

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:

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

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 для этой задачи записывается следующим образом:

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

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 для этой задачи записывается 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 линейным поиском.

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 для этой задачи записывается 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 линейным поиском.
- 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 для этой задачи записывается 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 линейным поиском.
- 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 для этой задачи записывается 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 линейным поиском.
- 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:

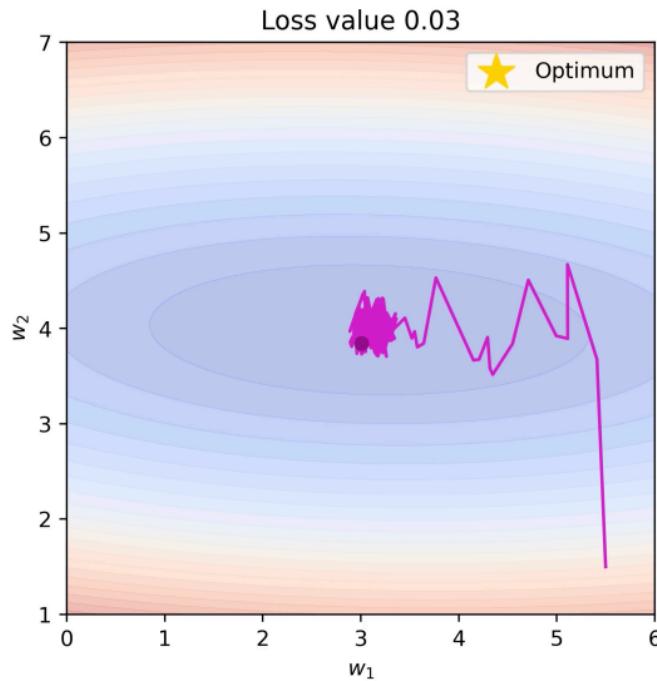
Предположение	Детерминированный градиентный спуск	Стохастический градиентный спуск
PL	$\mathcal{O}(\log(1/\varepsilon))$	$\mathcal{O}(1/\varepsilon)$
Выпуклый	$\mathcal{O}(1/\varepsilon)$	$\mathcal{O}(1/\varepsilon^2)$
Невыпуклый	$\mathcal{O}(1/\varepsilon)$	$\mathcal{O}(1/\varepsilon^2)$

- 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).

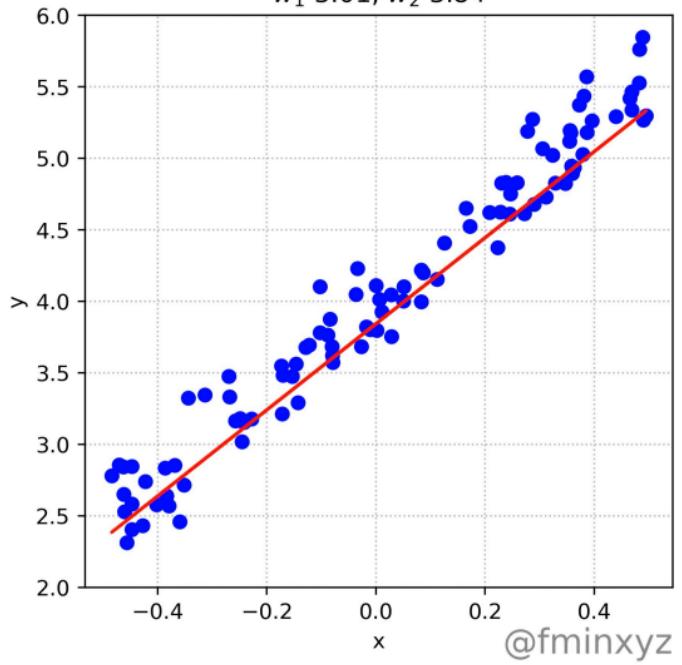
Стохастический градиентный спуск (SGD)

Типичное поведение

Stochastic Gradient Descent. Batch = 2



w_1 3.01, w_2 3.84



@fminxyz

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

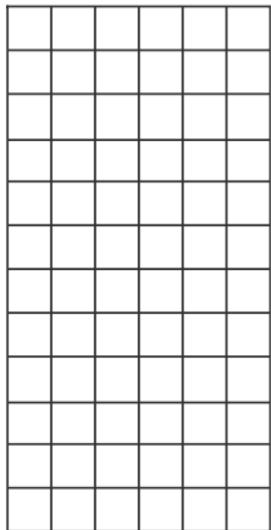
Оценка прогресса с $\alpha_k = \frac{1}{L}$ и ошибкой в градиенте e_k выглядит следующим образом:

