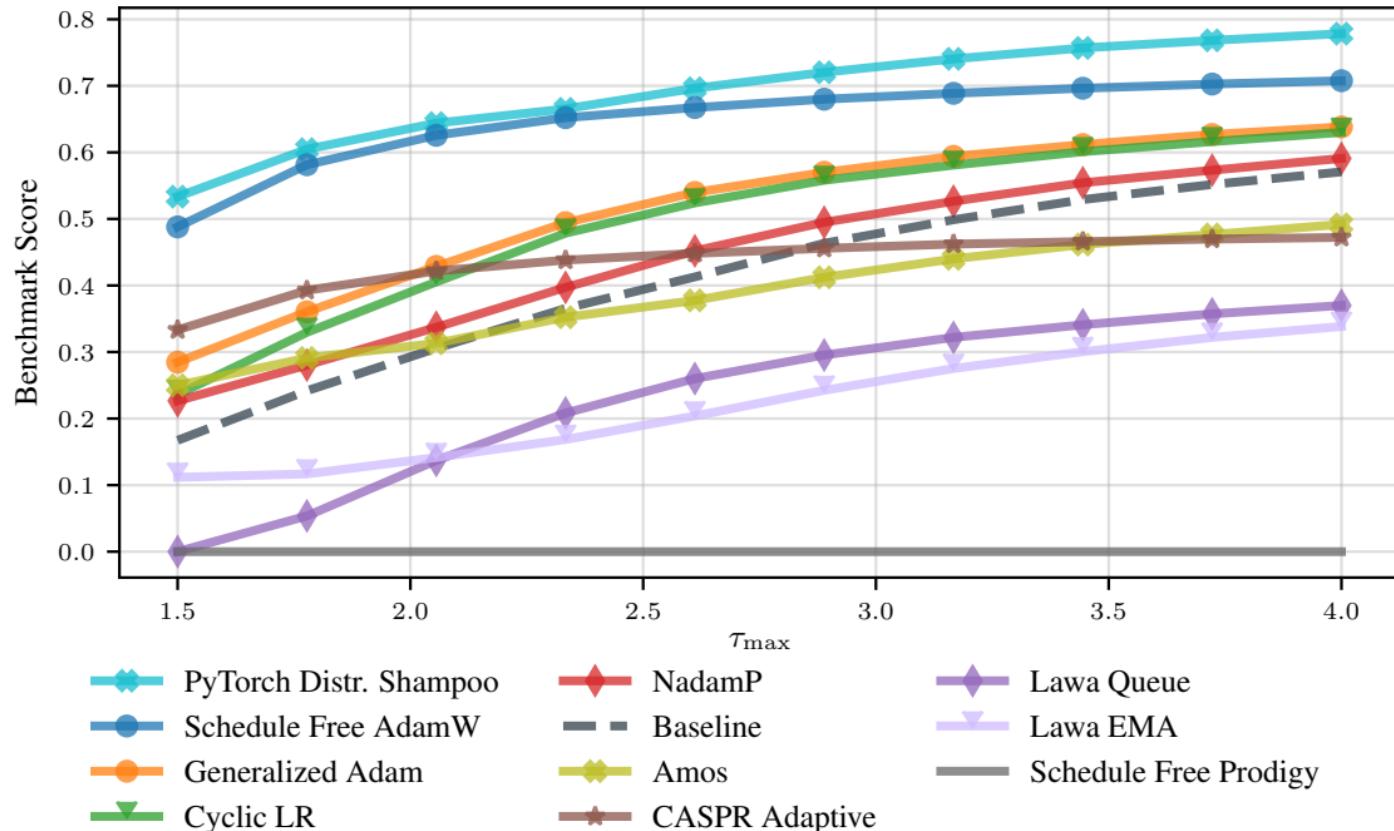
| Submission | Line | Score |
|-----------------------------|------|---------------|
| PYTORCH DISTRIBUTED SHAMPOO | | 0.7784 |
| SCHEDULE FREE ADAMW | | 0.7077 |
| GENERALIZED ADAM | | 0.6383 |
| CYCLIC LR | | 0.6301 |
| NADAMP | | 0.5909 |
| BASELINE | | 0.5707 |
| AMOS | | 0.4918 |
| CASPR ADAPTIVE | | 0.4722 |
| LAWA QUEUE | | 0.3699 |
| LAWA EMA | | 0.3384 |
| SCHEDULE FREE PRODIGY | | 0 |

(a) External tuning leaderboard

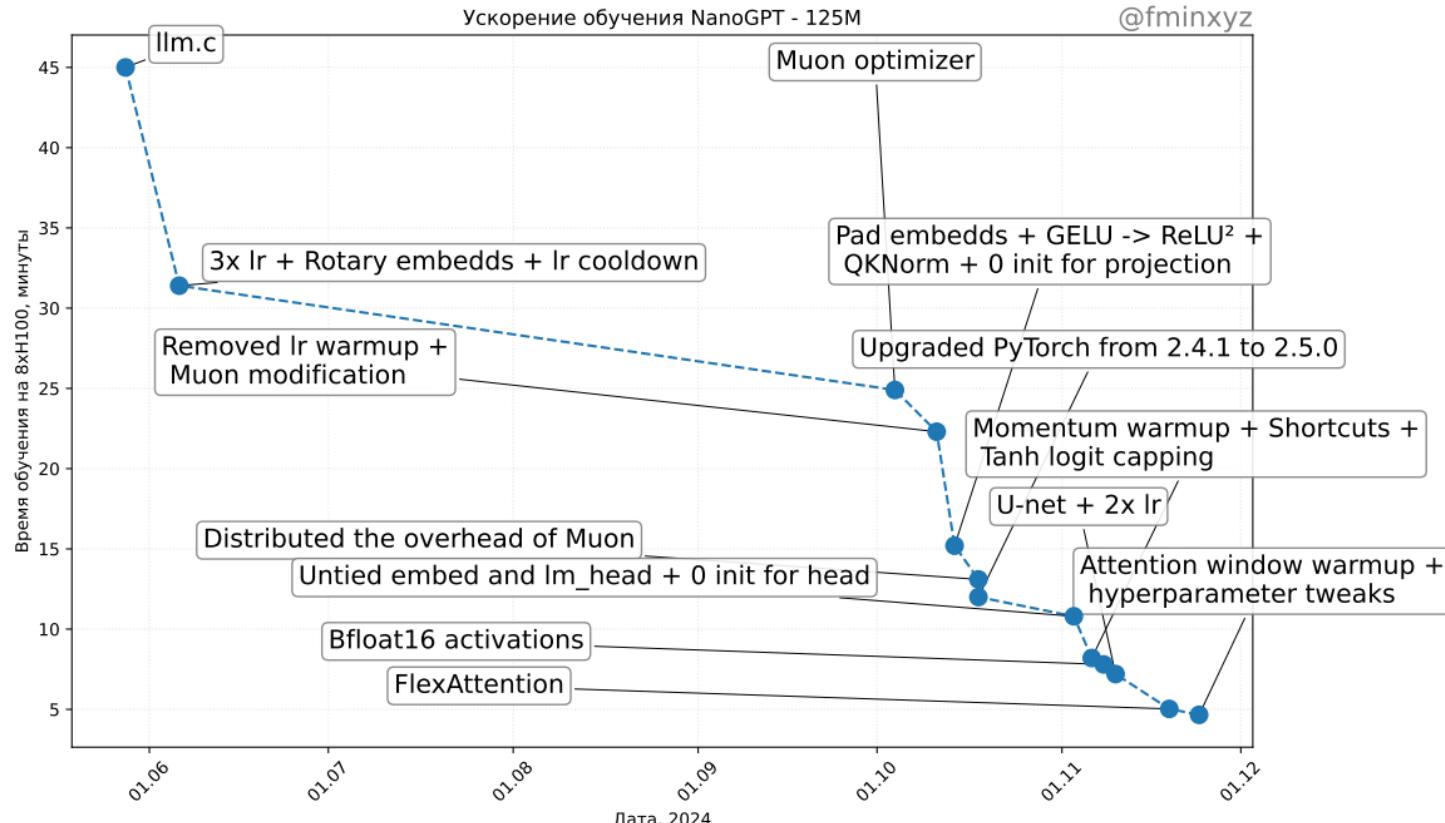


(b) External tuning performance profiles

AlgoPerf benchmark



NanoGPT speedrun



Работают ли трюки, если увеличить размер модели?

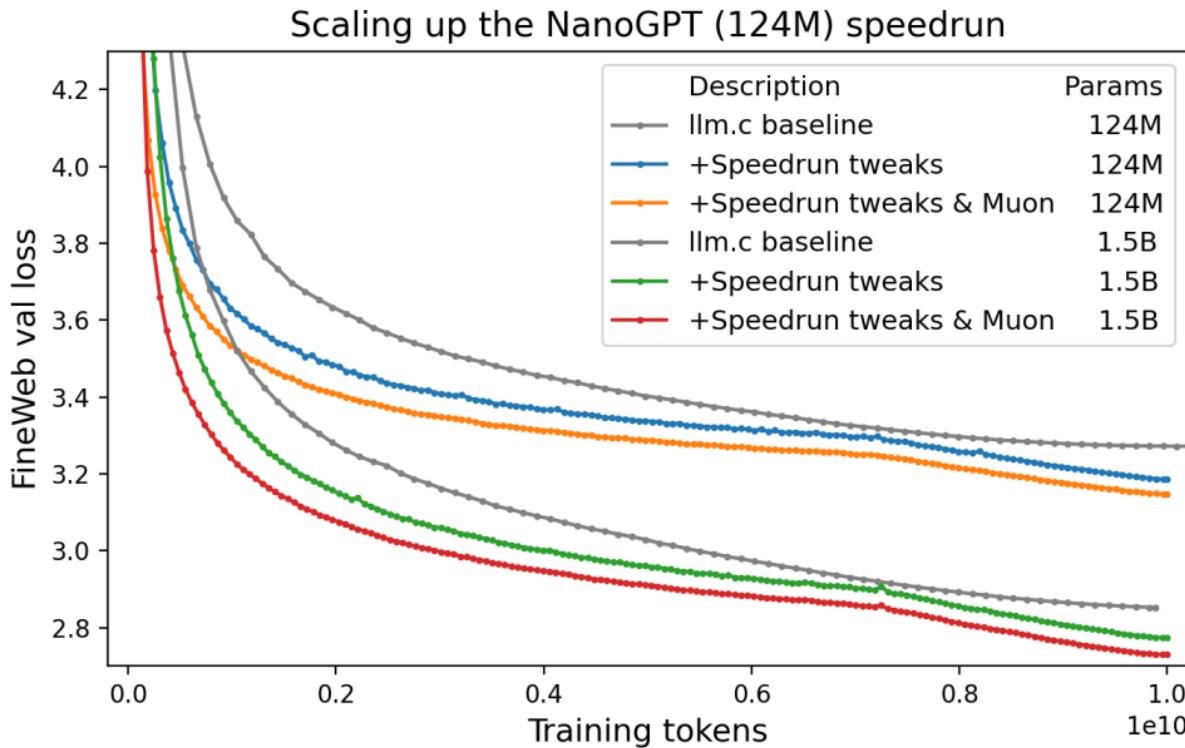


Рисунок 3. Источник

Работают ли трюки, если увеличить размер модели?

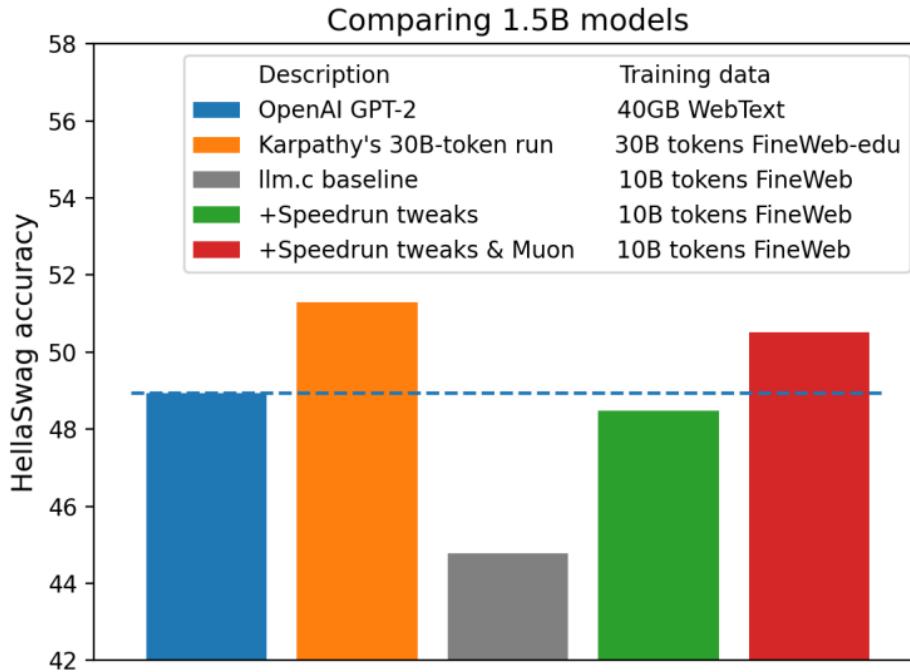


Рисунок 4. Источник



Неожиданные истории

Adam работает хуже для CV, чем для LLM? ⁶

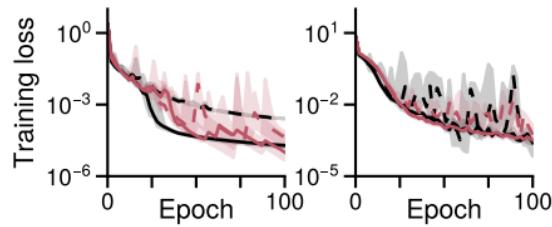


Рисунок 5. CNNs on MNIST and CIFAR10

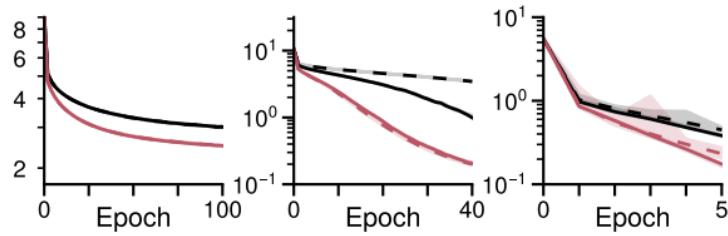


Рисунок 6. Transformers on PTB, WikiText2, and SQuAD

Черные линии - SGD; красные линии - Adam.

