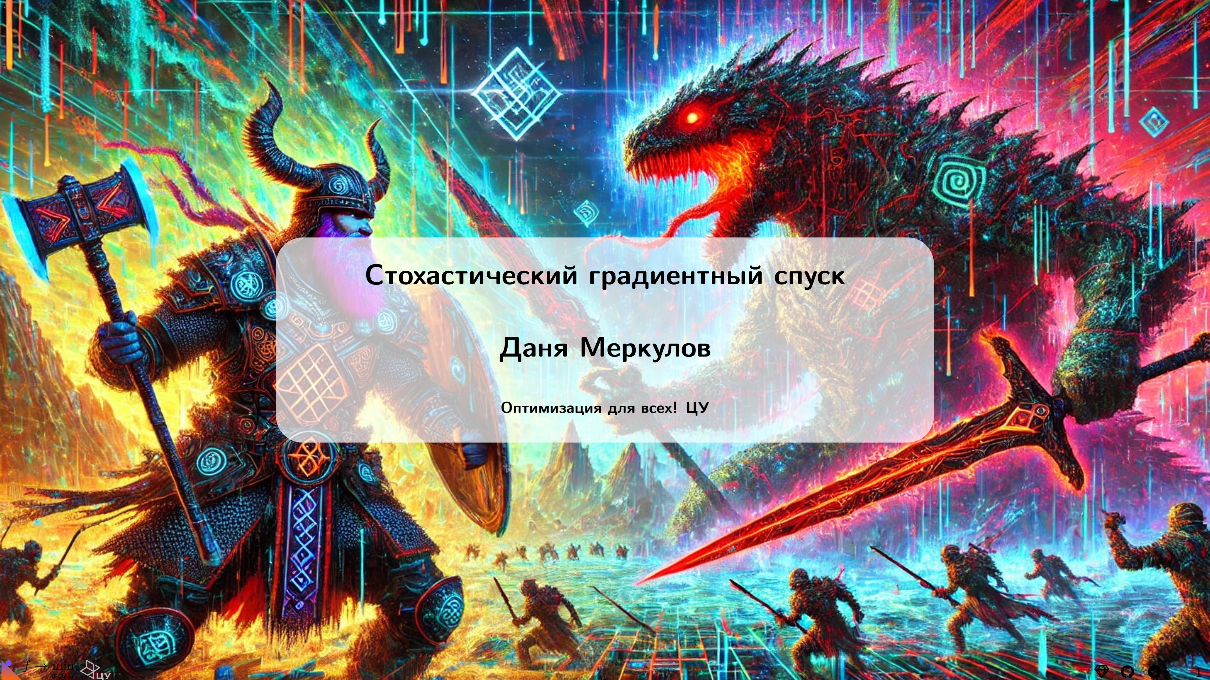


Стохастический градиентный спуск

Даня Меркулов

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 несмещенной 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 несмещенной оценкой градиента, которая задается следующим образом:

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

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	$\mathcal{O}\left(\log(1/\varepsilon)\right)$	
Выпуклый	$\mathcal{O}\left(1/\varepsilon\right)$	
Невыпуклый	$\mathcal{O}\left(1/\varepsilon\right)$	

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	$\mathcal{O}\left(\log(1/\varepsilon)\right)$	$\mathcal{O}\left(1/\varepsilon\right)$
Выпуклый	$\mathcal{O}\left(1/\varepsilon\right)$	$\mathcal{O}\left(1/\varepsilon^2\right)$
Невыпуклый	$\mathcal{O}\left(1/\varepsilon\right)$	$\mathcal{O}\left(1/\varepsilon^2\right)$

- 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	$\mathcal{O}\left(\log(1/\varepsilon)\right)$	$\mathcal{O}\left(1/\varepsilon\right)$
Выпуклый	$\mathcal{O}\left(1/\varepsilon\right)$	$\mathcal{O}\left(1/\varepsilon^2\right)$
Невыпуклый	$\mathcal{O}\left(1/\varepsilon\right)$	$\mathcal{O}\left(1/\varepsilon^2\right)$

- 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	$\mathcal{O}\left(\log(1/\varepsilon)\right)$	$\mathcal{O}\left(1/\varepsilon\right)$
Выпуклый	$\mathcal{O}\left(1/\varepsilon\right)$	$\mathcal{O}\left(1/\varepsilon^2\right)$
Невыпуклый	$\mathcal{O}\left(1/\varepsilon\right)$	$\mathcal{O}\left(1/\varepsilon^2\right)$

- 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	$\mathcal{O}\left(\log(1/\varepsilon)\right)$	$\mathcal{O}\left(1/\varepsilon\right)$
Выпуклый	$\mathcal{O}\left(1/\varepsilon\right)$	$\mathcal{O}\left(1/\varepsilon^2\right)$
Невыпуклый	$\mathcal{O}\left(1/\varepsilon\right)$	$\mathcal{O}\left(1/\varepsilon^2\right)$

- 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 несмещенную аппроксимацию градиента с ограниченной дисперсией.

Результаты для градиентного спуска

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

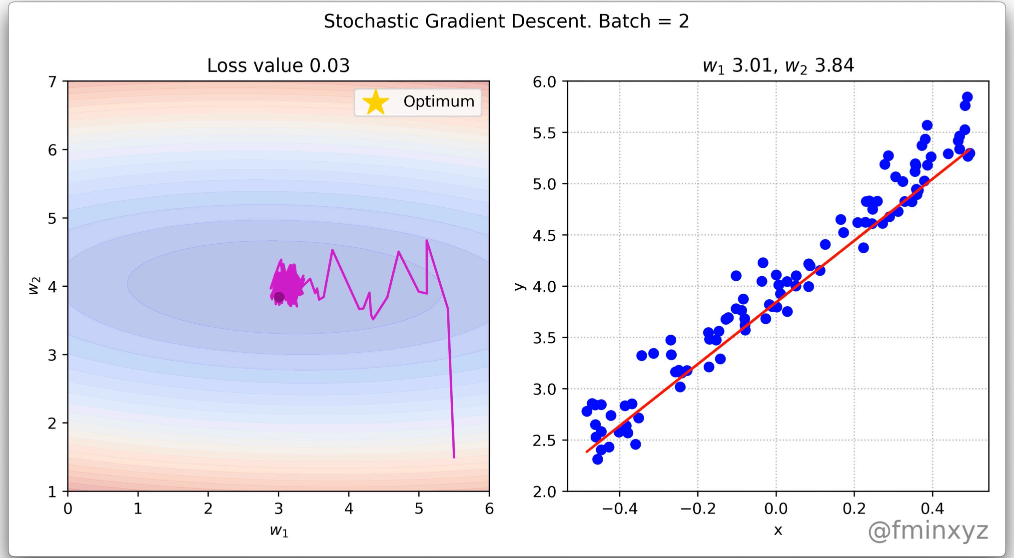
Если ∇f является липшицевым, то мы получаем:

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

- 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 несмещенную аппроксимацию градиента с ограниченной дисперсией.
- Методы с моментом и квази-Ньютоновские методы не улучшают скорость в стохастическом случае, а только могут улучшить константные множители (бутылочное горлышко — дисперсия, а не число обусловленности).