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

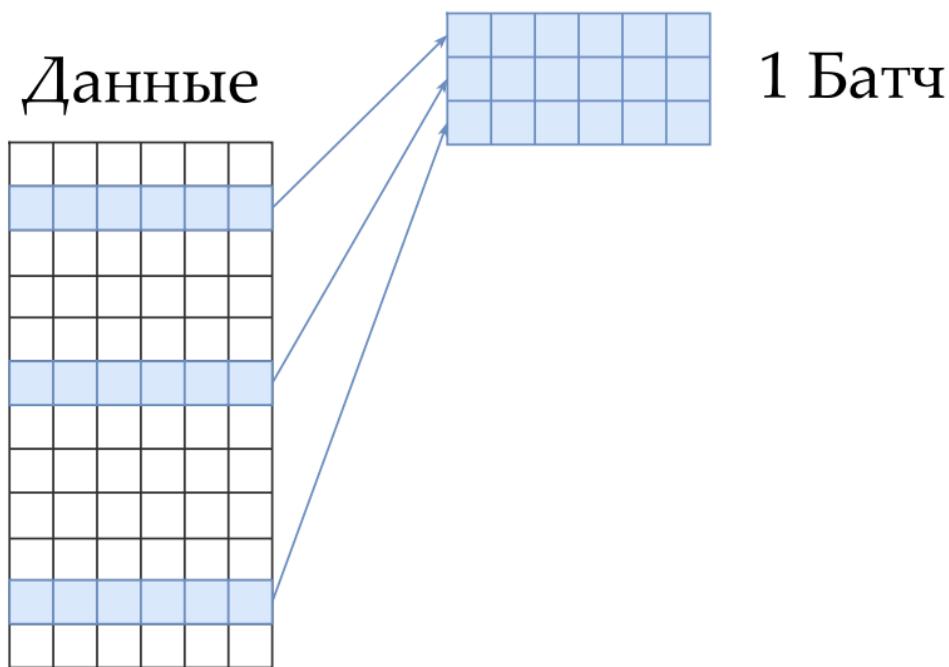
Идея SGD и батчей



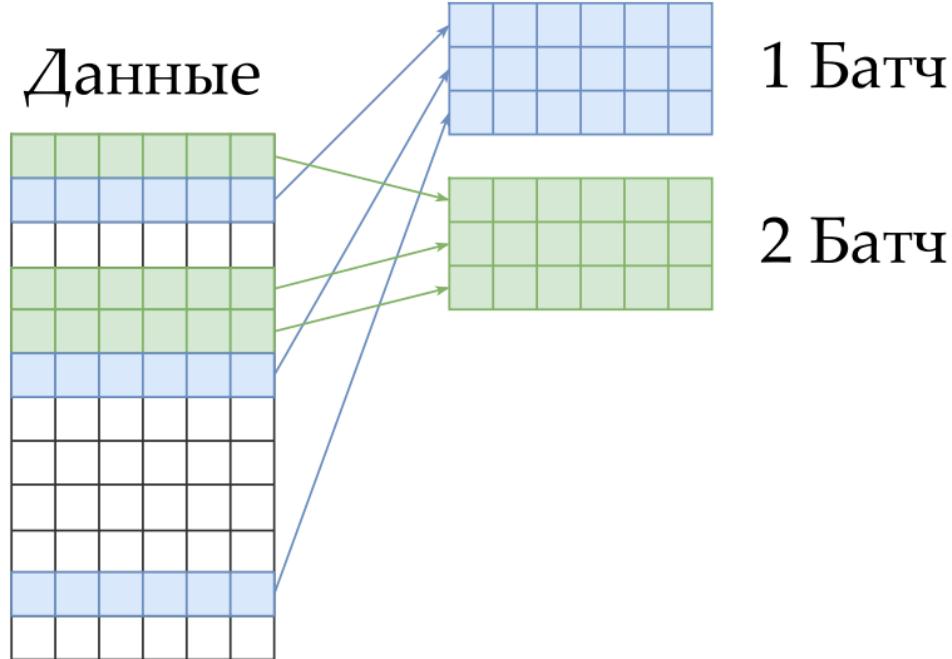
Данные



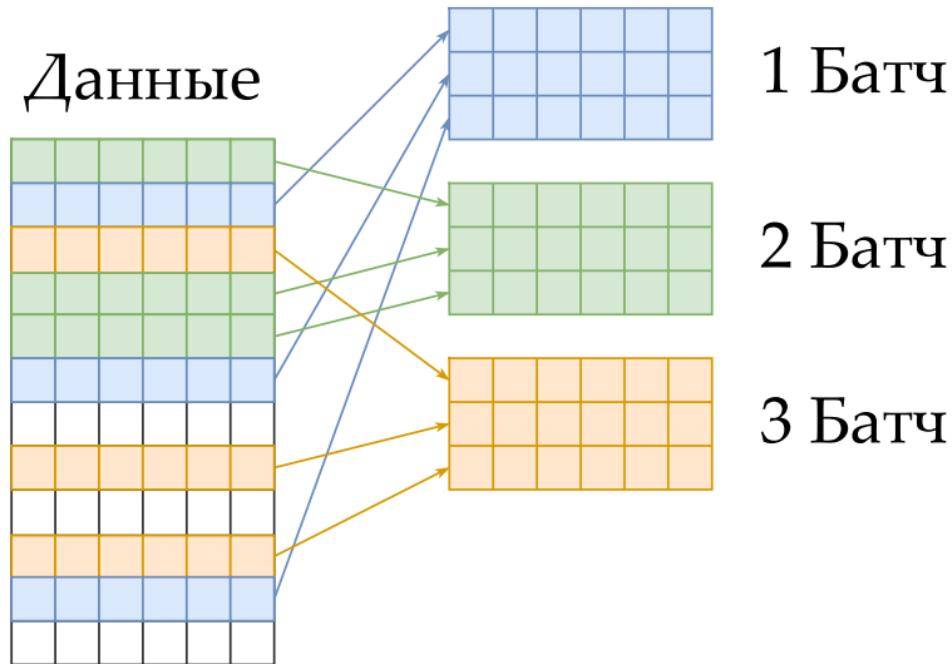
Идея SGD и батчей



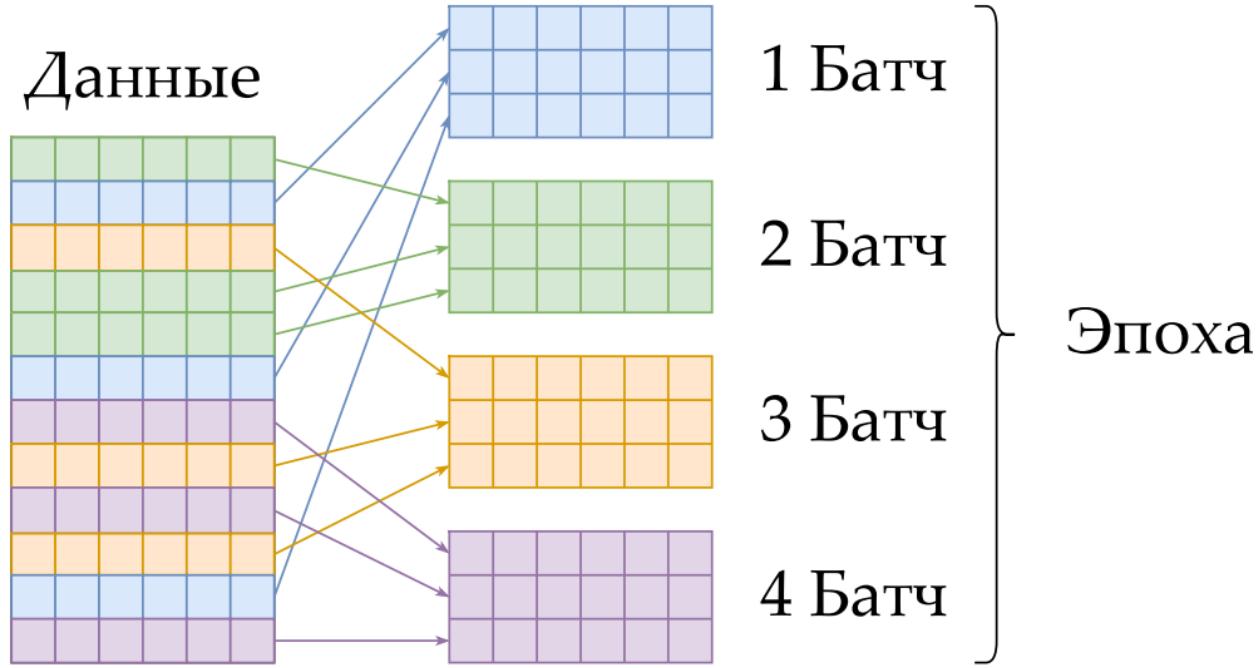
Идея SGD и батчей