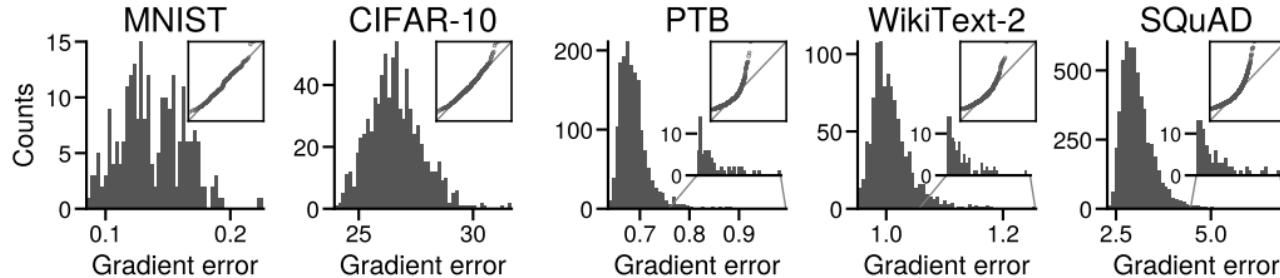
⁶Linear attention is (maybe) all you need (to understand transformer optimization)

Почему Adam работает хуже для CV, чем для LLM?



7

Потому что шум градиентов в языковых моделях имеет тяжелые хвосты?



⁷Linear attention is (maybe) all you need (to understand transformer optimization)

Почему Adam работает хуже для CV, чем для LLM? ⁸



Нет! Метки имеют тяжелые хвосты!

В компьютерном зрении датасеты часто сбалансированы: 1000 котиков, 1000 песелей и т.д.

В языковых датасетах почти всегда не так: слово *the* встречается часто, слово *tie* на порядки реже

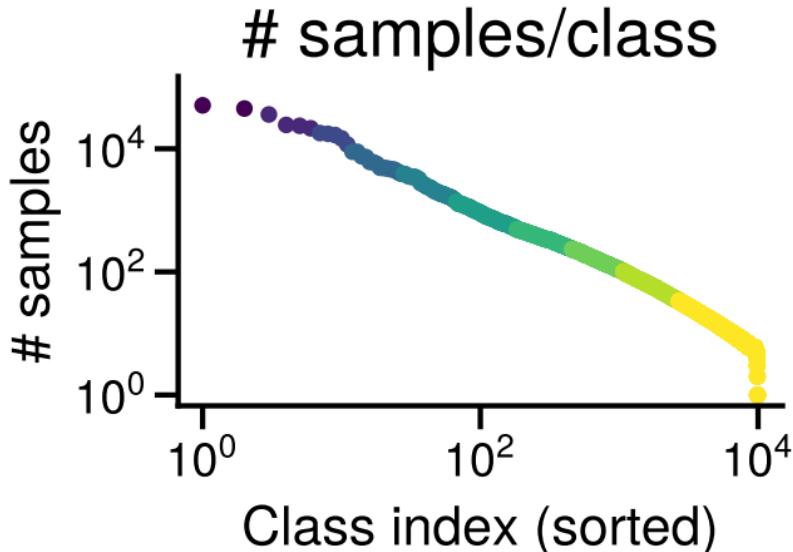


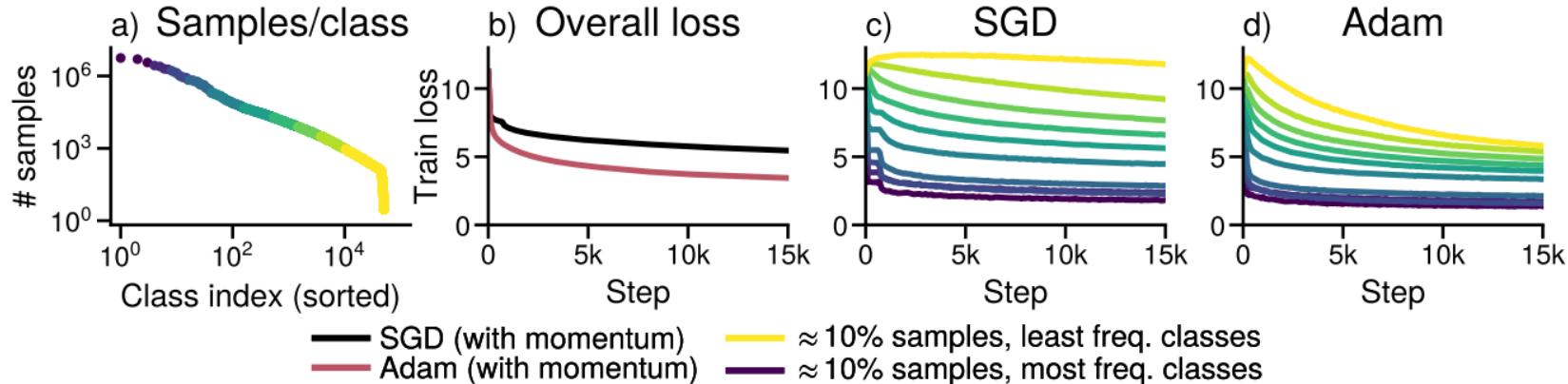
Рисунок 7. Распределение частоты токенов в PTB

⁸Heavy-Tailed Class Imbalance and Why Adam Outperforms Gradient Descent on Language Models

Почему Adam работает хуже для CV, чем для LLM? ⁹



SGD медленно прогрессирует на редких классах



SGD не добивается прогресса на низкочастотных классах, в то время как Adam добивается. Обучение GPT-2 S на WikiText-103. (a) Распределение классов, отсортированных по частоте встречаемости, разбитых на группы, соответствующие $\approx 10\%$ данных. (b) Значение функции потерь при обучении. (c, d) Значение функции потерь при обучении для каждой группы при использовании SGD и Adam.

⁹Heavy-Tailed Class Imbalance and Why Adam Outperforms Gradient Descent on Language Models

Влияние инициализации

💡 Правильная инициализация нейронной сети важна. Функция потерь нейронной сети является высоко невыпуклой; оптимизировать её для достижения «хорошего» решения трудно, требует тщательной настройки.

- Не инициализируйте все веса одинаково — почему?

Влияние инициализации



Правильная инициализация нейронной сети важна. Функция потерь нейронной сети является высоко невыпуклой; оптимизировать её для достижения «хорошего» решения трудно, требует тщательной настройки.

- Не инициализируйте все веса одинаково — почему?
- Случайная инициализация: задавайте случайно, например, из гауссовского распределения $N(0, \sigma^2)$, где стандартное отклонение σ зависит от числа нейронов в слое. Это обеспечивает нарушение симметрии. *Symmetry breaking*.



10

Влияние инициализации¹⁰

💡 Правильная инициализация нейронной сети важна. Функция потерь нейронной сети является высоко невыпуклой; оптимизировать её для достижения «хорошего» решения трудно, требует тщательной настройки.

- Не инициализируйте все веса одинаково — почему?
- Случайная инициализация: задавайте случайно, например, из гауссовского распределения $N(0, \sigma^2)$, где стандартное отклонение σ зависит от числа нейронов в слое. Это обеспечивает нарушение симметрии. *Symmetry breaking*.
- Можно найти более полезные советы здесь

¹⁰On the importance of initialization and momentum in deep learning Ilya Sutskever, James Martens, George Dahl, Geoffrey Hinton

Влияние инициализации весов нейронной сети на сходимость методов¹¹

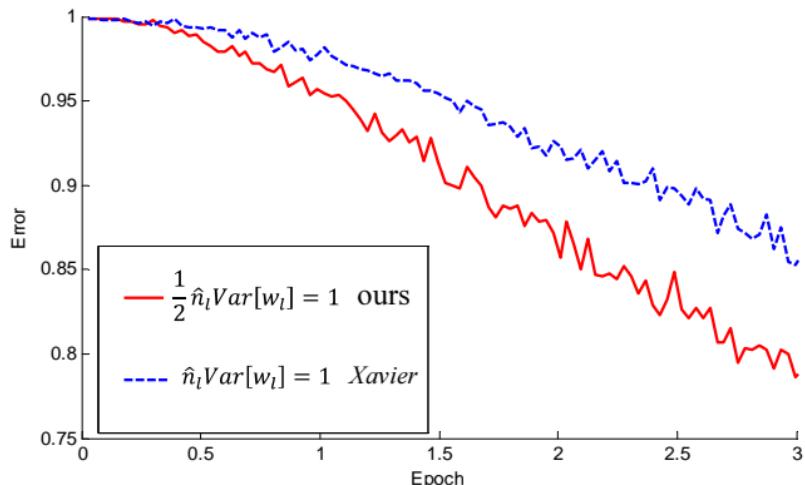


Рисунок 8. 22-layer ReLU net: good init converges faster

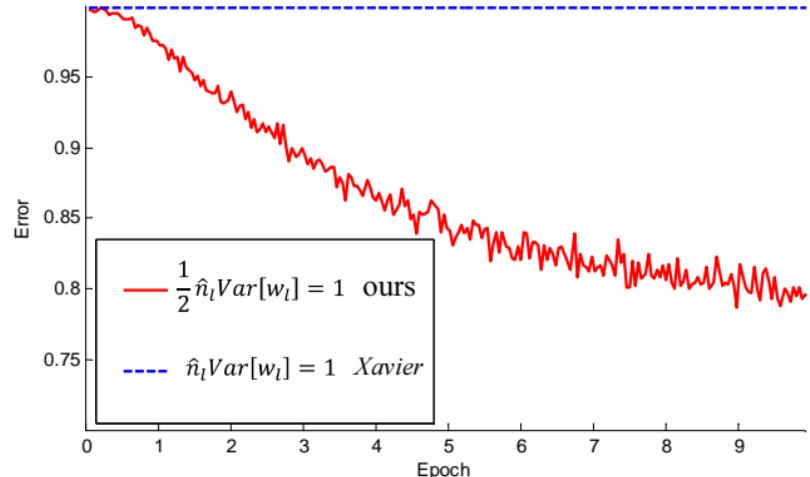


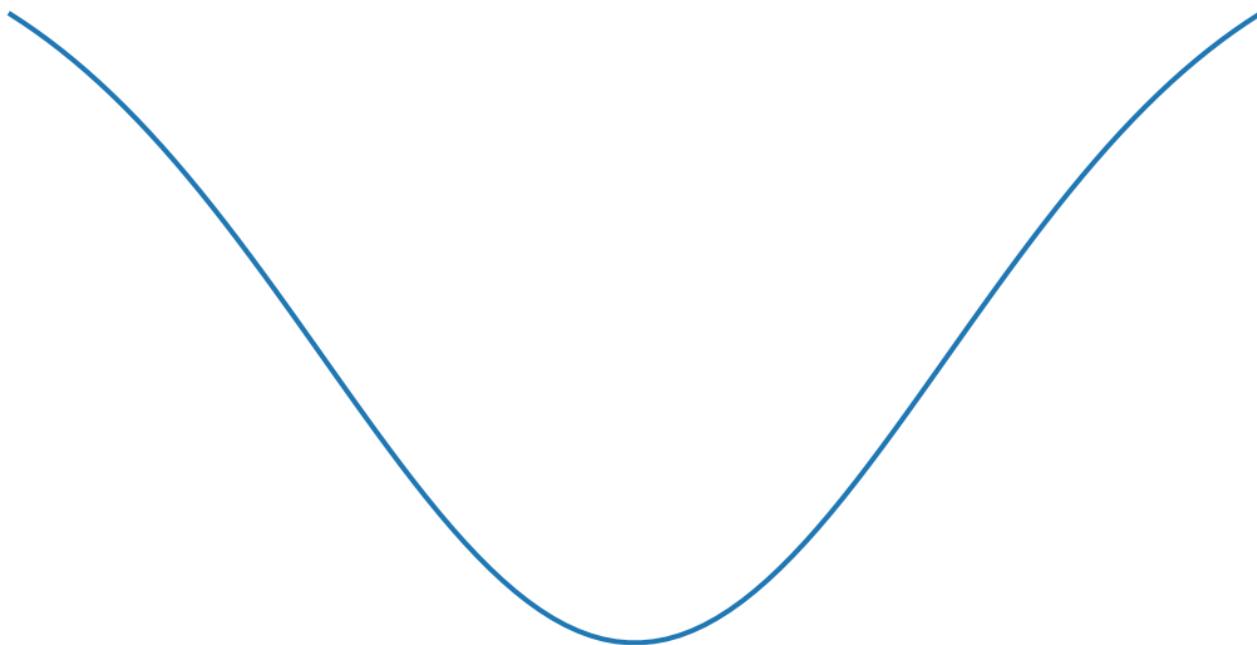
Рисунок 9. 30-layer ReLU net: good init is able to converge

¹¹Delving Deep into Rectifiers: Surpassing Human-Level Performance on ImageNet Classification, Kaiming He, Xiangyu Zhang, Shaoqing Ren, Jian Sun