Стохастический градиентный спуск (SGD)

Типичное поведение



Сходимость

Липшицевость градиента означает:

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

Сходимость

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):

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

Сходимость

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:

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

Сходимость

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:

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

Сходимость

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: $\mathbb{E}[\nabla f_{i_k}(x_k)] = \nabla f(x_k)$:

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

Гладкий PL-случай с постоянным шагом

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):

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

Гладкий PL-случай с постоянным шагом

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):

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

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

Гладкий PL-случай с постоянным шагом

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):

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

Гладкий PL-случай с постоянным шагом

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):

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

$$\overset{\text{PL: } \|\nabla f(x_k)\|^2 \geq 2\mu(f(x_k) - f^*)}{\leq} f(x_k) - 2\alpha_k \mu (f(x_k) - f^*) + \alpha_k^2 \frac{L}{2} \mathbb{E}[\|\nabla f_{i_k}(x_k)\|^2]$$

Вычтем f^*

Гладкий PL-случай с постоянным шагом

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):

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

Гладкий PL-случай с постоянным шагом

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):

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

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

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

Вычтем f^*

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

Переставляем

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

Гладкий PL-случай с постоянным шагом

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):

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

$$\overset{\text{PL: } \|\nabla f(x_k)\|^2 \geq 2\mu(f(x_k) - f^*)}{\leq} f(x_k) - 2\alpha_k \mu (f(x_k) - f^*) + \alpha_k^2 \frac{L}{2} \mathbb{E}[\|\nabla f_{i_k}(x_k)\|^2]$$

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

$$\text{Переставляем} \quad \leq (1 - 2\alpha_k \mu)[f(x_k) - f^*] + \alpha_k^2 \frac{L}{2} \mathbb{E}[\|\nabla f_{i_k}(x_k)\|^2]$$

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

Гладкий PL-случай с постоянным шагом

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):

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

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

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

Вычтем f^*

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

Переставляем

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

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

$$\leq (1 - 2\alpha_k \mu)[f(x_k) - f^*] + \frac{L\sigma^2\alpha_k^2}{2}.$$

Сходимость. Гладкий PL-случай.

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.

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.

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.

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

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

$$\overset{(2k+1)^2<(2k+2)^2=4(k+1)^2}{\leq} \frac{k^2}{(k+1)^2}[f(x_k) - f^*] + \frac{L\sigma^2}{2\mu^2(k+1)^2}$$

Сходимость. Гладкий PL-случай.

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

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

$$
\stackrel{(2k+1)^2 < (2k+2)^2 = 4(k+1)^2}{\leq} \frac{k^2}{(k+1)^2}[f(x_k) - f^*] + \frac{L\sigma^2}{2\mu^2(k+1)^2}
$$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$
\begin{aligned}
\delta_f(i+1) &\leq \delta_f(i) + \frac{L\sigma^2}{2\mu^2} \\
\sum_{i=0}^{k} \left[\delta_f(i+1) - \delta_f(i)\right] &\leq \sum_{i=0}^{k} \frac{L\sigma^2}{2\mu^2} \\
\delta_f(k+1) - \delta_f(0) &\leq \frac{L\sigma^2(k+1)}{2\mu^2} \\
(k+1)^2 \mathbb{E}[f(x_{k+1}) - f^*] &\leq \frac{L\sigma^2(k+1)}{2\mu^2}
\end{aligned}
$$

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

$$
\begin{aligned}
\delta_f(i+1) &\leq \delta_f(i) + \frac{L\sigma^2}{2\mu^2} \\
\sum_{i=0}^{k} \left[\delta_f(i+1) - \delta_f(i)\right] &\leq \sum_{i=0}^{k} \frac{L\sigma^2}{2\mu^2} \\
\delta_f(k+1) - \delta_f(0) &\leq \frac{L\sigma^2(k+1)}{2\mu^2} \\
(k+1)^2\mathbb{E}[f(x_{k+1}) - f^*] &\leq \frac{L\sigma^2(k+1)}{2\mu^2} \\
\mathbb{E}[f(x_k) - f^*] &\leq \frac{L\sigma^2}{2\mu^2 k}
\end{aligned}
$$

которое дает указанную скорость.

Сходимость. Гладкий выпуклый случай (ограниченная дисперсия)

Вспомогательные обозначения

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

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

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

Гладкий выпуклый случай с постоянным шагом

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

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

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

При выборе постоянного $\alpha = \dfrac{\|x_0 - x^*\|}{\sigma\sqrt{k}}$ (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 постоянным шагом

1. Начнём с разложения квадрата расстояния до минимума:

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

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

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 выпуклость f (которая даёт $\langle \nabla f(x_k), x_k - x^* \rangle \geq f(x_k) - f^*$):
$$\begin{aligned} \mathbb{E}_k[\|x_{k+1} - x^*\|^2] &= \|x_k - x^*\|^2 - 2\alpha\langle \nabla f(x_k), x_k - x^*\rangle + \alpha^2 \mathbb{E}_k[\|\nabla f_{i_k}(x_k)\|^2] \\ &\leq \|x_k - x^*\|^2 - 2\alpha\big(f(x_k) - f^*\big) + \alpha^2\sigma^2. \end{aligned}$$
3. Переносим слагаемое с $f(x_k)$ влево и берём полное матожидание:
$$2\alpha \mathbb{E}[f(x_k) - f^*] \leq \mathbb{E}[\|x_k - x^*\|^2] - \mathbb{E}[\|x_{k+1} - x^*\|^2] + \alpha^2\sigma^2.$$

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 выпуклость f (которая даёт $\langle \nabla f(x_k), x_k - x^*\rangle \geq f(x_k) - f^*$):

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

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 (телескопируем) по $t = 0, \dots, k-1$:

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

Гладкий выпуклый случай с постоянным шагом

5. Делим на $2\alpha k$:

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

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:

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

Гладкий выпуклый случай с постоянным шагом

5. Делим на $2\alpha k$:

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

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

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

Вычитая f^* из обеих частей, получаем:

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

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

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

Гладкий выпуклый случай с убывающим шагом

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

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

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

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 выборку:

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

Распространнёный вариант — использовать большую выборку 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.

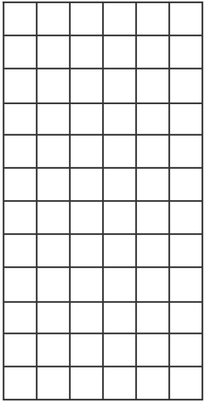
Влияние ошибки на скорость сходимости

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

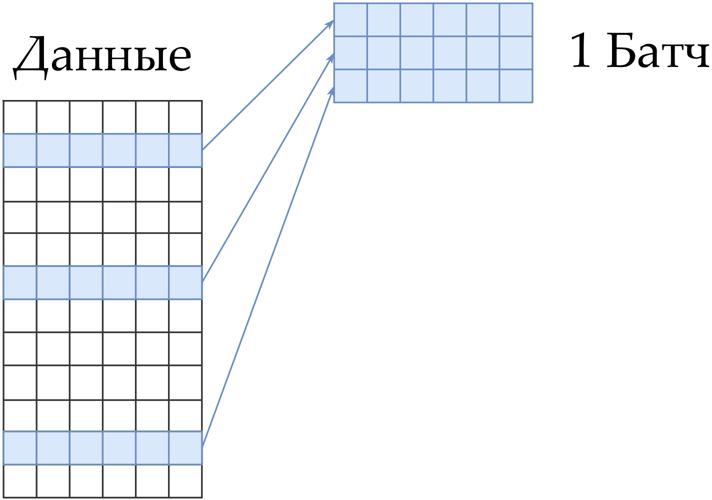
$$f(x_{k+1}) \leq f(x_k) - \frac{1}{2L}\|\nabla f(x_k)\|^2 + \frac{1}{2L}\|e_k\|^2.$$