Идея SGD и батчей



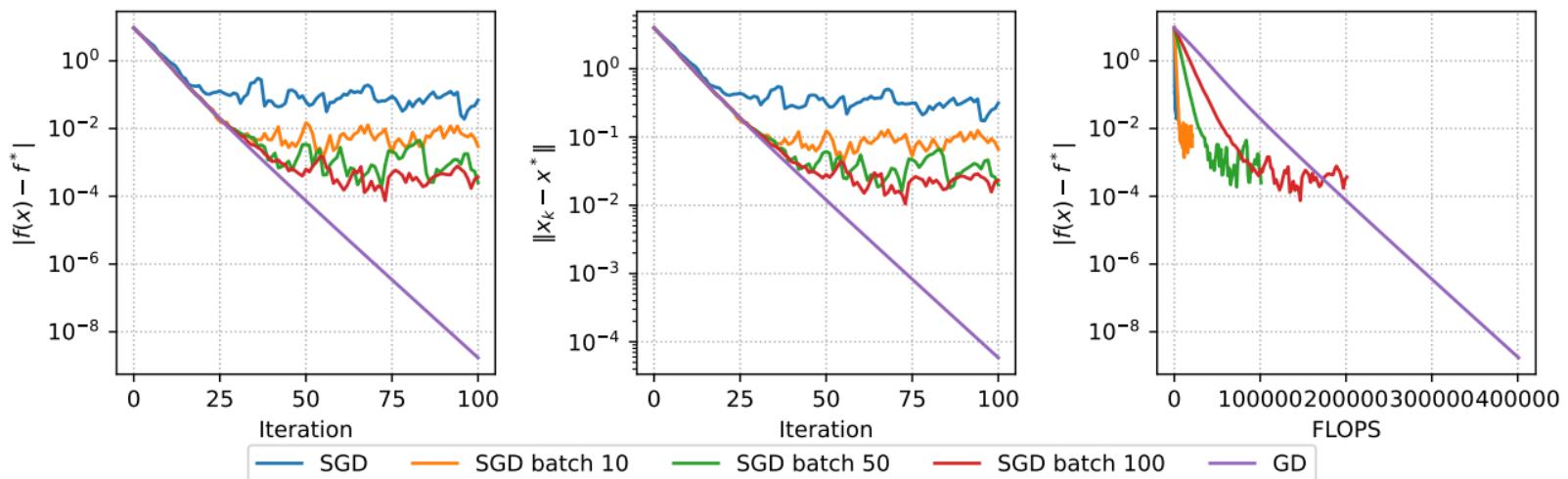
Идея SGD и батчей



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 $j = 1, \dots, p$:

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

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

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.

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 $j = 1, \dots, p$:

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

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.
- 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:

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

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

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

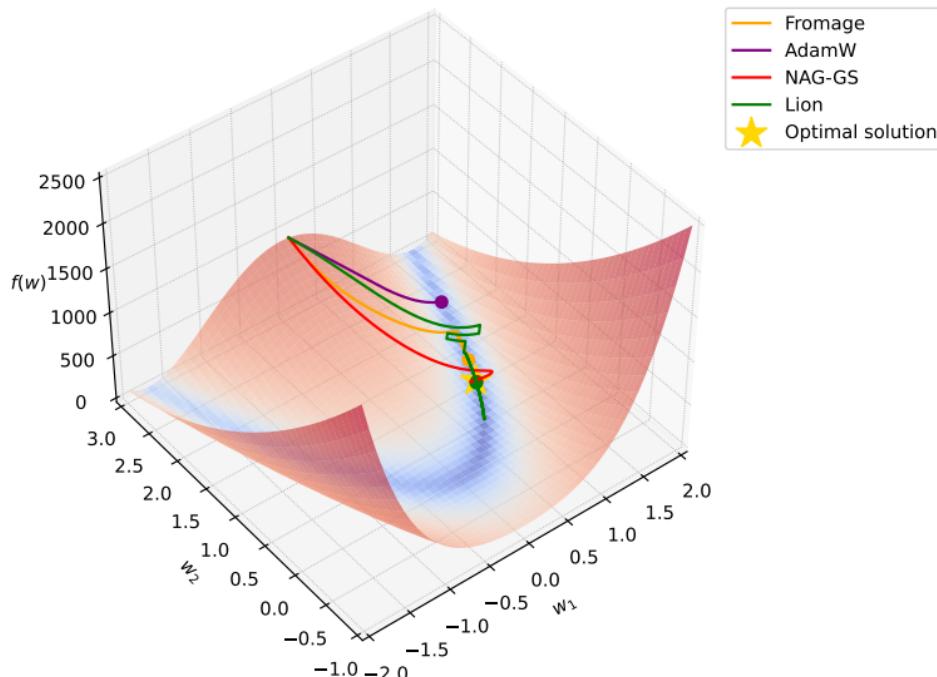
$$x_j^{(k)} = x_j^{(k-1)} - \alpha \left(\frac{\hat{m}_j}{\sqrt{\hat{v}_j} + \epsilon} + \lambda x_j^{(k-1)} \right)$$

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.

Много методов

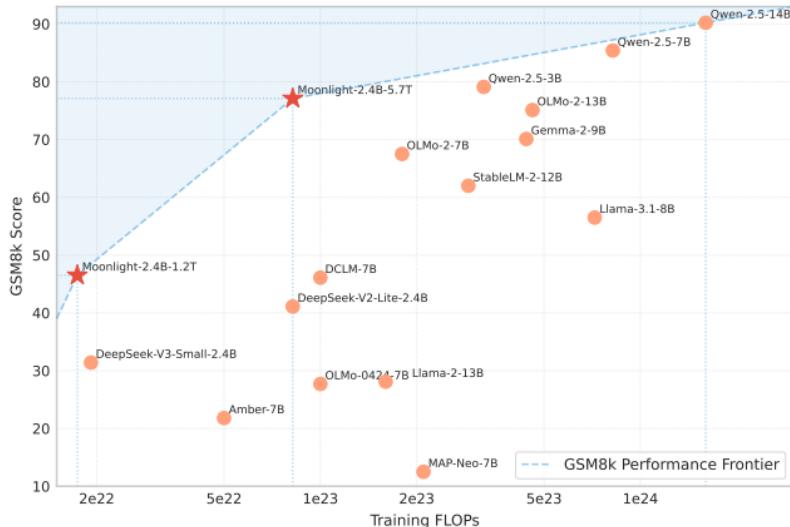
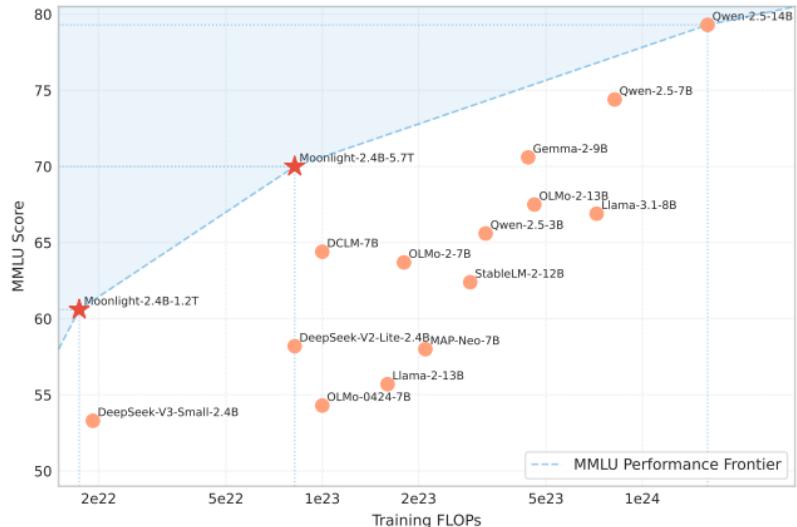
Rosenbrock Function.
Adaptive stochastic gradient algorithms.
Learning rate 0.003