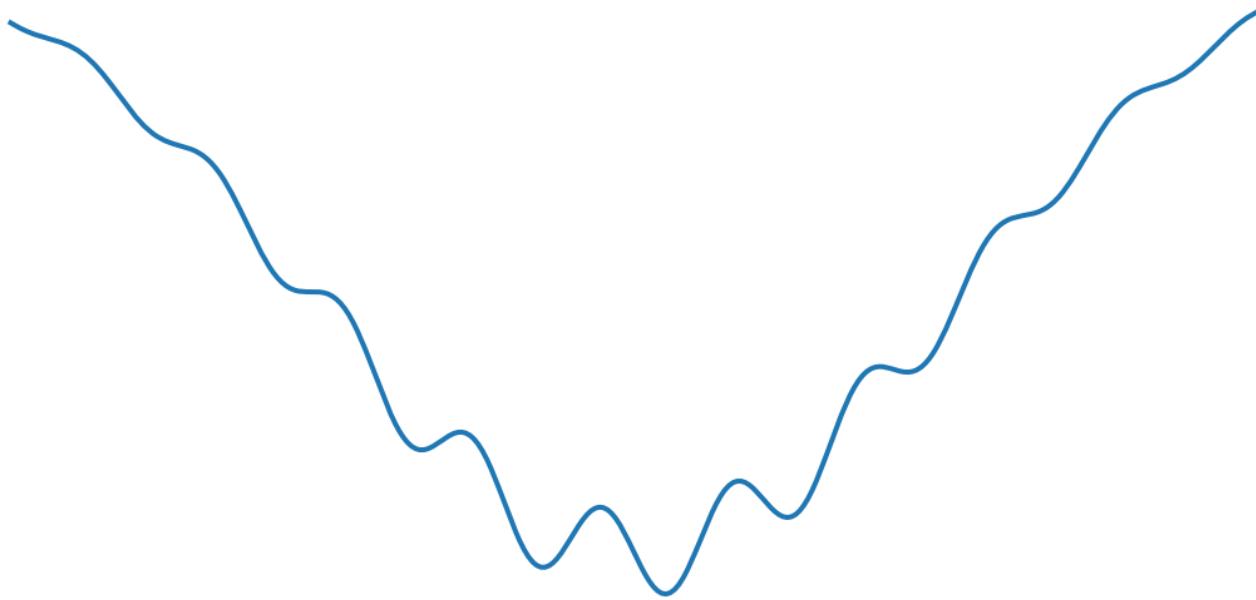


Весёлые истории

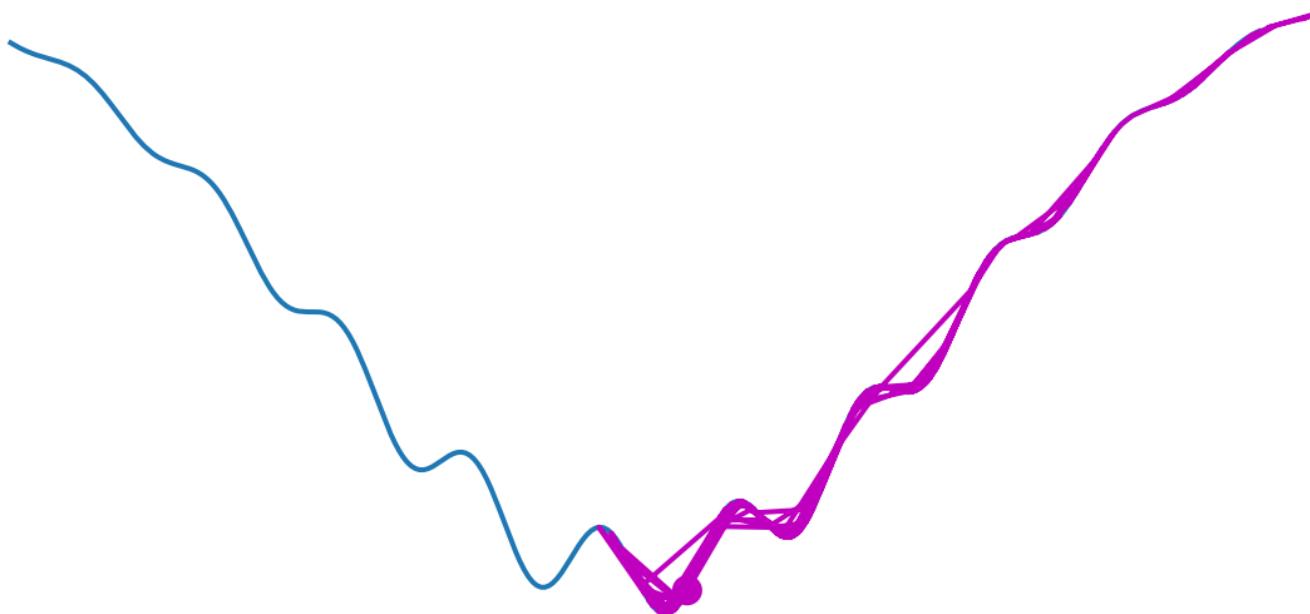
Градиентный спуск сходится к локальному минимуму



Градиентный спуск
сходится к локальному минимуму



Стохастический градиентный спуск
выпрыгивает из локальных минимумов



Визуализация с помощью проекции на прямую

- Обозначим начальную точку как w_0 , представляющую собой веса нейронной сети при инициализации. Веса, полученные после обучения, обозначим как \hat{w} .

$$L(\alpha) = L(w_0 + \alpha w_1), \text{ where } \alpha \in [-b, b].$$

Визуализация с помощью проекции на прямую

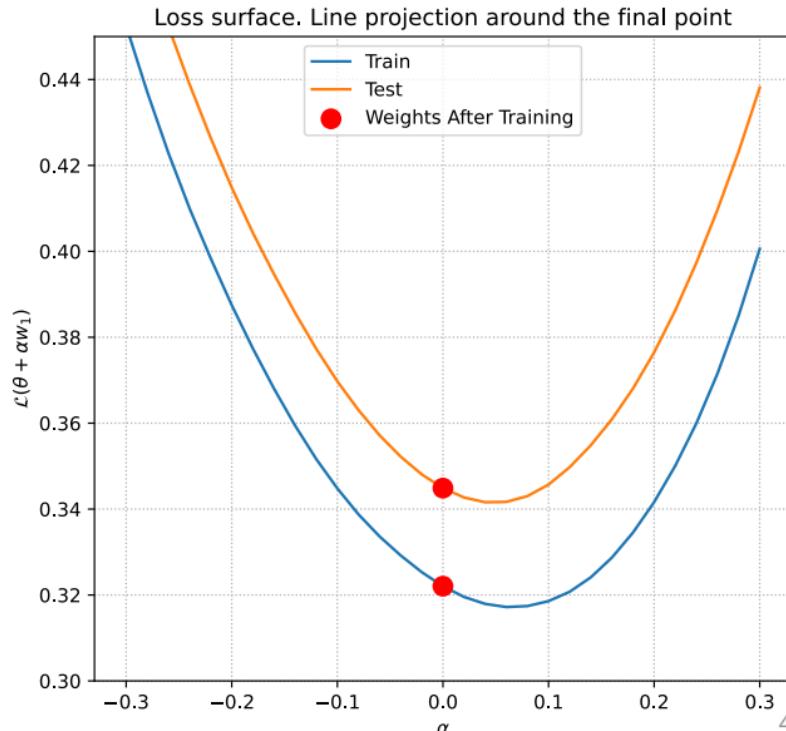
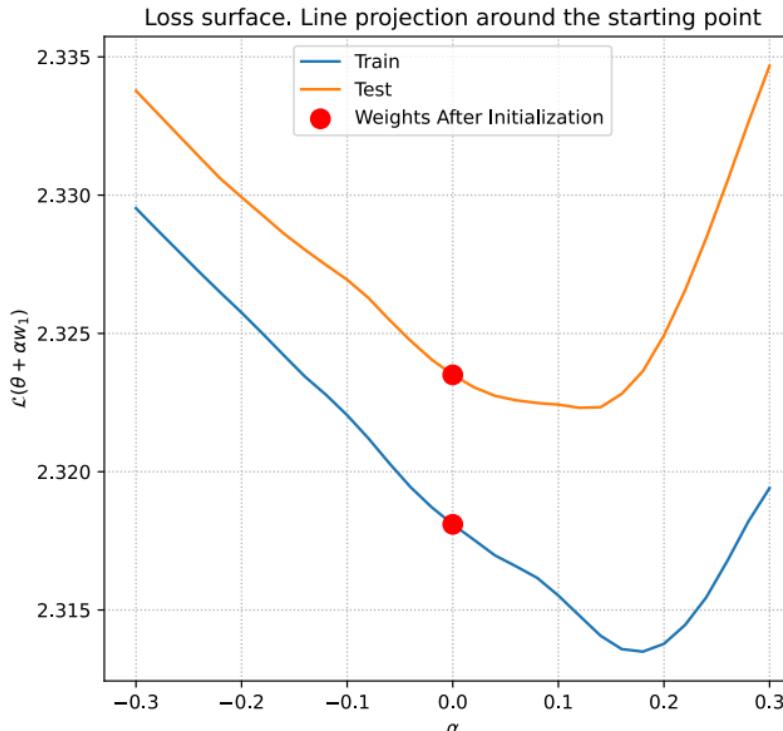
- Обозначим начальную точку как w_0 , представляющую собой веса нейронной сети при инициализации. Веса, полученные после обучения, обозначим как \hat{w} .
- Генерируем случайный вектор такой же размерности и нормы $w_1 \in \mathbb{R}^p$, затем вычисляем значение функции потерь вдоль этого вектора:

$$L(\alpha) = L(w_0 + \alpha w_1), \text{ where } \alpha \in [-b, b].$$

Проекция функции потерь нейронной сети на прямую



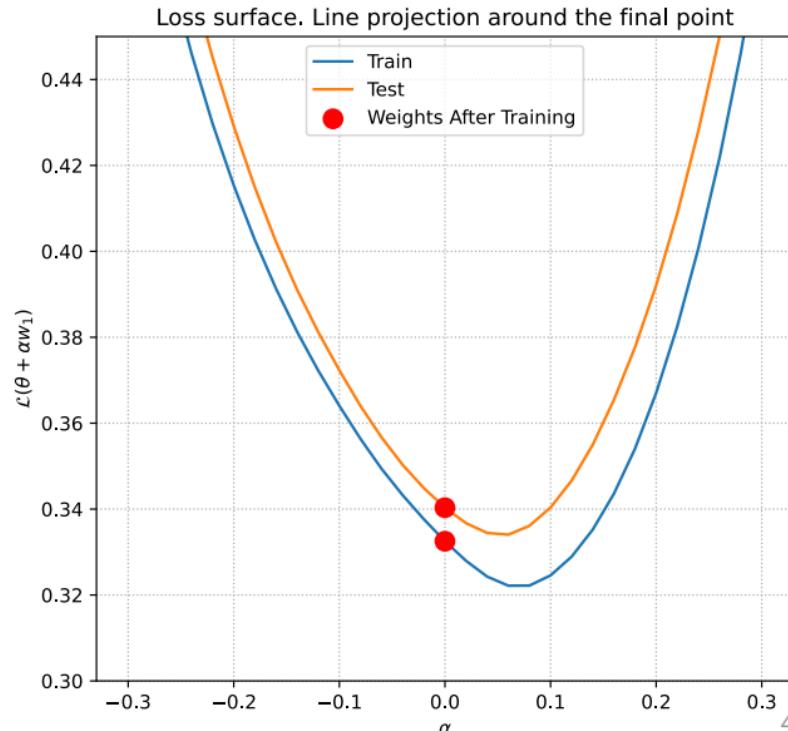
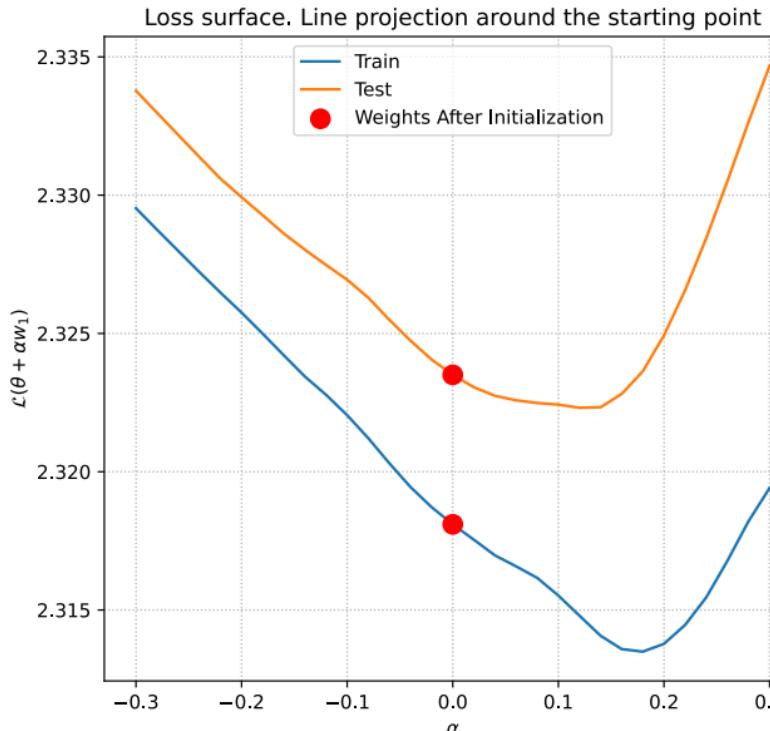
No Dropout



Проекция функции потерь нейронной сети на прямую



Dropout 0.2

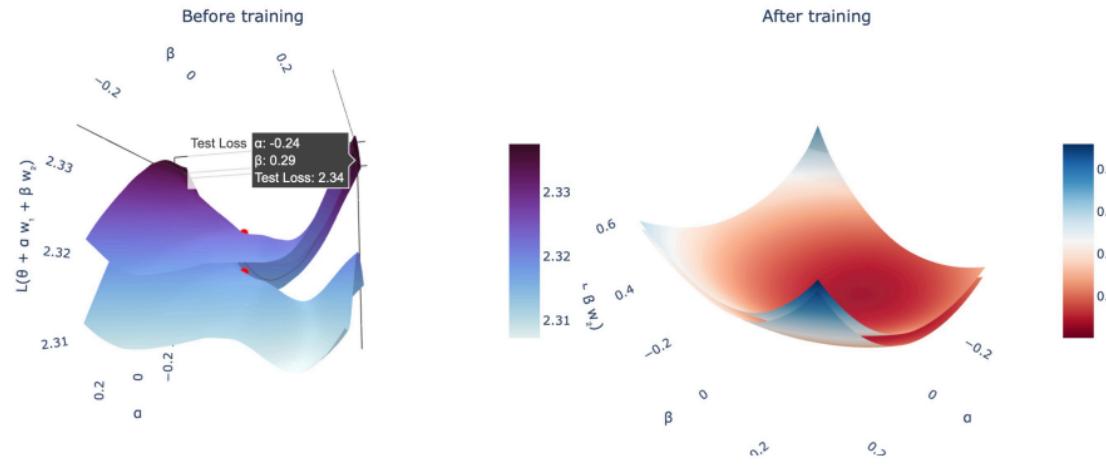


Проекция функции потерь нейронной сети на плоскость

- Мы можем расширить эту идею и построить проекцию поверхности потерь на плоскость, которая задается 2 случайными векторами.

$$L(\alpha, \beta) = L(w_0 + \alpha w_1 + \beta w_2), \text{ where } \alpha, \beta \in [-b, b]^2.$$

No Dropout. Plane projection of loss surface.