Идея SGD и батчей

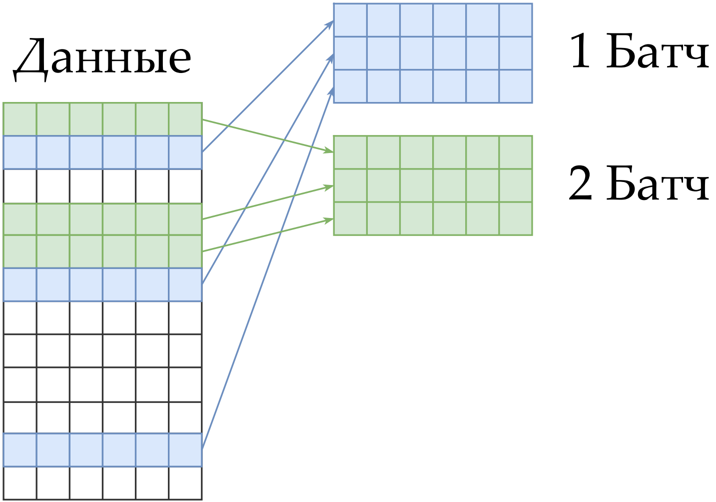
Данные



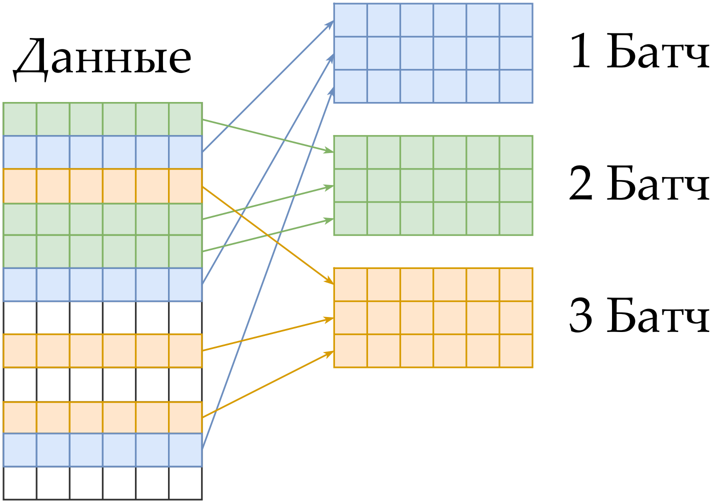
Идея SGD и батчей



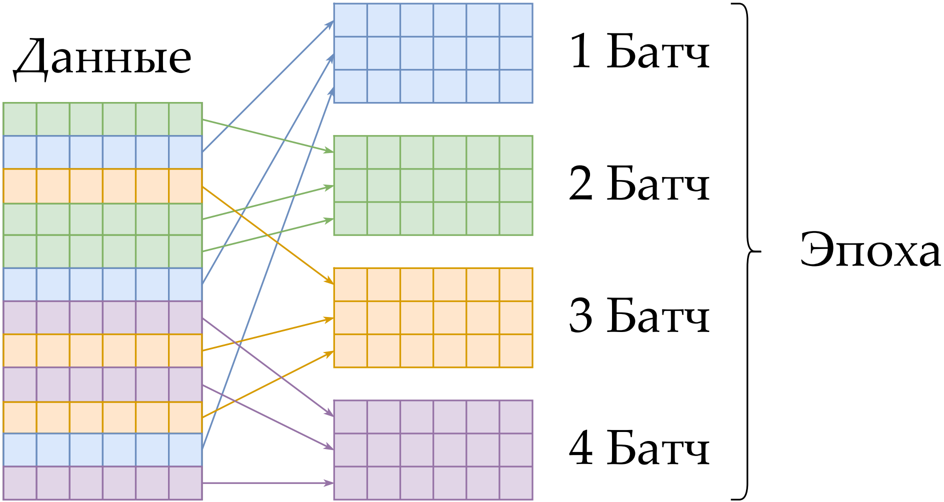
Идея SGD и батчей



Идея SGD и батчей

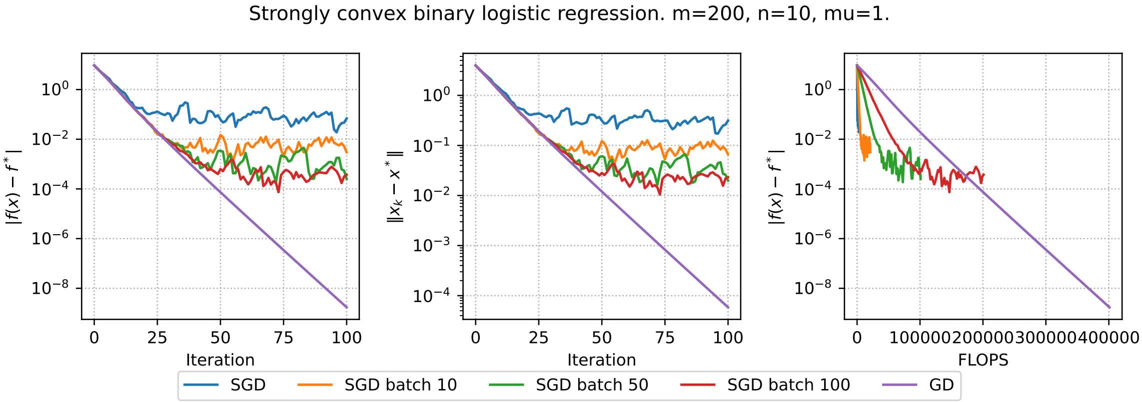


Идея SGD и батчей



Основная проблема SGD

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



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

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:

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

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

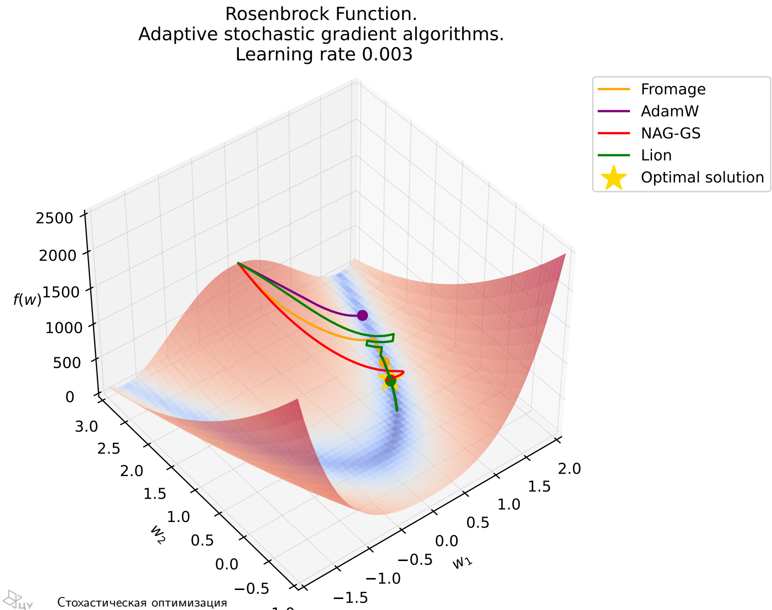
- SGD с постоянным шагом не сходится даже для PL (сильно выпуклого) случая
- SGD достигает сублинейной сходимости с скоростью $\mathcal{O}\left(\frac{1}{k}\right)$ для PL-случая.
- Ускорения Нестерова/Поляка не улучшают скорость сходимости

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.

Стохастическая оптимизация

Много методов



SGD расходится с любым шагом обучения для LLS

Оптимизация для глубокого обучения с практической точки зрения

Как их сравнить? AlgoPerf benchmark [1] [2]

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

Как их сравнить? AlgoPerf benchmark [1] [2]

- **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 [1] [2]

- **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 $\times 3$). Оценка — медианное время выполнения по 5 наборам задач.

Как их сравнить? AlgoPerf benchmark [1] [2]

- **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 $\times 3$). 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 benchmark [1] [2]

- **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 $\times 3$). 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 ~ 3469ч/внешняя настройка, ~ 1847ч/самонастройка).

[1] Benchmarking Neural Network Training Algorithms

[2] Accelerating neural network training: An analysis of the AlgoPerf competition

AlgoPerf benchmark

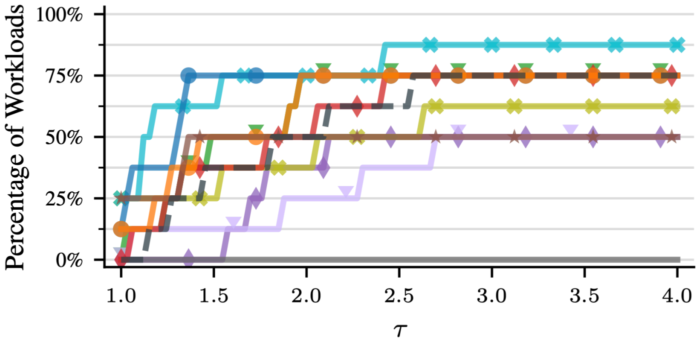
Summary *фиксированных* базовых задач в AlgoPerf benchmark. Функции потерь включают кросс-энтропию (CE), среднюю абсолютную ошибку (L1) и CTC-потерю (Connectionist Temporal Classification, CTC). Дополнительные метрики оценки: индекс структурного сходства (SSIM), коэффициент ошибок (ER) и доля ошибок 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