Новый подход к оптимизации

3



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

³KIMI K2: OPEN AGENTIC INTELLIGENCE

Интуиция за методом Мион⁴



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

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

⁴Презентация R. Gower

Интуиция за методом Мион⁴

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

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 Мион⁴

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

Функция потерь

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

Линейная
аппроксимация

Интуиция за методом Мион⁴

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

Функция потерь

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

Хорошее приближение
в окрестности x_k

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 Мион. 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 Мион. Градиентный спуск



Штраф за
дальность от x_k

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

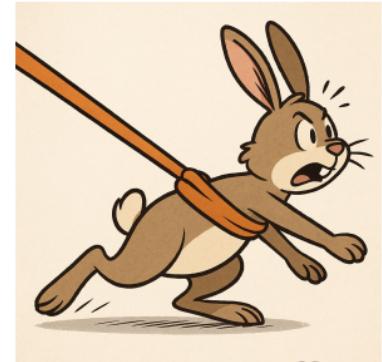
Интуиция за методом Мион. Градиентный спуск



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

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 Мион. Нормированный градиентный спуск

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

Интуиция за методом Мион. Нормированный градиентный спуск

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

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?



Unit disk in the p -th norm

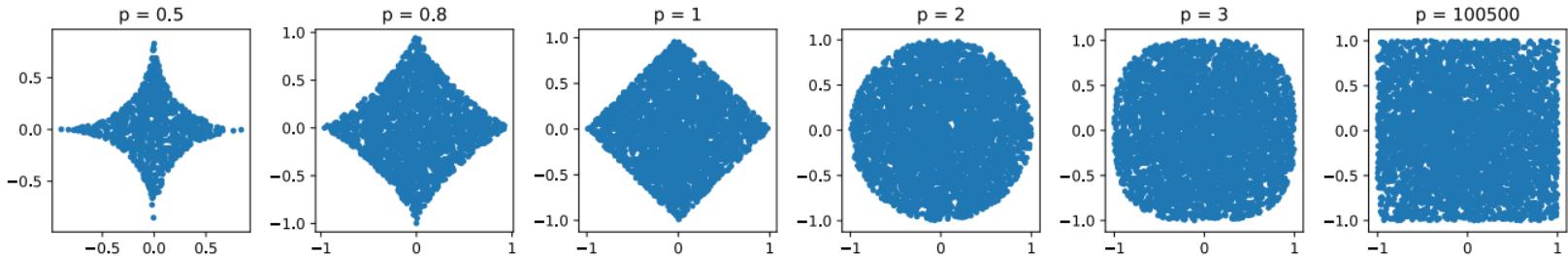


Рисунок 2. Примеры шаров в разных нормах

Для неевклидовых норм нужно ввести несколько определений

- Сопряжённая норма:

$$\|g\|^* = \sup_{\|x\|=1} \langle g, x \rangle$$

Для неевклидовых норм нужно ввести несколько определений

- Сопряжённая норма:

$$\|g\|^* = \sup_{\|x\|=1} \langle g, x \rangle$$

- Linear Minimization Oracle:

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

Для неевклидовых норм нужно ввести несколько определений

- Сопряжённая норма:

$$\|g\|^* = \sup_{\|x\|=1} \langle g, x \rangle$$

- Linear Minimization Oracle:

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

- Важное свойство, связывающее эти два понятия:

$$\langle g, \text{LMO}_{\|\cdot\|}(g) \rangle = -\|g\|^*$$

Неевклидовы записи методов⁵



! Неевклидов градиентный спуск

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

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

⁵Old Optimizer, New Norm: An Anthology

Неевклидовы записи методов⁵

! Неевклидов градиентный спуск

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

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

! Неевклидов нормированный градиентный спуск

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

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

⁵Old 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 $\|\cdot\|_{\text{оп}}$, 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 :

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

где

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

— 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

- 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 $\|\cdot\|_{\text{оп}}$. 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 $\|\cdot\|_{\text{оп}}$. 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 (124М) на FineWeb