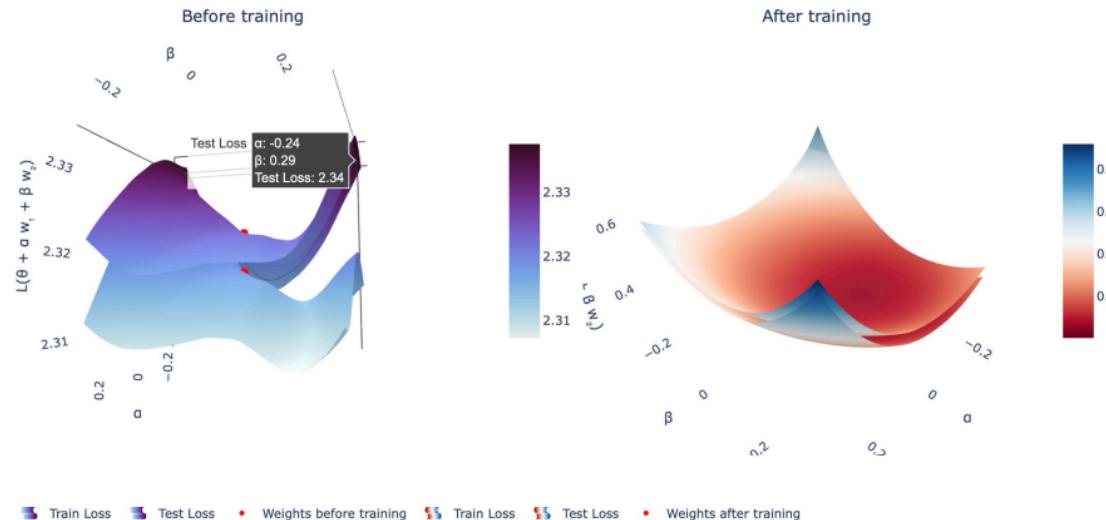


Проекция функции потерь нейронной сети на плоскость

- Мы можем расширить эту идею и построить проекцию поверхности потерь на плоскость, которая задается 2 случайными векторами.
- Два случайных гауссовых вектора в пространстве большой размерности с высокой вероятностью ортогональны.

$$L(\alpha, \beta) = L(w_0 + \alpha w_1 + \beta w_2), \text{ where } \alpha, \beta \in [-b, b]^2.$$

No Dropout. Plane projection of loss surface.



Может ли быть полезно изучение таких проекций? ¹²

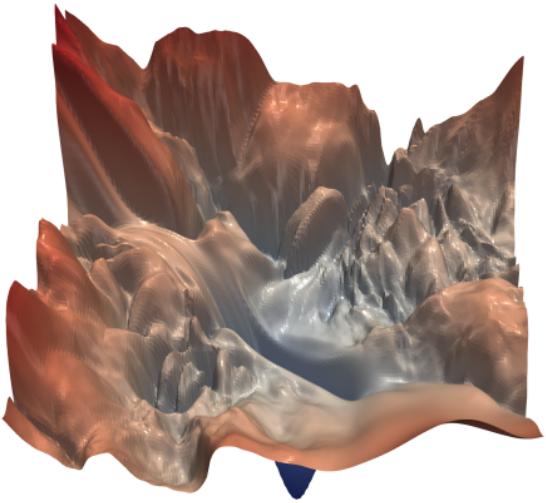


Рисунок 13. The loss surface of ResNet-56
without skip connections

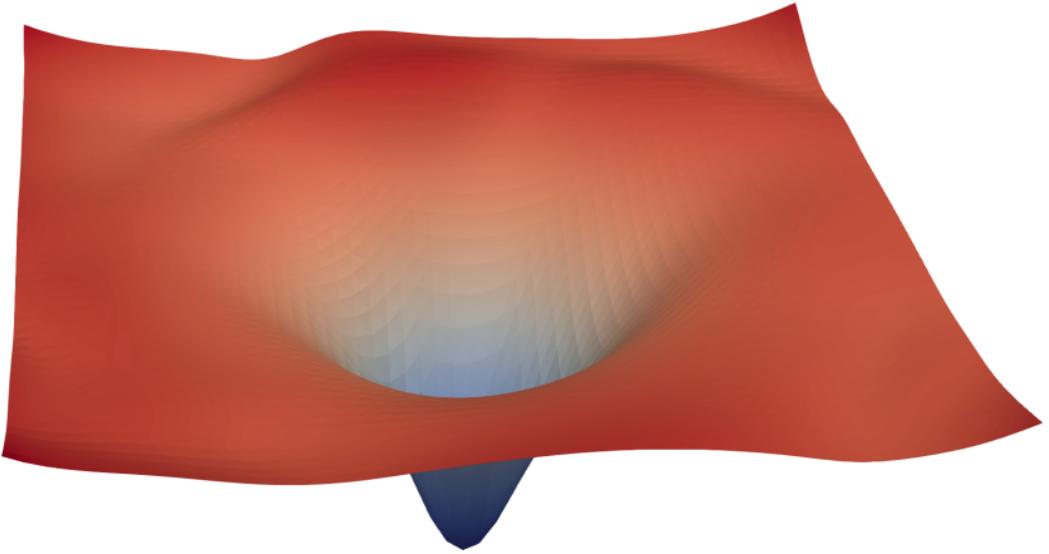


Рисунок 14. The loss surface of ResNet-56 with skip connections

¹²Visualizing the Loss Landscape of Neural Nets, Hao Li, Zheng Xu, Gavin Taylor, Christoph Studer, Tom Goldstein

Может ли быть полезно изучение таких проекций, если серьезно? ¹³

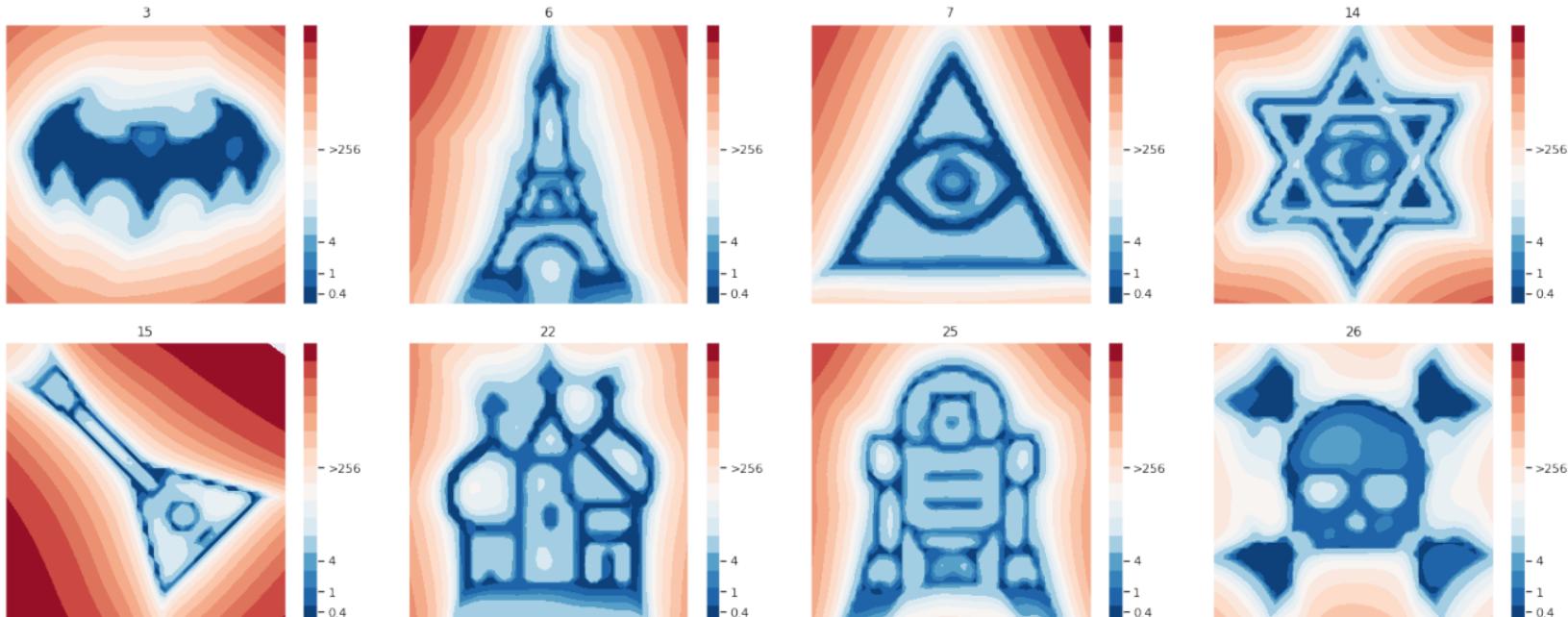
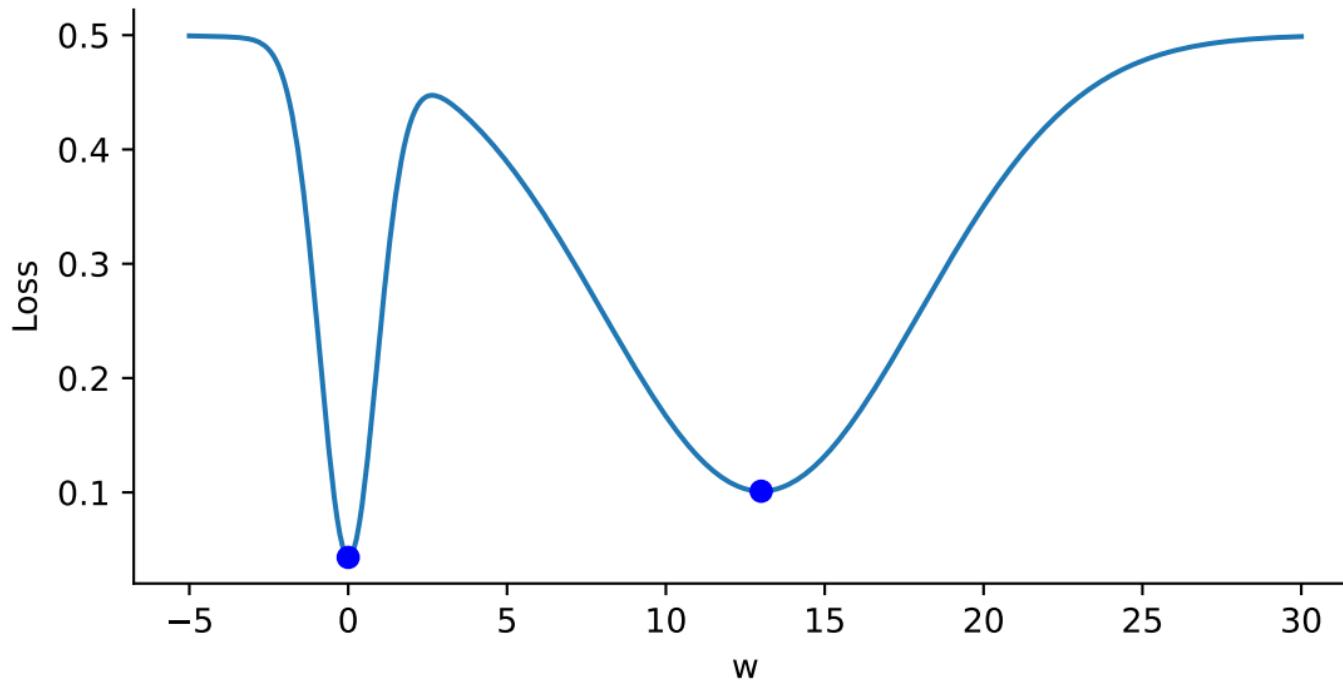


Рисунок 15. Examples of a loss landscape of a typical CNN model on FashionMNIST and CIFAR10 datasets found with MPO. Loss values are color-coded according to a logarithmic scale