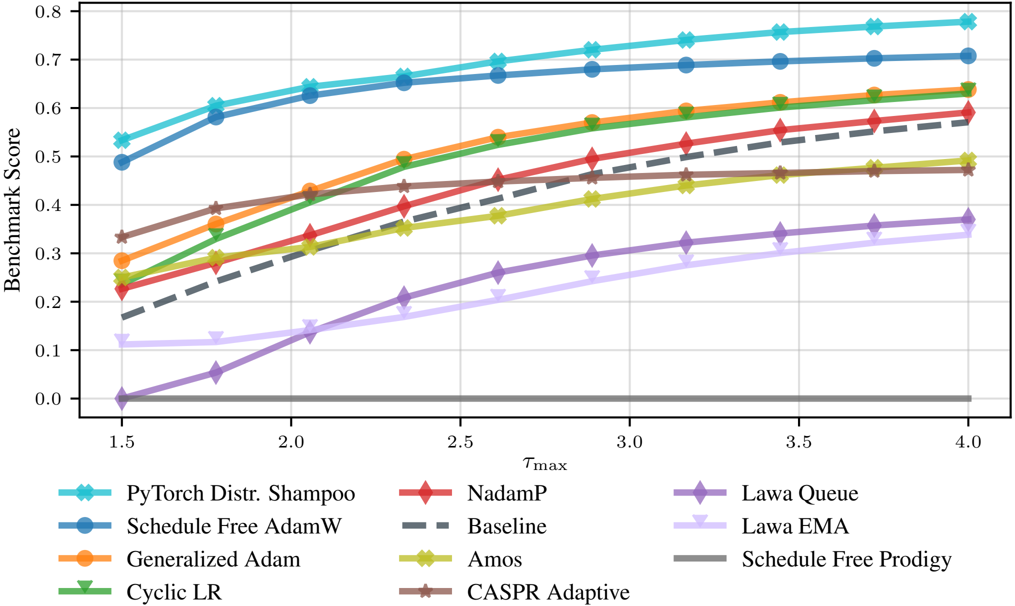
Submission	Line	Score
PyTorch Distributed Shampoo		0.7784
Schedule Free AdamW		0.7077
Generalized Adam		0.6383
Cyclic LR		0.6301
NadamP		0.5909
Baseline		0.5707
Amos		0.4918
CASPR Adaptive		0.4722
LAWA Queue		0.3699
LAWA EMA		0.3384
Schedule Free Prodigy		0

(a) External tuning leaderboard

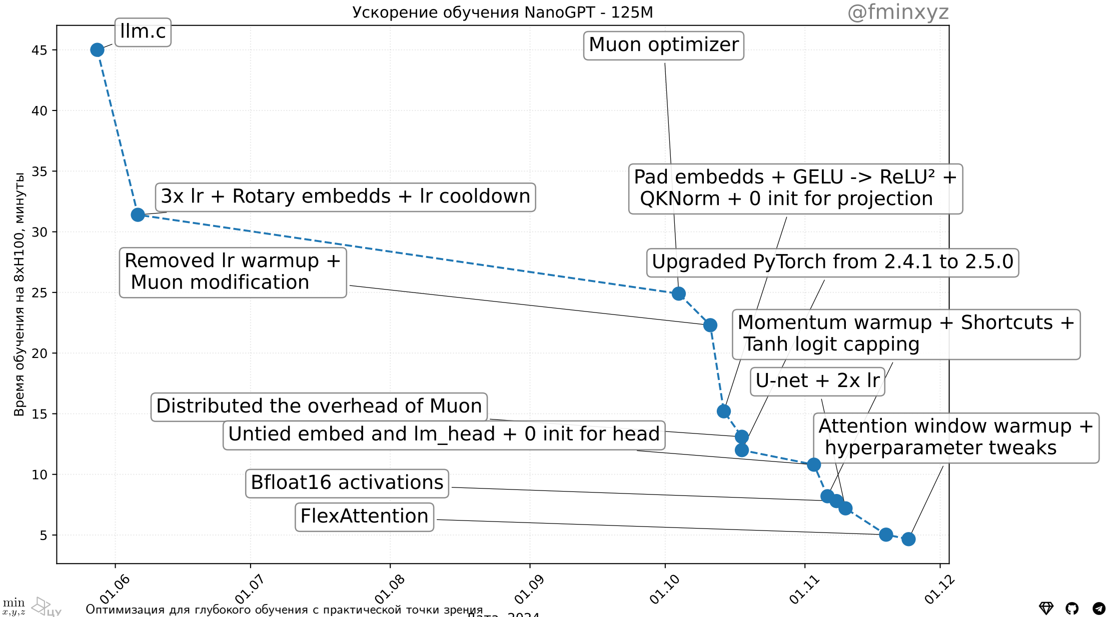


(b) External tuning performance profiles

AlgoPerf benchmark



NanoGPT speedrun



Работают ли трюки, если увеличить размер модели?

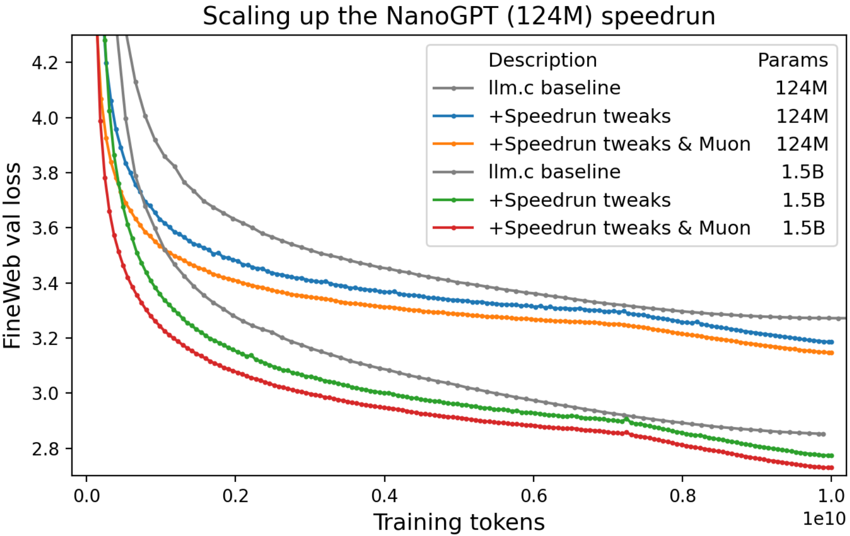


Рис. 3: Источник

Работают ли трюки, если увеличить размер модели?

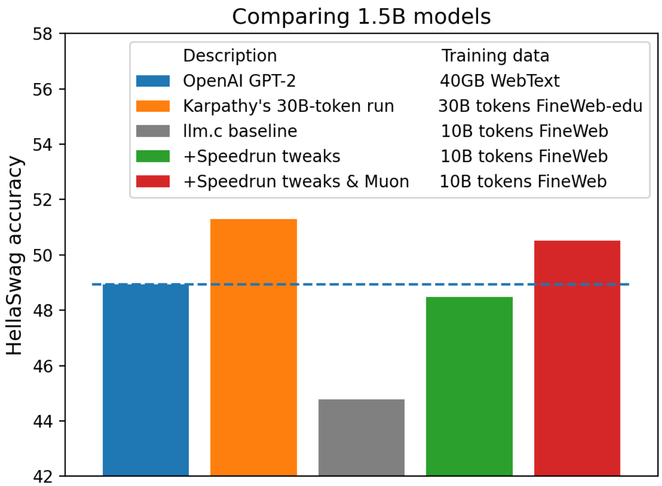


Рис. 4: Источник

Неожиданные истории

Adam работает хуже для CV, чем для LLM? [3]

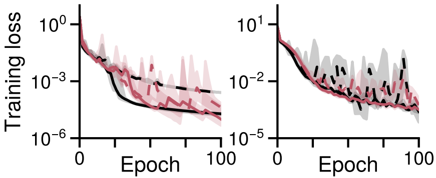


Рис. 5: CNNs on MNIST and CIFAR10

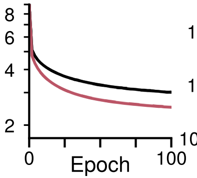
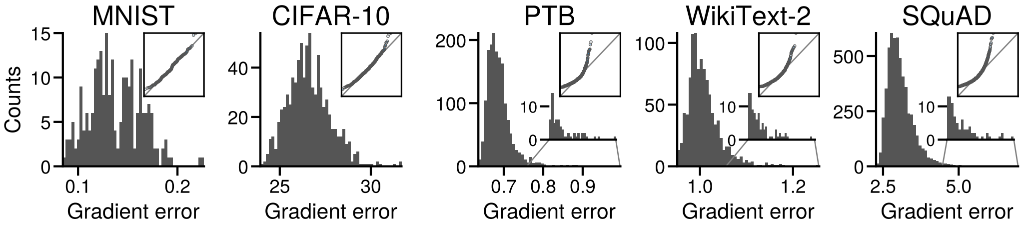


Рис. 6: Transformers on PTB, WikiText2, and SQuAD

Черные линии - SGD; красные линии - Adam.