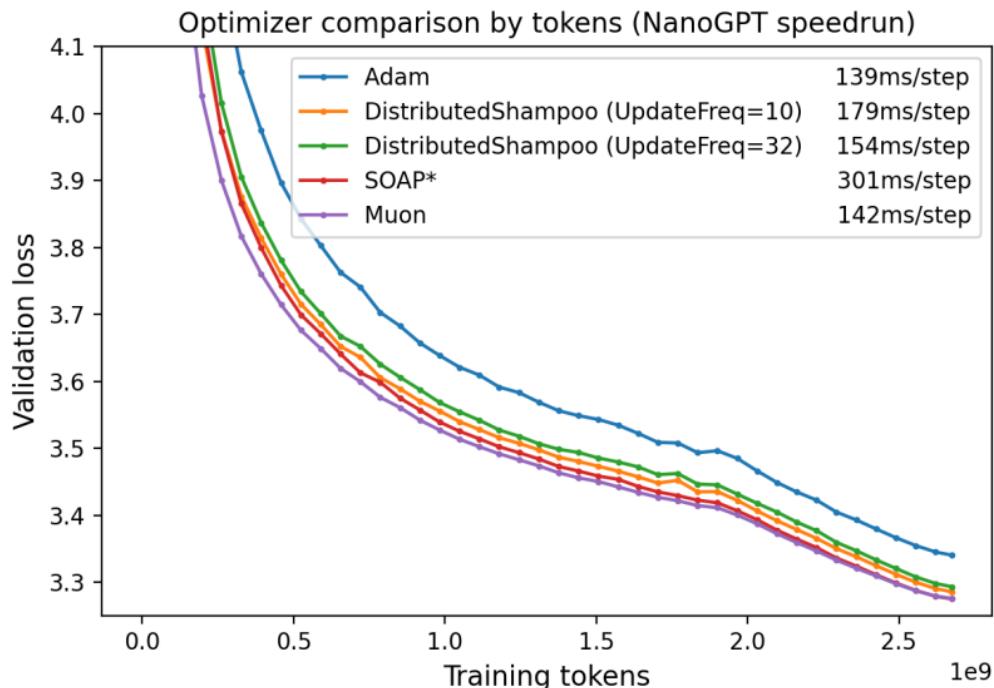


Рисунок 3. NanoGPT speedrun

Обучение GPT-2 (124М) на FineWeb

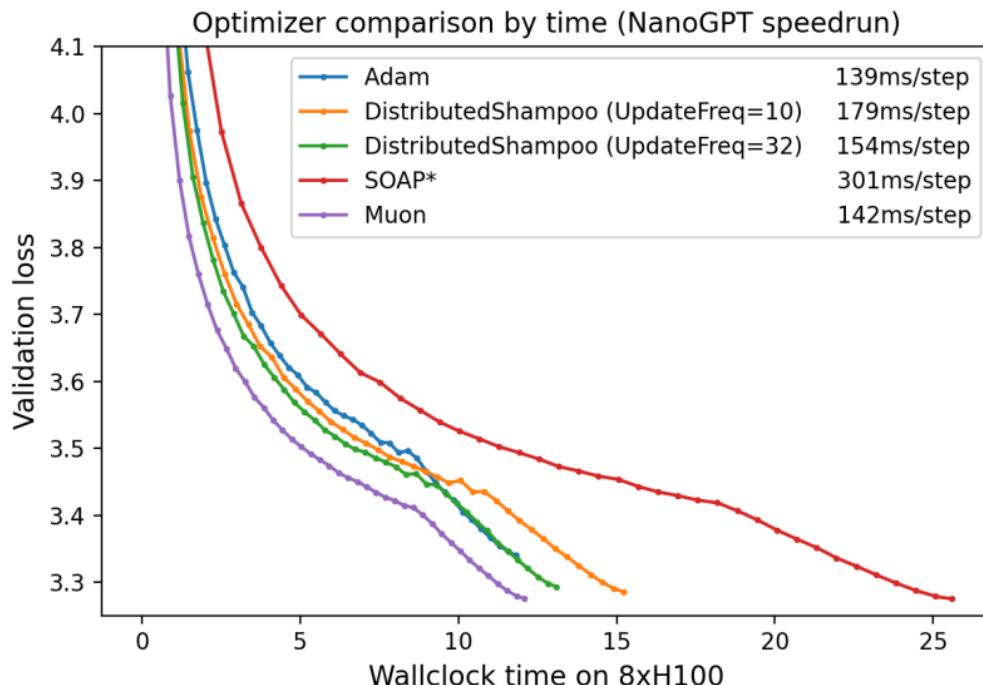


Рисунок 4. NanoGPT speedrun

Бонус: больше методов

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).

Muon⁶



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

⁶Deriving Muon