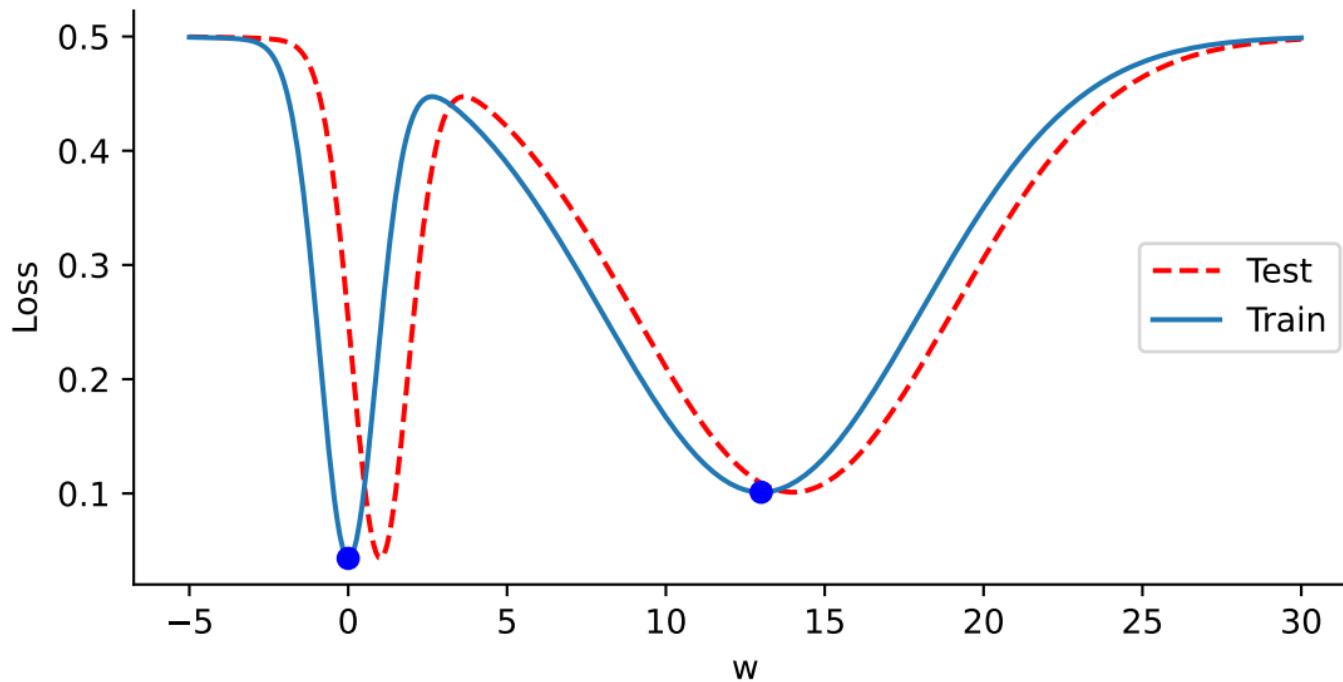
Ширина локальных минимумов

Узкие и широкие локальные минимумы



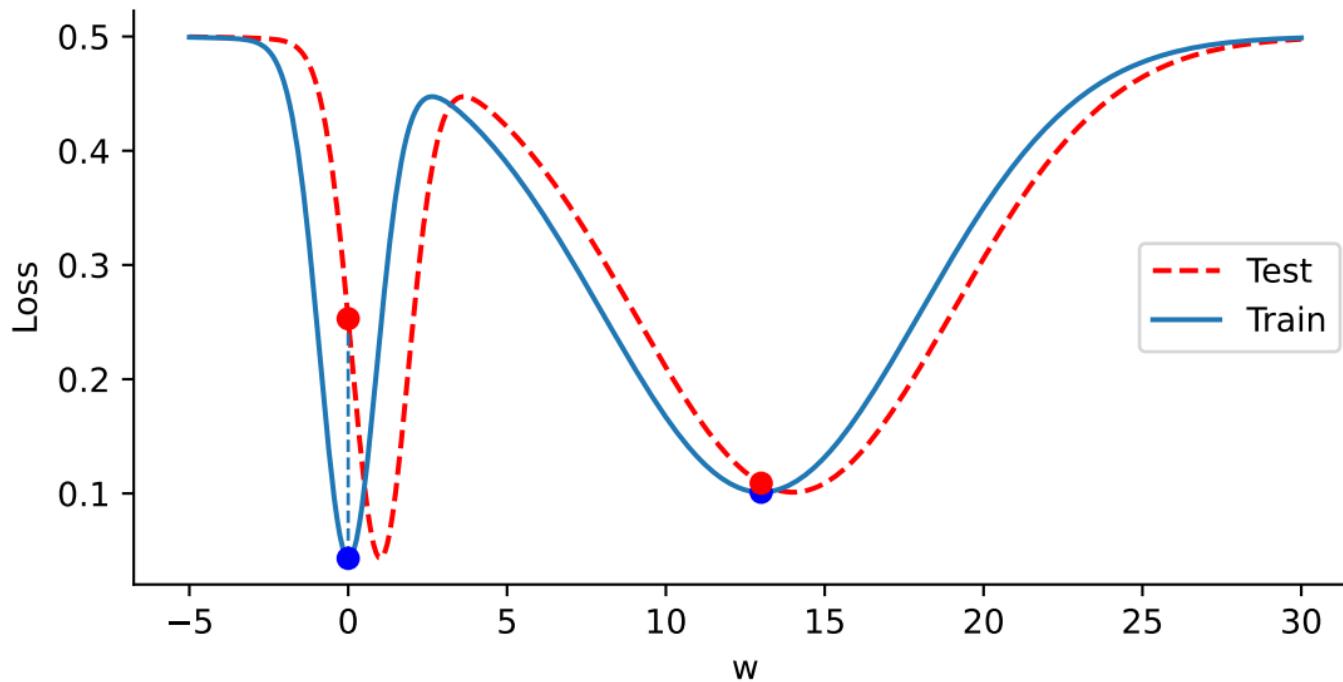
Ширина локальных минимумов

Узкие и широкие локальные минимумы



Ширина локальных минимумов

Узкие и широкие локальные минимумы

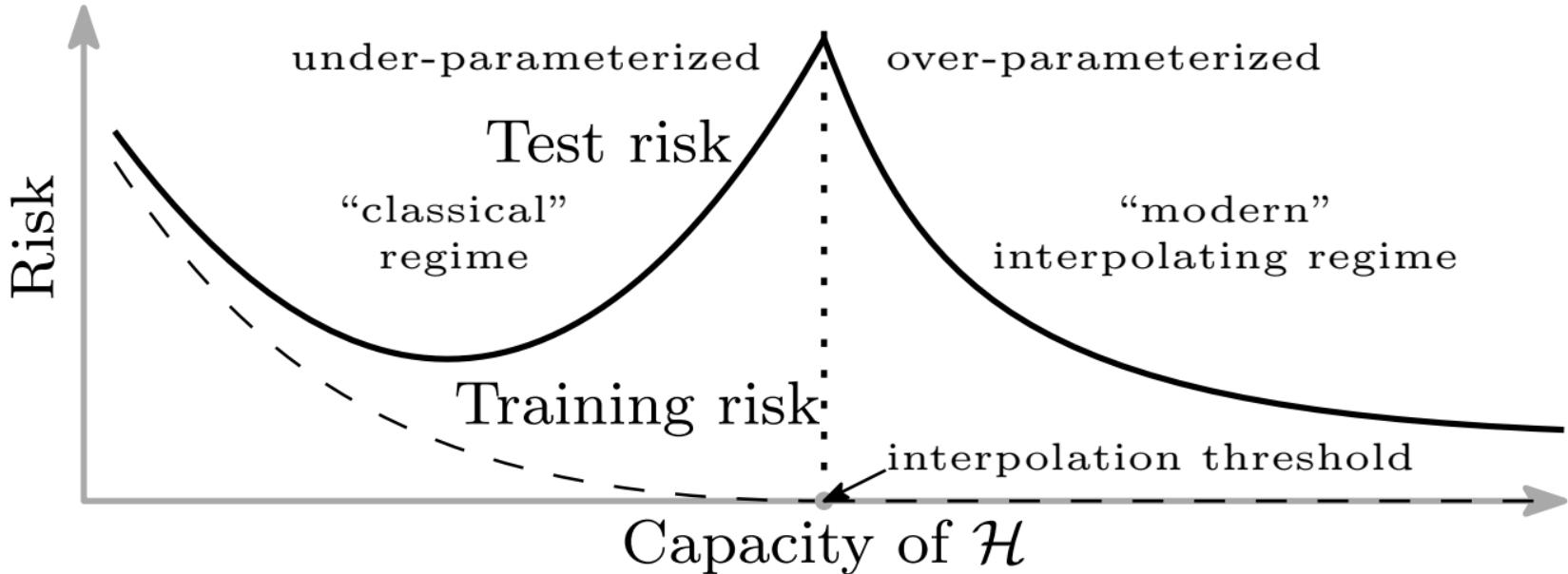




Экспоненциальный шаг обучения

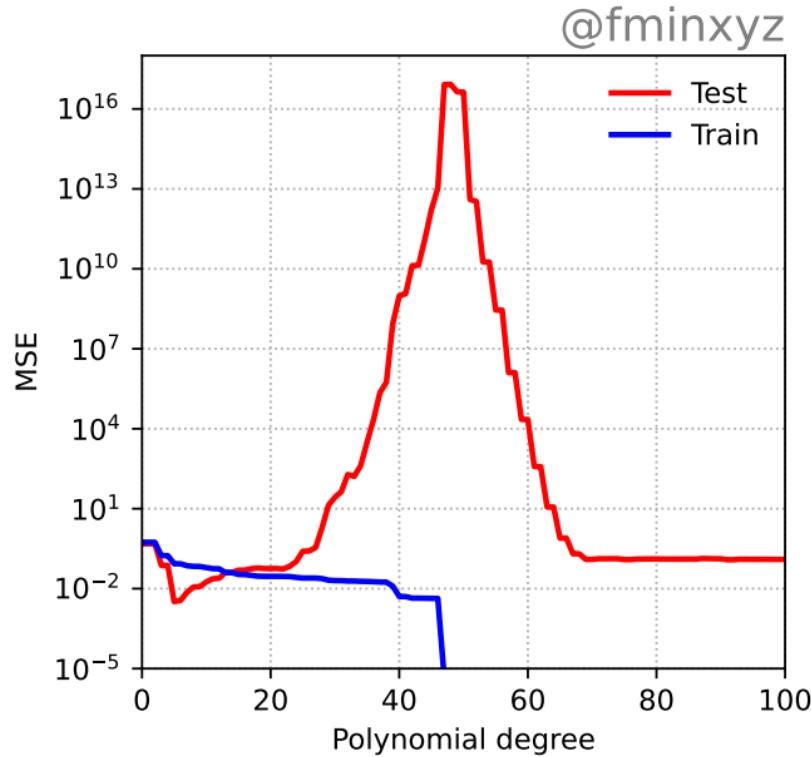
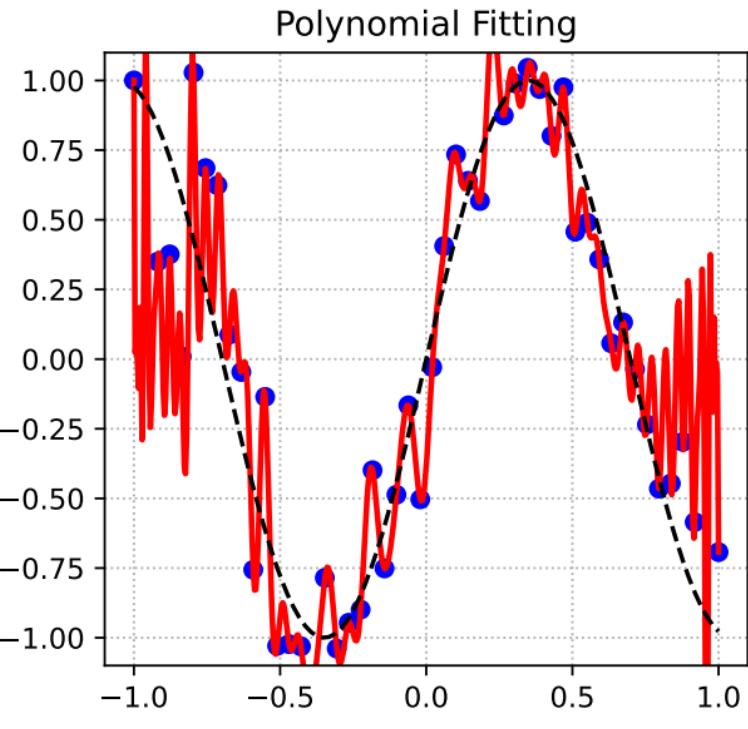
- Exponential Learning Rate Schedules for Deep Learning

Double Descent¹⁴



¹⁴ Reconciling modern machine learning practice and the bias-variance trade-off, Mikhail Belkin, Daniel Hsu, Siyuan Ma, Soumik Mandal