[3] Linear attention is (maybe) all you need (to understand transformer optimization)



[4] Linear attention is (maybe) all you need (to understand transformer optimization)

Почему Adam работает хуже для CV, чем для LLM? [5]

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

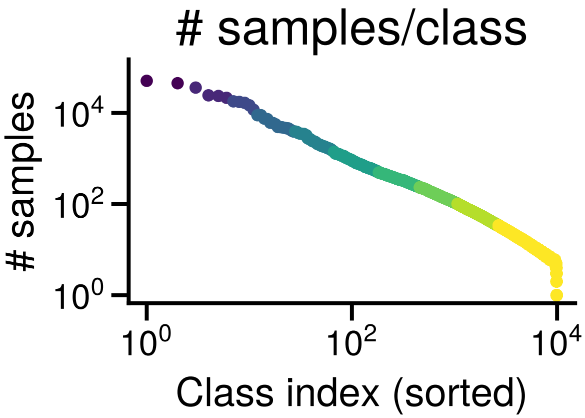
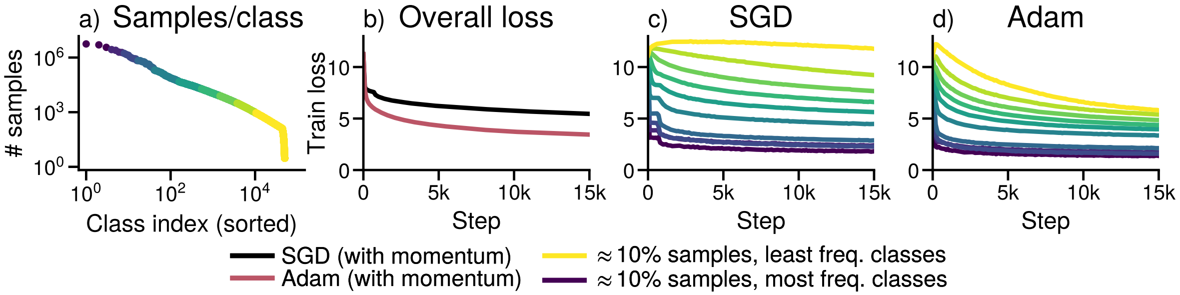


Рис. 7: Распределение частоты токенов в PTB

[5] Heavy-Tailed Class Imbalance and Why Adam Outperforms Gradient Descent on Language Models

Почему Adam работает хуже для CV, чем для LLM? [6]

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.

[6] Heavy-Tailed Class Imbalance and Why Adam Outperforms Gradient Descent on Language Models

Влияние инициализации [7]

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 [7]

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*.

Влияние инициализации [7]

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

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

Влияние инициализации весов нейронной сети на сходимость методов [8]

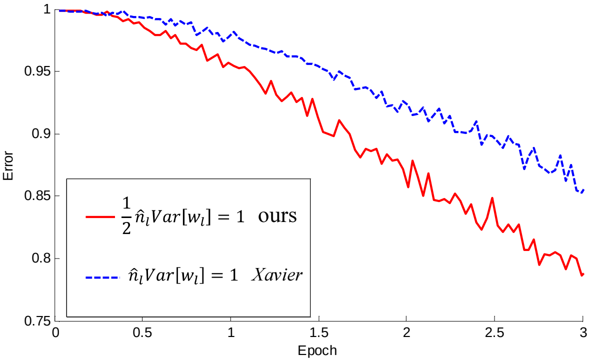


Рис. 8: 22-layer ReLU net: good init converges faster

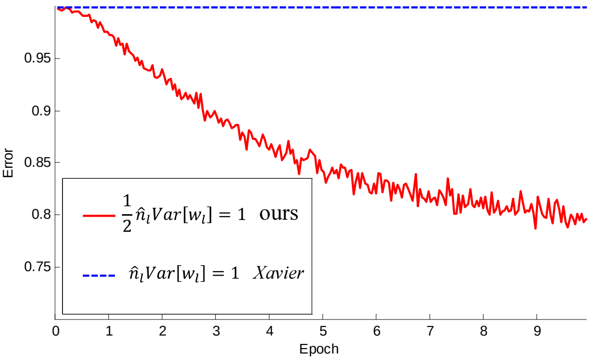
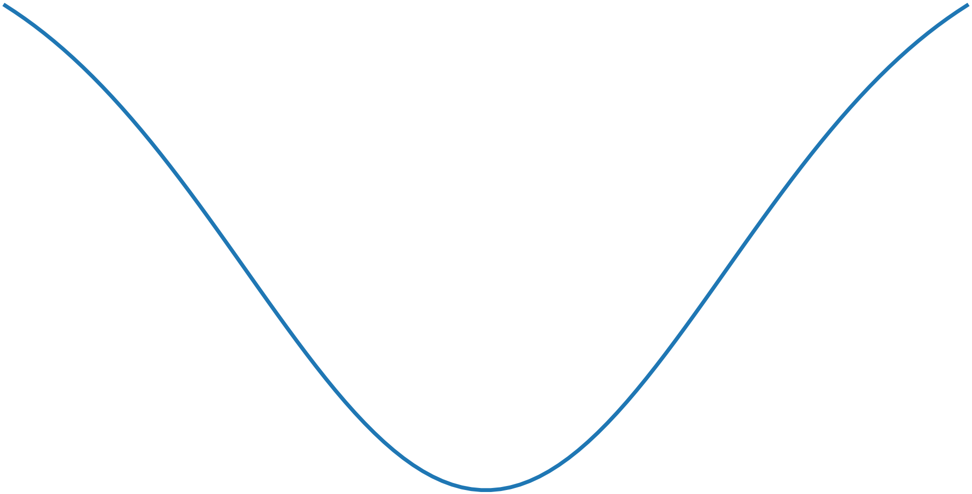


Рис. 9: 30-layer ReLU net: good init is able to converge

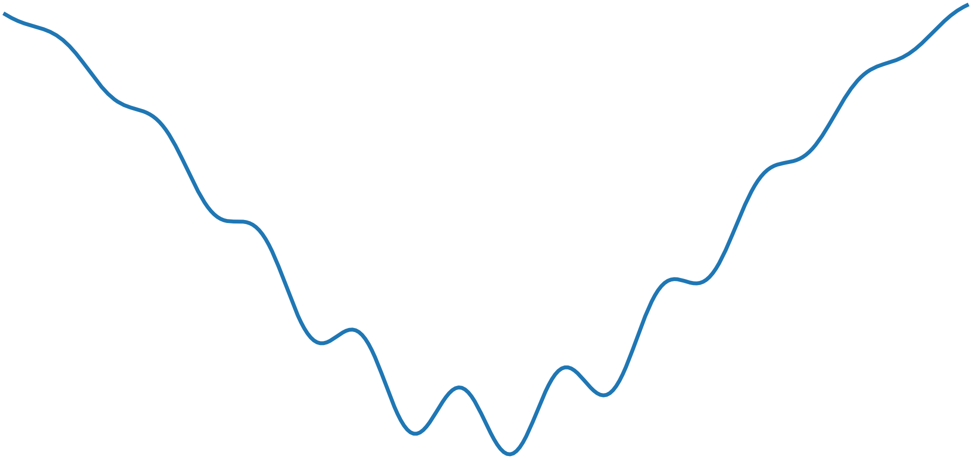
[8] Delving Deep into Rectifiers: Surpassing Human-Level Performance on ImageNet Classification, Kaiming He, Xiangyu Zhang, Shaoqing Ren, Jian Sun