Double Descent



Grokking¹⁵

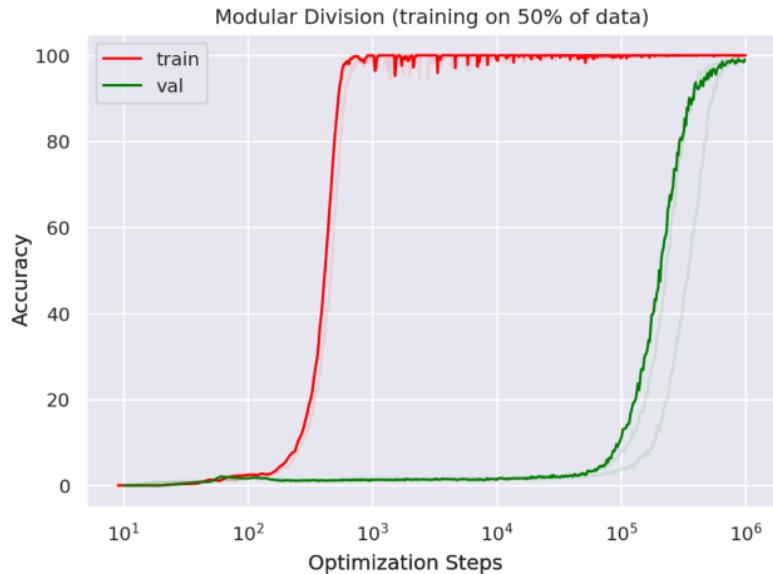


Рисунок 16. Training transformer with 2 layers, width 128, and 4 attention heads, with a total of about $4 \cdot 10^5$ non-embedding parameters. Reproduction of experiments (~ half an hour) is available [here](#)

- Рекомендую посмотреть лекцию Дмитрия Ветрова **Удивительные свойства функции потерь в нейронной сети** (Surprising properties of loss landscape in overparameterized models). [видео](#), [Презентация](#)

Grokking¹⁵

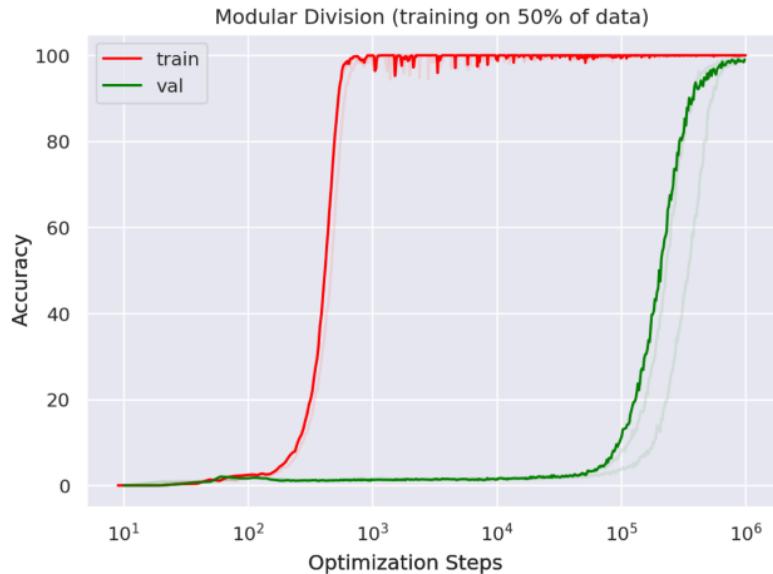


Рисунок 16. Training transformer with 2 layers, width 128, and 4 attention heads, with a total of about $4 \cdot 10^5$ non-embedding parameters. Reproduction of experiments (~ half an hour) is available [here](#)

- 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.

Grokking¹⁵

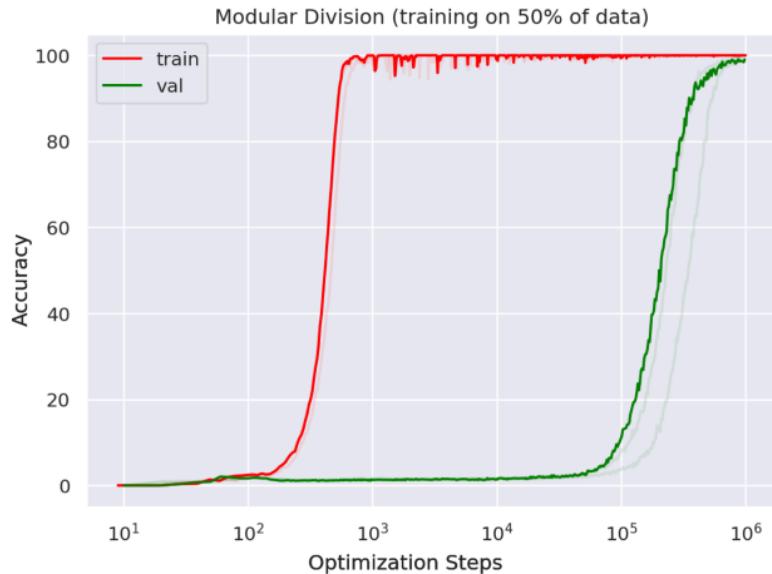


Рисунок 16. Training transformer with 2 layers, width 128, and 4 attention heads, with a total of about $4 \cdot 10^5$ non-embedding parameters. Reproduction of experiments (~ half an hour) is available here

- 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**.

¹⁵ Grokking: Generalization Beyond Overfitting on Small Algorithmic Datasets, Alethea Power, Yuri Burda, Harri Edwards, Igor Babuschkin, Vedant Misra

Бонус: доказательства

Следствие из липшицевости градиента

Липшицевость градиента означает:

$$f(x_{k+1}) \leq f(x_k) + \langle \nabla f(x_k), x_{k+1} - x_k \rangle + \frac{L}{2} \|x_{k+1} - x_k\|^2$$

Следствие из липшицевости градиента

Липшицевость градиента означает:

$$f(x_{k+1}) \leq f(x_k) + \langle \nabla f(x_k), x_{k+1} - x_k \rangle + \frac{L}{2} \|x_{k+1} - x_k\|^2$$

Используя (SGD):

$$f(x_{k+1}) \leq f(x_k) - \alpha_k \langle \nabla f(x_k), \nabla f_{i_k}(x_k) \rangle + \alpha_k^2 \frac{L}{2} \|\nabla f_{i_k}(x_k)\|^2$$

Следствие из липшицевости градиента

Липшицевость градиента означает:

$$f(x_{k+1}) \leq f(x_k) + \langle \nabla f(x_k), x_{k+1} - x_k \rangle + \frac{L}{2} \|x_{k+1} - x_k\|^2$$

Используя (SGD):

$$f(x_{k+1}) \leq f(x_k) - \alpha_k \langle \nabla f(x_k), \nabla f_{i_k}(x_k) \rangle + \alpha_k^2 \frac{L}{2} \|\nabla f_{i_k}(x_k)\|^2$$

Теперь возьмем матожидание по i_k :

$$\mathbb{E}[f(x_{k+1})] \leq \mathbb{E}[f(x_k) - \alpha_k \langle \nabla f(x_k), \nabla f_{i_k}(x_k) \rangle + \alpha_k^2 \frac{L}{2} \|\nabla f_{i_k}(x_k)\|^2]$$

Следствие из липшицевости градиента

Липшицевость градиента означает:

$$f(x_{k+1}) \leq f(x_k) + \langle \nabla f(x_k), x_{k+1} - x_k \rangle + \frac{L}{2} \|x_{k+1} - x_k\|^2$$

Используя (SGD):

$$f(x_{k+1}) \leq f(x_k) - \alpha_k \langle \nabla f(x_k), \nabla f_{i_k}(x_k) \rangle + \alpha_k^2 \frac{L}{2} \|\nabla f_{i_k}(x_k)\|^2$$

Теперь возьмем матожидание по i_k :

$$\mathbb{E}[f(x_{k+1})] \leq \mathbb{E}[f(x_k) - \alpha_k \langle \nabla f(x_k), \nabla f_{i_k}(x_k) \rangle + \alpha_k^2 \frac{L}{2} \|\nabla f_{i_k}(x_k)\|^2]$$

Используя линейность матожидания:

$$\mathbb{E}[f(x_{k+1})] \leq f(x_k) - \alpha_k \langle \nabla f(x_k), \mathbb{E}[\nabla f_{i_k}(x_k)] \rangle + \alpha_k^2 \frac{L}{2} \mathbb{E}[\|\nabla f_{i_k}(x_k)\|^2]$$

Следствие из липшицевости градиента

Липшицевость градиента означает:

$$f(x_{k+1}) \leq f(x_k) + \langle \nabla f(x_k), x_{k+1} - x_k \rangle + \frac{L}{2} \|x_{k+1} - x_k\|^2$$

Используя (SGD):

$$f(x_{k+1}) \leq f(x_k) - \alpha_k \langle \nabla f(x_k), \nabla f_{i_k}(x_k) \rangle + \alpha_k^2 \frac{L}{2} \|\nabla f_{i_k}(x_k)\|^2$$

Теперь возьмем матожидание по i_k :

$$\mathbb{E}[f(x_{k+1})] \leq \mathbb{E}[f(x_k) - \alpha_k \langle \nabla f(x_k), \nabla f_{i_k}(x_k) \rangle + \alpha_k^2 \frac{L}{2} \|\nabla f_{i_k}(x_k)\|^2]$$

Используя линейность матожидания:

$$\mathbb{E}[f(x_{k+1})] \leq f(x_k) - \alpha_k \langle \nabla f(x_k), \mathbb{E}[\nabla f_{i_k}(x_k)] \rangle + \alpha_k^2 \frac{L}{2} \mathbb{E}[\|\nabla f_{i_k}(x_k)\|^2]$$

Поскольку равномерное выборочное распределение означает несмещенную оценку градиента: $\mathbb{E}[\nabla f_{i_k}(x_k)] = \nabla f(x_k)$:

$$\mathbb{E}[f(x_{k+1})] \leq f(x_k) - \alpha_k \|\nabla f(x_k)\|^2 + \alpha_k^2 \frac{L}{2} \mathbb{E}[\|\nabla f_{i_k}(x_k)\|^2] \tag{1}$$

Сходимость. Гладкий PL-случай.

i Пусть f — L -гладкая функция, удовлетворяющая условию Поляка-Лоясиевича (PL) с константой $\mu > 0$, а дисперсия стохастического градиента ограничена: $\mathbb{E}[\|\nabla f_i(x_k)\|^2] \leq \sigma^2$. Тогда стохастический градиентный спуск с постоянным шагом $\alpha < \frac{1}{2\mu}$ гарантирует

$$\mathbb{E}[f(x_k) - f^*] \leq (1 - 2\alpha\mu)^k [f(x_0) - f^*] + \frac{L\sigma^2\alpha}{4\mu}.$$

Начнем с неравенства (1):

$$\mathbb{E}[f(x_{k+1})] \leq f(x_k) - \alpha_k \|\nabla f(x_k)\|^2 + \alpha_k^2 \frac{L}{2} \mathbb{E}[\|\nabla f_{i_k}(x_k)\|^2]$$

Сходимость. Гладкий PL-случай.

i Пусть f — L -гладкая функция, удовлетворяющая условию Поляка-Лоясиевича (PL) с константой $\mu > 0$, а дисперсия стохастического градиента ограничена: $\mathbb{E}[\|\nabla f_i(x_k)\|^2] \leq \sigma^2$. Тогда стохастический градиентный спуск с постоянным шагом $\alpha < \frac{1}{2\mu}$ гарантирует

$$\mathbb{E}[f(x_k) - f^*] \leq (1 - 2\alpha\mu)^k [f(x_0) - f^*] + \frac{L\sigma^2\alpha}{4\mu}.$$

Начнем с неравенства (1):

$$\mathbb{E}[f(x_{k+1})] \leq f(x_k) - \alpha_k \|\nabla f(x_k)\|^2 + \alpha_k^2 \frac{L}{2} \mathbb{E}[\|\nabla f_{i_k}(x_k)\|^2]$$

$$\text{PL: } \|\nabla f(x_k)\|^2 \geq 2\mu(f(x_k) - f^*)$$

Сходимость. Гладкий PL-случай.

i Пусть f — L -гладкая функция, удовлетворяющая условию Поляка-Лоясиевича (PL) с константой $\mu > 0$, а дисперсия стохастического градиента ограничена: $\mathbb{E}[\|\nabla f_i(x_k)\|^2] \leq \sigma^2$. Тогда стохастический градиентный спуск с постоянным шагом $\alpha < \frac{1}{2\mu}$ гарантирует

$$\mathbb{E}[f(x_k) - f^*] \leq (1 - 2\alpha\mu)^k [f(x_0) - f^*] + \frac{L\sigma^2\alpha}{4\mu}.$$

Начнем с неравенства (1):

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[f(x_{k+1})] &\leq f(x_k) - \alpha_k \|\nabla f(x_k)\|^2 + \alpha_k^2 \frac{L}{2} \mathbb{E}[\|\nabla f_{i_k}(x_k)\|^2] \\ \text{PL: } \|\nabla f(x_k)\|^2 \geq 2\mu(f(x_k) - f^*) &\leq f(x_k) - 2\alpha_k \mu(f(x_k) - f^*) + \alpha_k^2 \frac{L}{2} \mathbb{E}[\|\nabla f_{i_k}(x_k)\|^2] \end{aligned}$$

Сходимость. Гладкий PL-случай.

i Пусть f — L -гладкая функция, удовлетворяющая условию Поляка-Лоясиевича (PL) с константой $\mu > 0$, а дисперсия стохастического градиента ограничена: $\mathbb{E}[\|\nabla f_i(x_k)\|^2] \leq \sigma^2$. Тогда стохастический градиентный спуск с постоянным шагом $\alpha < \frac{1}{2\mu}$ гарантирует

$$\mathbb{E}[f(x_k) - f^*] \leq (1 - 2\alpha\mu)^k [f(x_0) - f^*] + \frac{L\sigma^2\alpha}{4\mu}.$$

Начнем с неравенства (1):