Весёлые истории

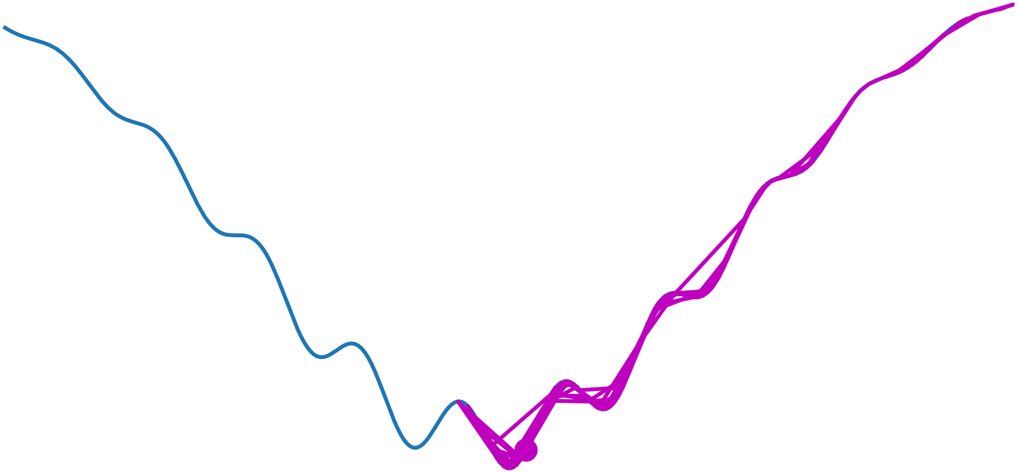
Градиентный спуск сходится к локальному минимуму



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 $\hat{w}$.

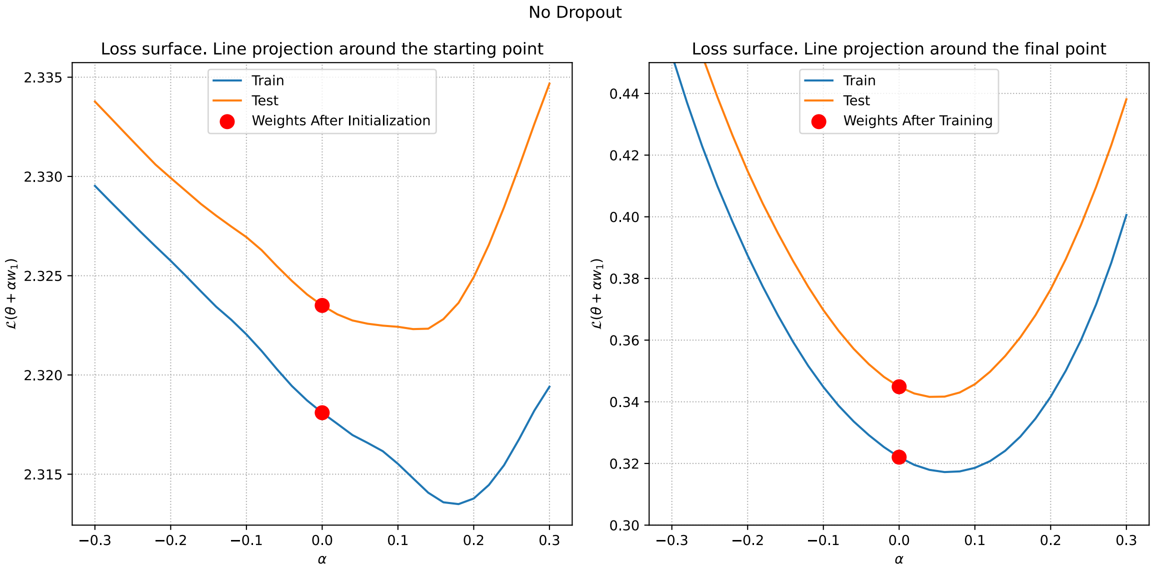
$$L(\alpha) = L(w_0 + \alpha w_1), \text{ where } \alpha \in [-b, b].$$

Визуализация с помощью проекции на прямую

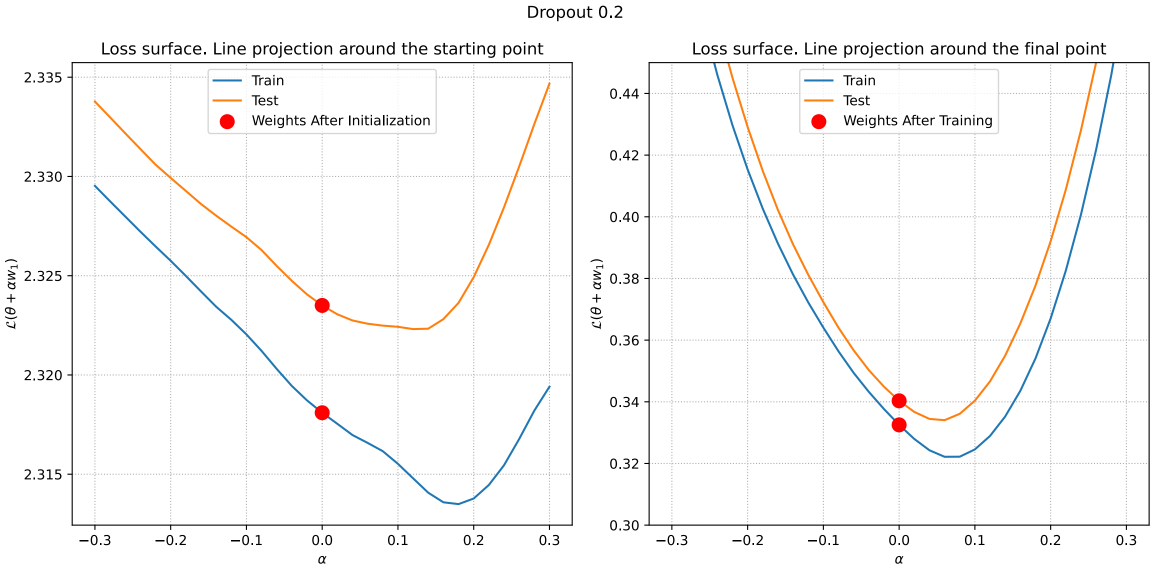
- Обозначим начальную точку как w_0, представляющую собой веса нейронной сети при инициализации. Веса, полученные после обучения, обозначим как $\hat{w}$.
- Генерируем случайный вектор такой же размерности и нормы $w_1 \in \mathbb{R}^p$, затем вычисляем значение функции потерь вдоль этого вектора:

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

Проекция функции потерь нейронной сети на прямую



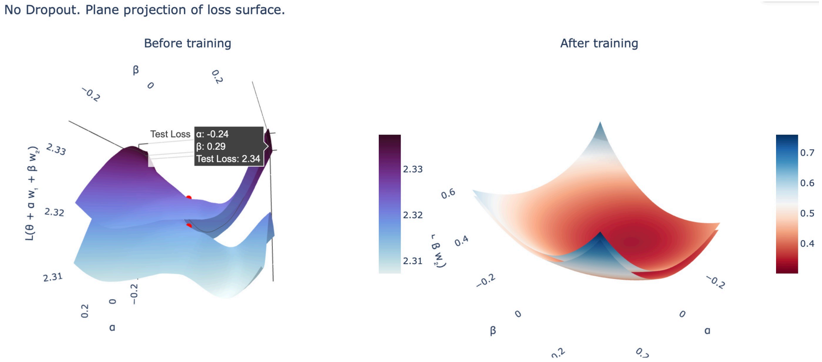
Проекция функции потерь нейронной сети на прямую



Проекция функции потерь нейронной сети на плоскость

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

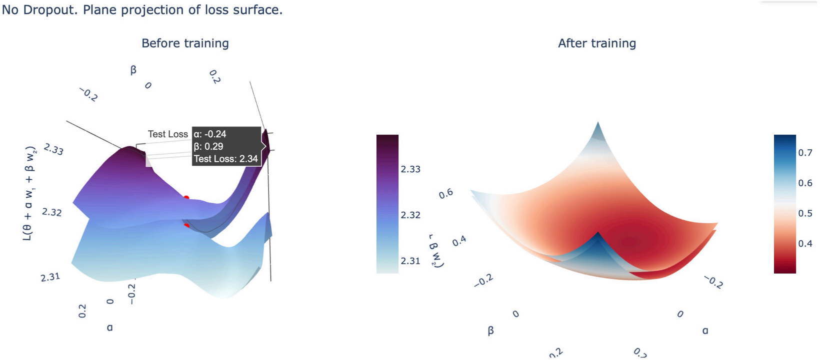
$$L(\alpha, \beta) = L(w_0 + \alpha w_1 + \beta w_2), \text{ where } \alpha, \beta \in [-b, b]^2.$$



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.

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



Может ли быть полезно изучение таких проекций? [9]

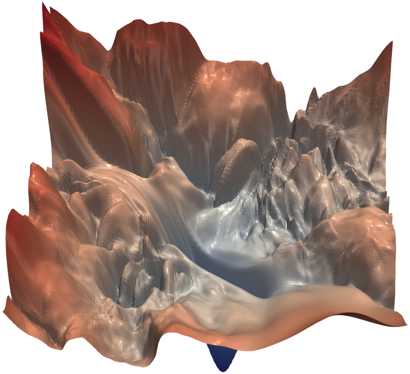


Рис. 13: The loss surface of ResNet-56 without skip connections

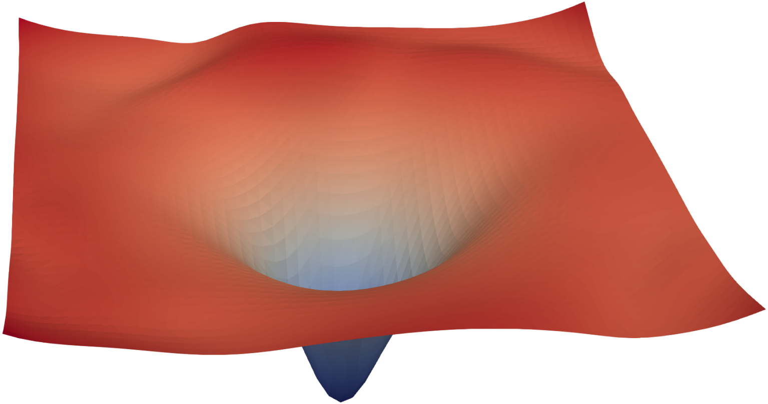


Рис. 14: The loss surface of ResNet-56 with skip connections

[9] Visualizing 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? [10]

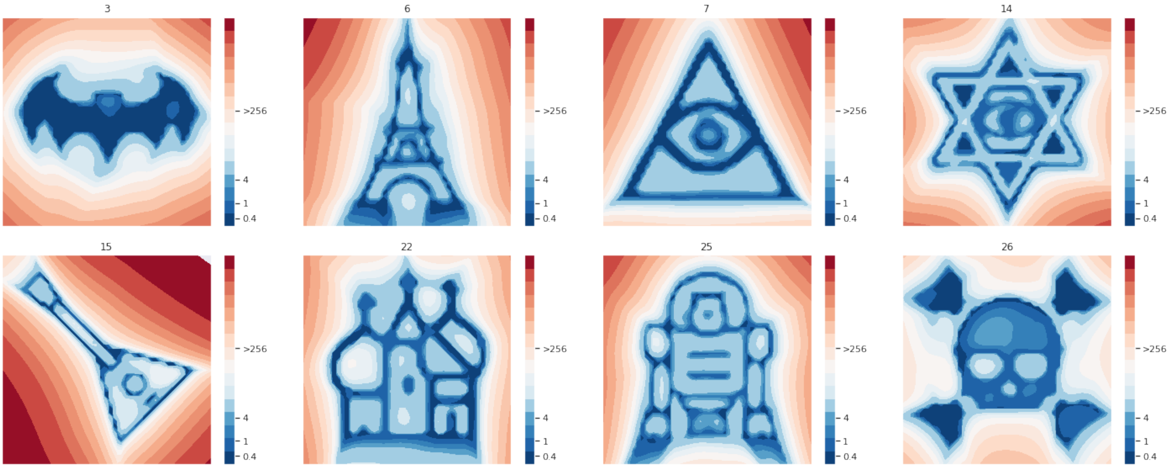
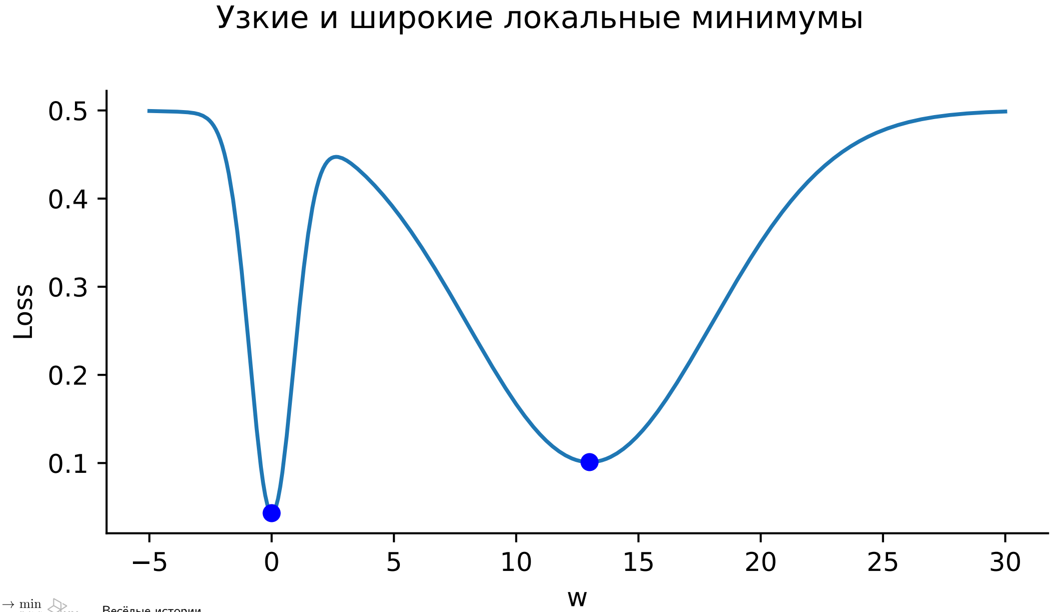


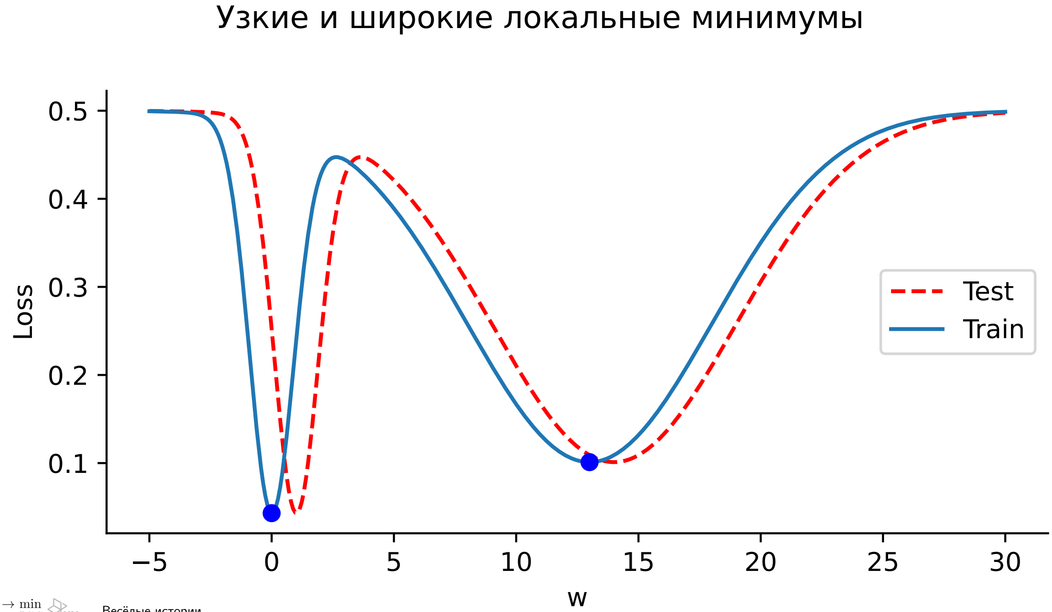
Рис. 15: Examples of a loss landscape of a typical CNN model on FashionMNIST and CIFAR10 datasets found with MPO. Loss values are color-coded according to a logarithmic scale