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[f(x_{k+1})] &\leq f(x_k) - \alpha_k \|\nabla f(x_k)\|^2 + \alpha_k^2 \frac{L}{2} \mathbb{E}[\|\nabla f_{i_k}(x_k)\|^2] \\ \text{PL: } \|\nabla f(x_k)\|^2 &\geq 2\mu(f(x_k) - f^*) \quad \leq f(x_k) - 2\alpha_k \mu(f(x_k) - f^*) + \alpha_k^2 \frac{L}{2} \mathbb{E}[\|\nabla f_{i_k}(x_k)\|^2] \end{aligned}$$

Вычтем f^*

Сходимость. Гладкий PL-случай.

i Пусть f — L -гладкая функция, удовлетворяющая условию Поляка-Лоясиевича (PL) с константой $\mu > 0$, а дисперсия стохастического градиента ограничена: $\mathbb{E}[\|\nabla f_i(x_k)\|^2] \leq \sigma^2$. Тогда стохастический градиентный спуск с постоянным шагом $\alpha < \frac{1}{2\mu}$ гарантирует

$$\mathbb{E}[f(x_k) - f^*] \leq (1 - 2\alpha\mu)^k [f(x_0) - f^*] + \frac{L\sigma^2\alpha}{4\mu}.$$

Начнем с неравенства (1):

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[f(x_{k+1})] &\leq f(x_k) - \alpha_k \|\nabla f(x_k)\|^2 + \alpha_k^2 \frac{L}{2} \mathbb{E}[\|\nabla f_{i_k}(x_k)\|^2] \\ \text{PL: } \|\nabla f(x_k)\|^2 \geq 2\mu(f(x_k) - f^*) &\leq f(x_k) - 2\alpha_k \mu(f(x_k) - f^*) + \alpha_k^2 \frac{L}{2} \mathbb{E}[\|\nabla f_{i_k}(x_k)\|^2] \\ \text{Вычтем } f^* \quad \mathbb{E}[f(x_{k+1})] - f^* &\leq (f(x_k) - f^*) - 2\alpha_k \mu(f(x_k) - f^*) + \alpha_k^2 \frac{L}{2} \mathbb{E}[\|\nabla f_{i_k}(x_k)\|^2] \end{aligned}$$

Сходимость. Гладкий PL-случай.

i Пусть f — L -гладкая функция, удовлетворяющая условию Поляка-Лоясиевича (PL) с константой $\mu > 0$, а дисперсия стохастического градиента ограничена: $\mathbb{E}[\|\nabla f_i(x_k)\|^2] \leq \sigma^2$. Тогда стохастический градиентный спуск с постоянным шагом $\alpha < \frac{1}{2\mu}$ гарантирует

$$\mathbb{E}[f(x_k) - f^*] \leq (1 - 2\alpha\mu)^k [f(x_0) - f^*] + \frac{L\sigma^2\alpha}{4\mu}.$$

Начнем с неравенства (1):

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[f(x_{k+1})] &\leq f(x_k) - \alpha_k \|\nabla f(x_k)\|^2 + \alpha_k^2 \frac{L}{2} \mathbb{E}[\|\nabla f_{i_k}(x_k)\|^2] \\ \text{PL: } \|\nabla f(x_k)\|^2 \geq 2\mu(f(x_k) - f^*) &\leq f(x_k) - 2\alpha_k \mu(f(x_k) - f^*) + \alpha_k^2 \frac{L}{2} \mathbb{E}[\|\nabla f_{i_k}(x_k)\|^2] \\ \text{Вычтем } f^* \quad \mathbb{E}[f(x_{k+1})] - f^* &\leq (f(x_k) - f^*) - 2\alpha_k \mu(f(x_k) - f^*) + \alpha_k^2 \frac{L}{2} \mathbb{E}[\|\nabla f_{i_k}(x_k)\|^2] \\ \text{Переставляем} \quad &\leq (1 - 2\alpha_k \mu)[f(x_k) - f^*] + \alpha_k^2 \frac{L}{2} \mathbb{E}[\|\nabla f_{i_k}(x_k)\|^2] \end{aligned}$$

Сходимость. Гладкий PL-случай.

i Пусть f — L -гладкая функция, удовлетворяющая условию Поляка-Лоясиевича (PL) с константой $\mu > 0$, а дисперсия стохастического градиента ограничена: $\mathbb{E}[\|\nabla f_i(x_k)\|^2] \leq \sigma^2$. Тогда стохастический градиентный спуск с постоянным шагом $\alpha < \frac{1}{2\mu}$ гарантирует

$$\mathbb{E}[f(x_k) - f^*] \leq (1 - 2\alpha\mu)^k [f(x_0) - f^*] + \frac{L\sigma^2\alpha}{4\mu}.$$

Начнем с неравенства (1):

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[f(x_{k+1})] &\leq f(x_k) - \alpha_k \|\nabla f(x_k)\|^2 + \alpha_k^2 \frac{L}{2} \mathbb{E}[\|\nabla f_{i_k}(x_k)\|^2] \\ \text{PL: } \|\nabla f(x_k)\|^2 &\geq 2\mu(f(x_k) - f^*) \quad \leq f(x_k) - 2\alpha_k \mu(f(x_k) - f^*) + \alpha_k^2 \frac{L}{2} \mathbb{E}[\|\nabla f_{i_k}(x_k)\|^2] \\ \text{Вычтем } f^* \quad \mathbb{E}[f(x_{k+1})] - f^* &\leq (f(x_k) - f^*) - 2\alpha_k \mu(f(x_k) - f^*) + \alpha_k^2 \frac{L}{2} \mathbb{E}[\|\nabla f_{i_k}(x_k)\|^2] \\ \text{Переставляем} \quad &\leq (1 - 2\alpha_k \mu)[f(x_k) - f^*] + \alpha_k^2 \frac{L}{2} \mathbb{E}[\|\nabla f_{i_k}(x_k)\|^2] \end{aligned}$$

Ограниченност дисперсии: $\mathbb{E}[\|\nabla f_i(x_k)\|^2] \leq \sigma^2$

Сходимость. Гладкий PL-случай.

i Пусть f — L -гладкая функция, удовлетворяющая условию Поляка-Лоясиевича (PL) с константой $\mu > 0$, а дисперсия стохастического градиента ограничена: $\mathbb{E}[\|\nabla f_i(x_k)\|^2] \leq \sigma^2$. Тогда стохастический градиентный спуск с постоянным шагом $\alpha < \frac{1}{2\mu}$ гарантирует

$$\mathbb{E}[f(x_k) - f^*] \leq (1 - 2\alpha\mu)^k [f(x_0) - f^*] + \frac{L\sigma^2\alpha}{4\mu}.$$

Начнем с неравенства (1):

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[f(x_{k+1})] &\leq f(x_k) - \alpha_k \|\nabla f(x_k)\|^2 + \alpha_k^2 \frac{L}{2} \mathbb{E}[\|\nabla f_{i_k}(x_k)\|^2] \\ \text{PL: } \|\nabla f(x_k)\|^2 &\geq 2\mu(f(x_k) - f^*) \quad \leq f(x_k) - 2\alpha_k \mu(f(x_k) - f^*) + \alpha_k^2 \frac{L}{2} \mathbb{E}[\|\nabla f_{i_k}(x_k)\|^2] \\ \text{Вычтем } f^* \quad \mathbb{E}[f(x_{k+1})] - f^* &\leq (f(x_k) - f^*) - 2\alpha_k \mu(f(x_k) - f^*) + \alpha_k^2 \frac{L}{2} \mathbb{E}[\|\nabla f_{i_k}(x_k)\|^2] \\ \text{Переставляем} \quad &\leq (1 - 2\alpha_k \mu)[f(x_k) - f^*] + \alpha_k^2 \frac{L}{2} \mathbb{E}[\|\nabla f_{i_k}(x_k)\|^2] \\ \text{Ограниченност дисперсии: } \mathbb{E}[\|\nabla f_i(x_k)\|^2] &\leq \sigma^2 \quad \leq (1 - 2\alpha_k \mu)[f(x_k) - f^*] + \frac{L\sigma^2\alpha_k^2}{2}. \end{aligned}$$

Сходимость. Гладкий PL-случай.

i Пусть f — L -гладкая функция, удовлетворяющая условию Поляка-Лоясиевича (PL) с константой $\mu > 0$, а дисперсия стохастического градиента ограничена: $\mathbb{E}[\|\nabla f_i(x_k)\|^2] \leq \sigma^2$. Тогда стохастический градиентный спуск с убывающим шагом $\alpha_k = \frac{2k+1}{2\mu(k+1)^2}$ гарантирует

$$\mathbb{E}[f(x_k) - f^*] \leq \frac{L\sigma^2}{2\mu^2 k}$$

1. Рассмотрим стратегию **убывающего шага** с $\alpha_k = \frac{2k+1}{2\mu(k+1)^2}$, тогда мы получаем

Сходимость. Гладкий PL-случай.

i Пусть f — L -гладкая функция, удовлетворяющая условию Поляка-Лоясиевича (PL) с константой $\mu > 0$, а дисперсия стохастического градиента ограничена: $\mathbb{E}[\|\nabla f_i(x_k)\|^2] \leq \sigma^2$. Тогда стохастический градиентный спуск с убывающим шагом $\alpha_k = \frac{2k+1}{2\mu(k+1)^2}$ гарантирует

$$\mathbb{E}[f(x_k) - f^*] \leq \frac{L\sigma^2}{2\mu^2 k}$$

1. Рассмотрим стратегию **убывающего шага** с $\alpha_k = \frac{2k+1}{2\mu(k+1)^2}$, тогда мы получаем

$$1 - 2\alpha_k \mu = \frac{(k+1)^2}{(k+1)^2} - \frac{2k+1}{(k+1)^2} = \frac{k^2}{(k+1)^2}$$

Сходимость. Гладкий PL-случай.

i Пусть f — L -гладкая функция, удовлетворяющая условию Поляка-Лоясиевича (PL) с константой $\mu > 0$, а дисперсия стохастического градиента ограничена: $\mathbb{E}[\|\nabla f_i(x_k)\|^2] \leq \sigma^2$. Тогда стохастический градиентный спуск с убывающим шагом $\alpha_k = \frac{2k+1}{2\mu(k+1)^2}$ гарантирует

$$\mathbb{E}[f(x_k) - f^*] \leq \frac{L\sigma^2}{2\mu^2 k}$$

1. Рассмотрим стратегию **убывающего шага** с $\alpha_k = \frac{2k+1}{2\mu(k+1)^2}$, тогда мы получаем

$$1 - 2\alpha_k \mu = \frac{(k+1)^2}{(k+1)^2} - \frac{2k+1}{(k+1)^2} = \frac{k^2}{(k+1)^2} \quad \mathbb{E}[f(x_{k+1}) - f^*] \leq \frac{k^2}{(k+1)^2} [f(x_k) - f^*] + \frac{L\sigma^2(2k+1)^2}{8\mu^2(k+1)^4}$$

Сходимость. Гладкий PL-случай.

i Пусть f — L -гладкая функция, удовлетворяющая условию Поляка-Лоясиевича (PL) с константой $\mu > 0$, а дисперсия стохастического градиента ограничена: $\mathbb{E}[\|\nabla f_i(x_k)\|^2] \leq \sigma^2$. Тогда стохастический градиентный спуск с убывающим шагом $\alpha_k = \frac{2k+1}{2\mu(k+1)^2}$ гарантирует

$$\mathbb{E}[f(x_k) - f^*] \leq \frac{L\sigma^2}{2\mu^2 k}$$

1. Рассмотрим стратегию **убывающего шага** с $\alpha_k = \frac{2k+1}{2\mu(k+1)^2}$, тогда мы получаем

$$\begin{aligned} 1 - 2\alpha_k \mu &= \frac{(k+1)^2}{(k+1)^2} - \frac{2k+1}{(k+1)^2} = \frac{k^2}{(k+1)^2} & \mathbb{E}[f(x_{k+1}) - f^*] &\leq \frac{k^2}{(k+1)^2} [f(x_k) - f^*] + \frac{L\sigma^2(2k+1)^2}{8\mu^2(k+1)^4} \\ (2k+1)^2 < (2k+2)^2 = 4(k+1)^2 && &\leq \frac{k^2}{(k+1)^2} [f(x_k) - f^*] + \frac{L\sigma^2}{2\mu^2(k+1)^2} \end{aligned}$$

Сходимость. Гладкий PL-случай.

i Пусть f — L -гладкая функция, удовлетворяющая условию Поляка-Лоясиевича (PL) с константой $\mu > 0$, а дисперсия стохастического градиента ограничена: $\mathbb{E}[\|\nabla f_i(x_k)\|^2] \leq \sigma^2$. Тогда стохастический градиентный спуск с убывающим шагом $\alpha_k = \frac{2k+1}{2\mu(k+1)^2}$ гарантирует

$$\mathbb{E}[f(x_k) - f^*] \leq \frac{L\sigma^2}{2\mu^2 k}$$

1. Рассмотрим стратегию **убывающего шага** с $\alpha_k = \frac{2k+1}{2\mu(k+1)^2}$, тогда мы получаем

$$\begin{aligned} 1 - 2\alpha_k \mu &= \frac{(k+1)^2}{(k+1)^2} - \frac{2k+1}{(k+1)^2} = \frac{k^2}{(k+1)^2} & \mathbb{E}[f(x_{k+1}) - f^*] &\leq \frac{k^2}{(k+1)^2} [f(x_k) - f^*] + \frac{L\sigma^2(2k+1)^2}{8\mu^2(k+1)^4} \\ (2k+1)^2 &< (2k+2)^2 = 4(k+1)^2 & \leq \frac{k^2}{(k+1)^2} [f(x_k) - f^*] + \frac{L\sigma^2}{2\mu^2(k+1)^2} \end{aligned}$$

2. Умножив обе части на $(k+1)^2$ и пусть $\delta_f(k) \equiv k^2 \mathbb{E}[f(x_k) - f^*]$ мы получаем

$$\begin{aligned} (k+1)^2 \mathbb{E}[f(x_{k+1}) - f^*] &\leq k^2 \mathbb{E}[f(x_k) - f^*] + \frac{L\sigma^2}{2\mu^2} \\ \delta_f(k+1) &\leq \delta_f(k) + \frac{L\sigma^2}{2\mu^2}. \end{aligned}$$

Сходимость. Гладкий PL-случай.