[10] Loss Landscape Sightseeing with Multi-Point Optimization, Ivan Skorokhodov, Mikhail Burtsev

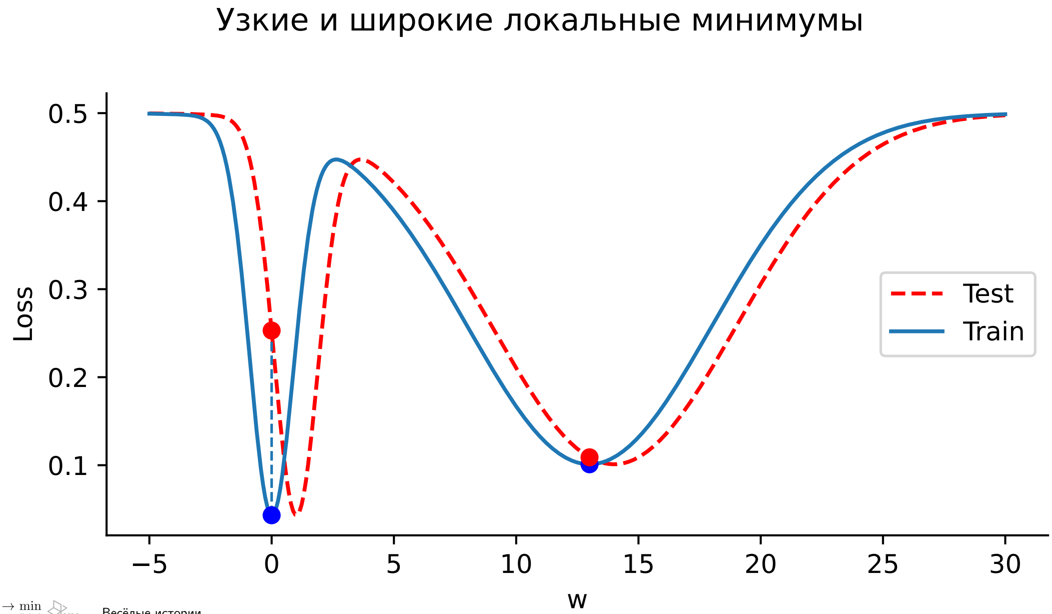
Ширина локальных минимумов



Ширина локальных минимумов



Ширина локальных минимумов



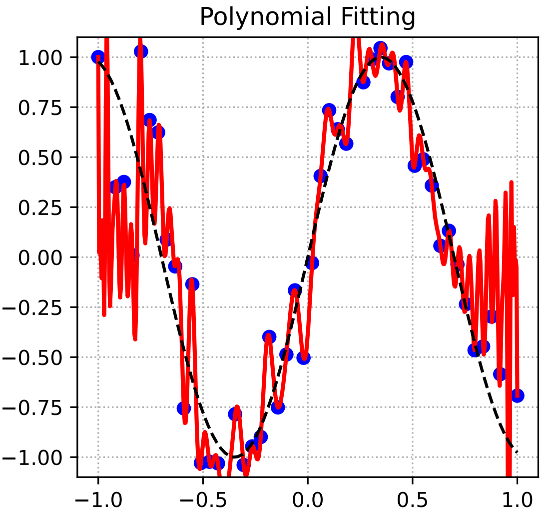
Экспоненциальный шаг обучения

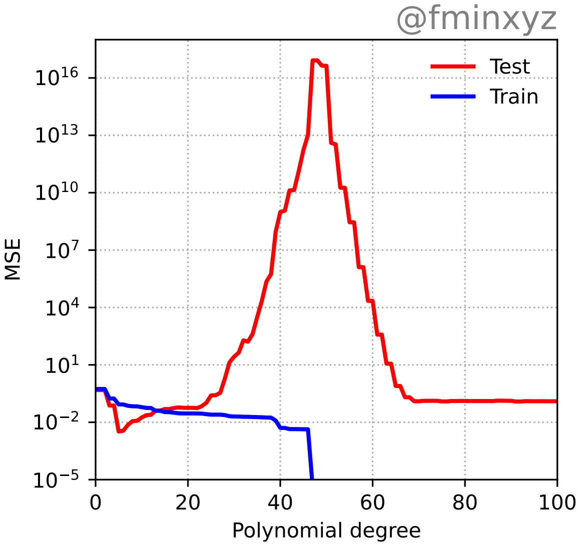
* Exponential Learning Rate Schedules for Deep Learning

Double Descent [11]

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

Double Descent





Grokking [12]

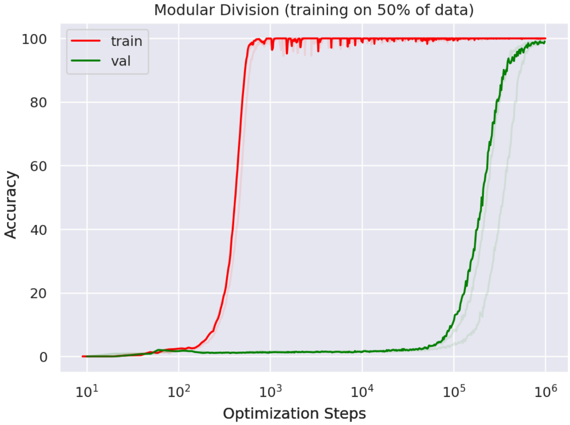


Рис. 16: Training transformer with 2 layers, width 128, and 4 attention heads, with a total of about $4 \cdot 10^5$ non-embedding parameters. Reproduction of experiments (~ half an hour) is available here

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

Grokking [12]

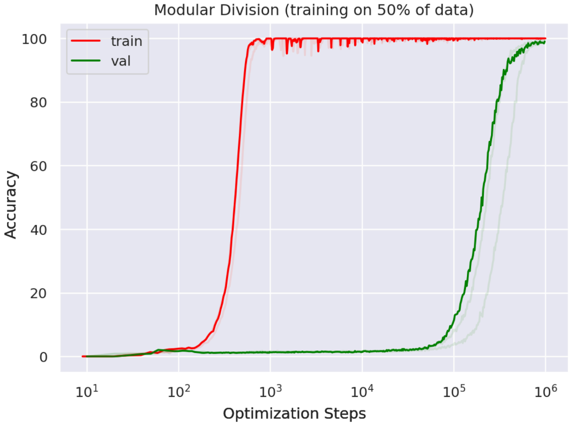


Рис. 16: Training transformer with 2 layers, width 128, and 4 attention heads, with a total of about $4 \cdot 10^5$ non-embedding parameters. Reproduction of experiments (~ half an hour) is available here

- 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.

Grokking [12]

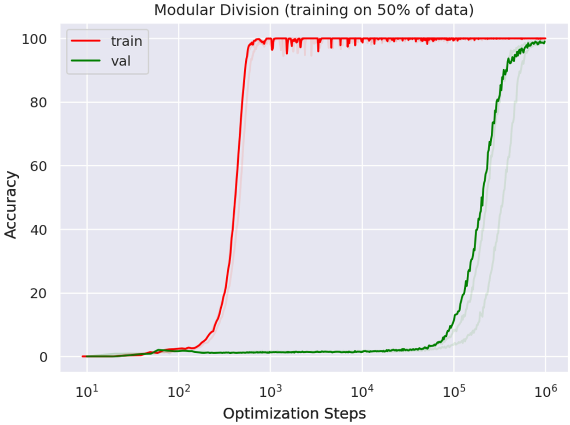


Рис. 16: Training transformer with 2 layers, width 128, and 4 attention heads, with a total of about $4 \cdot 10^5$ non-embedding parameters. Reproduction of experiments (~ half an hour) is available here

- 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**.

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