3. Просуммируем предыдущее неравенство от $i = 0$ до k и используем тот факт, что $\delta_f(0) = 0$ мы получаем

которое дает указанную скорость.

Сходимость. Гладкий PL-случай.

3. Просуммируем предыдущее неравенство от $i = 0$ до k и используем тот факт, что $\delta_f(0) = 0$ мы получаем

$$\delta_f(i+1) \leq \delta_f(i) + \frac{L\sigma^2}{2\mu^2}$$

которое дает указанную скорость.

Сходимость. Гладкий PL-случай.

3. Просуммируем предыдущее неравенство от $i = 0$ до k и используем тот факт, что $\delta_f(0) = 0$ мы получаем

$$\delta_f(i+1) \leq \delta_f(i) + \frac{L\sigma^2}{2\mu^2}$$

$$\sum_{i=0}^k [\delta_f(i+1) - \delta_f(i)] \leq \sum_{i=0}^k \frac{L\sigma^2}{2\mu^2}$$

которое дает указанную скорость.

Сходимость. Гладкий PL-случай.

3. Просуммируем предыдущее неравенство от $i = 0$ до k и используем тот факт, что $\delta_f(0) = 0$ мы получаем

$$\delta_f(i+1) \leq \delta_f(i) + \frac{L\sigma^2}{2\mu^2}$$

$$\sum_{i=0}^k [\delta_f(i+1) - \delta_f(i)] \leq \sum_{i=0}^k \frac{L\sigma^2}{2\mu^2}$$

$$\delta_f(k+1) - \delta_f(0) \leq \frac{L\sigma^2(k+1)}{2\mu^2}$$

которое дает указанную скорость.

Сходимость. Гладкий PL-случай.

3. Просуммируем предыдущее неравенство от $i = 0$ до k и используем тот факт, что $\delta_f(0) = 0$ мы получаем

$$\delta_f(i+1) \leq \delta_f(i) + \frac{L\sigma^2}{2\mu^2}$$

$$\sum_{i=0}^k [\delta_f(i+1) - \delta_f(i)] \leq \sum_{i=0}^k \frac{L\sigma^2}{2\mu^2}$$

$$\delta_f(k+1) - \delta_f(0) \leq \frac{L\sigma^2(k+1)}{2\mu^2}$$

$$(k+1)^2 \mathbb{E}[f(x_{k+1}) - f^*] \leq \frac{L\sigma^2(k+1)}{2\mu^2}$$

которое дает указанную скорость.

Сходимость. Гладкий PL-случай.

3. Просуммируем предыдущее неравенство от $i = 0$ до k и используем тот факт, что $\delta_f(0) = 0$ мы получаем

$$\delta_f(i+1) \leq \delta_f(i) + \frac{L\sigma^2}{2\mu^2}$$

$$\sum_{i=0}^k [\delta_f(i+1) - \delta_f(i)] \leq \sum_{i=0}^k \frac{L\sigma^2}{2\mu^2}$$

$$\delta_f(k+1) - \delta_f(0) \leq \frac{L\sigma^2(k+1)}{2\mu^2}$$

$$(k+1)^2 \mathbb{E}[f(x_{k+1}) - f^*] \leq \frac{L\sigma^2(k+1)}{2\mu^2}$$

$$\mathbb{E}[f(x_k) - f^*] \leq \frac{L\sigma^2}{2\mu^2 k}$$

которое дает указанную скорость.

Сходимость. Гладкий выпуклый случай с постоянным шагом

i Пусть f — выпуклая функция (не обязательно гладкая), а дисперсия стохастического градиента ограничена $\mathbb{E}[\|\nabla f_{i_k}(x_k)\|^2] \leq \sigma^2 \quad \forall k$. Если SGD использует постоянный шаг $\alpha_t \equiv \alpha > 0$, то для любого $k \geq 1$

$$\mathbb{E}[f(\bar{x}_k) - f^*] \leq \frac{\|x_0 - x^*\|^2}{2\alpha k} + \frac{\alpha \sigma^2}{2}$$

где $\bar{x}_k = \frac{1}{k} \sum_{t=0}^{k-1} x_t$.

При выборе постоянного $\alpha = \frac{\|x_0 - x^*\|}{\sigma\sqrt{k}}$ (зависящего от k) имеем

$$\mathbb{E}[f(\bar{x}_k) - f^*] \leq \frac{\|x_0 - x^*\|\sigma}{\sqrt{k}} = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\sqrt{k}}\right).$$

Сходимость. Гладкий выпуклый случай с постоянным шагом

1. Начнём с разложения квадрата расстояния до минимума:

$$\|x_{k+1} - x^*\|^2 = \|x_k - \alpha \nabla f_{i_k}(x_k) - x^*\|^2 = \|x_k - x^*\|^2 - 2\alpha \langle \nabla f_{i_k}(x_k), x_k - x^* \rangle + \alpha^2 \|\nabla f_{i_k}(x_k)\|^2.$$

Сходимость. Гладкий выпуклый случай с постоянным шагом

- Начнём с разложения квадрата расстояния до минимума:

$$\|x_{k+1} - x^*\|^2 = \|x_k - \alpha \nabla f_{i_k}(x_k) - x^*\|^2 = \|x_k - x^*\|^2 - 2\alpha \langle \nabla f_{i_k}(x_k), x_k - x^* \rangle + \alpha^2 \|\nabla f_{i_k}(x_k)\|^2.$$

- Берём условное матожидание по i_k (обозначим $\mathbb{E}_k[\cdot] = \mathbb{E}[\cdot | x_k]$), используем свойство $\mathbb{E}_k[\nabla f_{i_k}(x_k)] = \nabla f(x_k)$, ограниченность дисперсии $\mathbb{E}_k[\|\nabla f_{i_k}(x_k)\|^2] \leq \sigma^2$ и выпуклость f (которая даёт $\langle \nabla f(x_k), x_k - x^* \rangle \geq f(x_k) - f^*$):

$$\begin{aligned}\mathbb{E}_k[\|x_{k+1} - x^*\|^2] &= \|x_k - x^*\|^2 - 2\alpha \langle \nabla f(x_k), x_k - x^* \rangle + \alpha^2 \mathbb{E}_k[\|\nabla f_{i_k}(x_k)\|^2] \\ &\leq \|x_k - x^*\|^2 - 2\alpha(f(x_k) - f^*) + \alpha^2 \sigma^2.\end{aligned}$$

Сходимость. Гладкий выпуклый случай с постоянным шагом

- Начнём с разложения квадрата расстояния до минимума:

$$\|x_{k+1} - x^*\|^2 = \|x_k - \alpha \nabla f_{i_k}(x_k) - x^*\|^2 = \|x_k - x^*\|^2 - 2\alpha \langle \nabla f_{i_k}(x_k), x_k - x^* \rangle + \alpha^2 \|\nabla f_{i_k}(x_k)\|^2.$$

- Берём условное матожидание по i_k (обозначим $\mathbb{E}_k[\cdot] = \mathbb{E}[\cdot|x_k]$), используем свойство $\mathbb{E}_k[\nabla f_{i_k}(x_k)] = \nabla f(x_k)$, ограниченность дисперсии $\mathbb{E}_k[\|\nabla f_{i_k}(x_k)\|^2] \leq \sigma^2$ и выпукłość f (которая даёт $\langle \nabla f(x_k), x_k - x^* \rangle \geq f(x_k) - f^*$):

$$\begin{aligned}\mathbb{E}_k[\|x_{k+1} - x^*\|^2] &= \|x_k - x^*\|^2 - 2\alpha \langle \nabla f(x_k), x_k - x^* \rangle + \alpha^2 \mathbb{E}_k[\|\nabla f_{i_k}(x_k)\|^2] \\ &\leq \|x_k - x^*\|^2 - 2\alpha(f(x_k) - f^*) + \alpha^2 \sigma^2.\end{aligned}$$

- Переносим слагаемое с $f(x_k)$ влево и берём полное матожидание:

$$2\alpha \mathbb{E}[f(x_k) - f^*] \leq \mathbb{E}[\|x_k - x^*\|^2] - \mathbb{E}[\|x_{k+1} - x^*\|^2] + \alpha^2 \sigma^2.$$

Сходимость. Гладкий выпуклый случай с постоянным шагом

1. Начнём с разложения квадрата расстояния до минимума:

$$\|x_{k+1} - x^*\|^2 = \|x_k - \alpha \nabla f_{i_k}(x_k) - x^*\|^2 = \|x_k - x^*\|^2 - 2\alpha \langle \nabla f_{i_k}(x_k), x_k - x^* \rangle + \alpha^2 \|\nabla f_{i_k}(x_k)\|^2.$$

2. Берём условное матожидание по i_k (обозначим $\mathbb{E}_k[\cdot] = \mathbb{E}[\cdot|x_k]$), используем свойство $\mathbb{E}_k[\nabla f_{i_k}(x_k)] = \nabla f(x_k)$, ограниченность дисперсии $\mathbb{E}_k[\|\nabla f_{i_k}(x_k)\|^2] \leq \sigma^2$ и выпукłość f (которая даёт $\langle \nabla f(x_k), x_k - x^* \rangle \geq f(x_k) - f^*$):

$$\begin{aligned}\mathbb{E}_k[\|x_{k+1} - x^*\|^2] &= \|x_k - x^*\|^2 - 2\alpha \langle \nabla f(x_k), x_k - x^* \rangle + \alpha^2 \mathbb{E}_k[\|\nabla f_{i_k}(x_k)\|^2] \\ &\leq \|x_k - x^*\|^2 - 2\alpha(f(x_k) - f^*) + \alpha^2 \sigma^2.\end{aligned}$$

3. Переносим слагаемое с $f(x_k)$ влево и берём полное матожидание:

$$2\alpha \mathbb{E}[f(x_k) - f^*] \leq \mathbb{E}[\|x_k - x^*\|^2] - \mathbb{E}[\|x_{k+1} - x^*\|^2] + \alpha^2 \sigma^2.$$

4. Суммируем (теслекопирем) по $t = 0, \dots, k-1$:

$$\begin{aligned}\sum_{t=0}^{k-1} 2\alpha \mathbb{E}[f(x_t) - f^*] &\leq \sum_{t=0}^{k-1} (\mathbb{E}[\|x_t - x^*\|^2] - \mathbb{E}[\|x_{t+1} - x^*\|^2]) + \sum_{t=0}^{k-1} \alpha^2 \sigma^2 \\ &= \mathbb{E}[\|x_0 - x^*\|^2] - \mathbb{E}[\|x_k - x^*\|^2] + k \alpha^2 \sigma^2 \\ &\leq \|x_0 - x^*\|^2 + k \alpha^2 \sigma^2.\end{aligned}$$

Сходимость. Гладкий выпуклый случай с постоянным шагом

5. Делим на $2\alpha k$:

$$\frac{1}{k} \sum_{t=0}^{k-1} \mathbb{E}[f(x_t) - f^*] \leq \frac{\|x_0 - x^*\|^2}{2\alpha k} + \frac{\alpha\sigma^2}{2}.$$

Сходимость. Гладкий выпуклый случай с постоянным шагом

5. Делим на $2\alpha k$:

$$\frac{1}{k} \sum_{t=0}^{k-1} \mathbb{E}[f(x_t) - f^*] \leq \frac{\|x_0 - x^*\|^2}{2\alpha k} + \frac{\alpha\sigma^2}{2}.$$

6. Используя выпуклость f и неравенство Йенсена для усреднённой точки $\bar{x}_k = \frac{1}{k} \sum_{t=0}^{k-1} x_t$:

$$\mathbb{E}[f(\bar{x}_k)] \leq \mathbb{E}\left[\frac{1}{k} \sum_{t=0}^{k-1} f(x_t)\right] = \frac{1}{k} \sum_{t=0}^{k-1} \mathbb{E}[f(x_t)].$$

Вычитая f^* из обеих частей, получаем:

$$\mathbb{E}[f(\bar{x}_k) - f^*] \leq \frac{1}{k} \sum_{t=0}^{k-1} \mathbb{E}[f(x_t) - f^*].$$

Сходимость. Гладкий выпуклый случай с постоянным шагом

5. Делим на $2\alpha k$:

$$\frac{1}{k} \sum_{t=0}^{k-1} \mathbb{E}[f(x_t) - f^*] \leq \frac{\|x_0 - x^*\|^2}{2\alpha k} + \frac{\alpha\sigma^2}{2}.$$

6. Используя выпуклость f и неравенство Йенсена для усреднённой точки $\bar{x}_k = \frac{1}{k} \sum_{t=0}^{k-1} x_t$:

$$\mathbb{E}[f(\bar{x}_k)] \leq \mathbb{E}\left[\frac{1}{k} \sum_{t=0}^{k-1} f(x_t)\right] = \frac{1}{k} \sum_{t=0}^{k-1} \mathbb{E}[f(x_t)].$$

Вычитая f^* из обеих частей, получаем:

$$\mathbb{E}[f(\bar{x}_k) - f^*] \leq \frac{1}{k} \sum_{t=0}^{k-1} \mathbb{E}[f(x_t) - f^*].$$

7. Объединяя (5) и (6), получаем искомую оценку:

$$\mathbb{E}[f(\bar{x}_k) - f^*] \leq \frac{\|x_0 - x^*\|^2}{2\alpha k} + \frac{\alpha\sigma^2}{2}.$$