



Перспективные направления исследований для совместной лаборатории ЦУ x AIRI

Даниил Меркулов

30 ноября 2024

Optimizers

Adam работает хуже для CV, чем для LLM? ¹

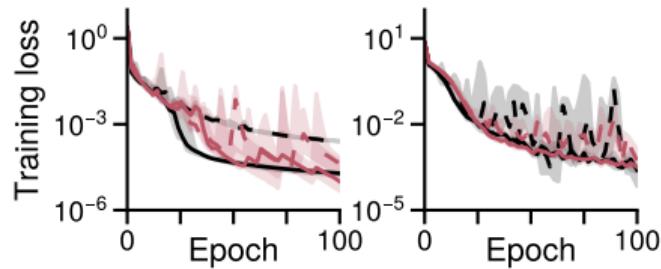


Рис. 1: CNNs on MNIST and CIFAR10

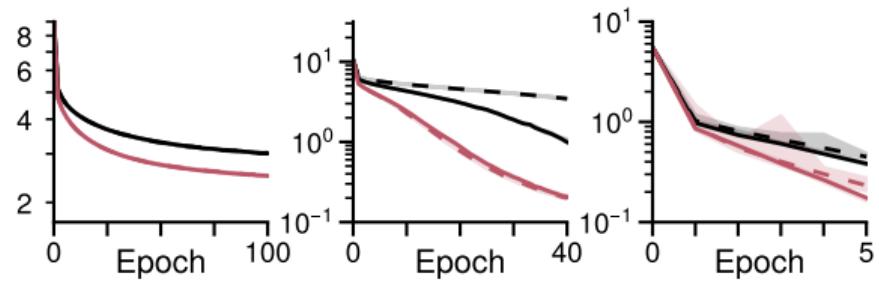


Рис. 2: Transformers on PTB, WikiText2, and SQuAD

¹Linear attention is (maybe) all you need (to understand transformer optimization)

Почему Adam работает хуже для CV, чем для LLM? ²

Потому что шум градиентов в языковых моделях имеет тяжелые хвосты?



²Linear attention is (maybe) all you need (to understand transformer optimization)

Почему Adam работает хуже для CV, чем для LLM? ³

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. 3: Распределение частоты токенов в PTB

³Heavy-Tailed Class Imbalance and Why Adam Outperforms Gradient Descent on Language Models

Почему Adam работает хуже для CV, чем для LLM? ⁴

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.

⁴Heavy-Tailed Class Imbalance and Why Adam Outperforms Gradient Descent on Language Models

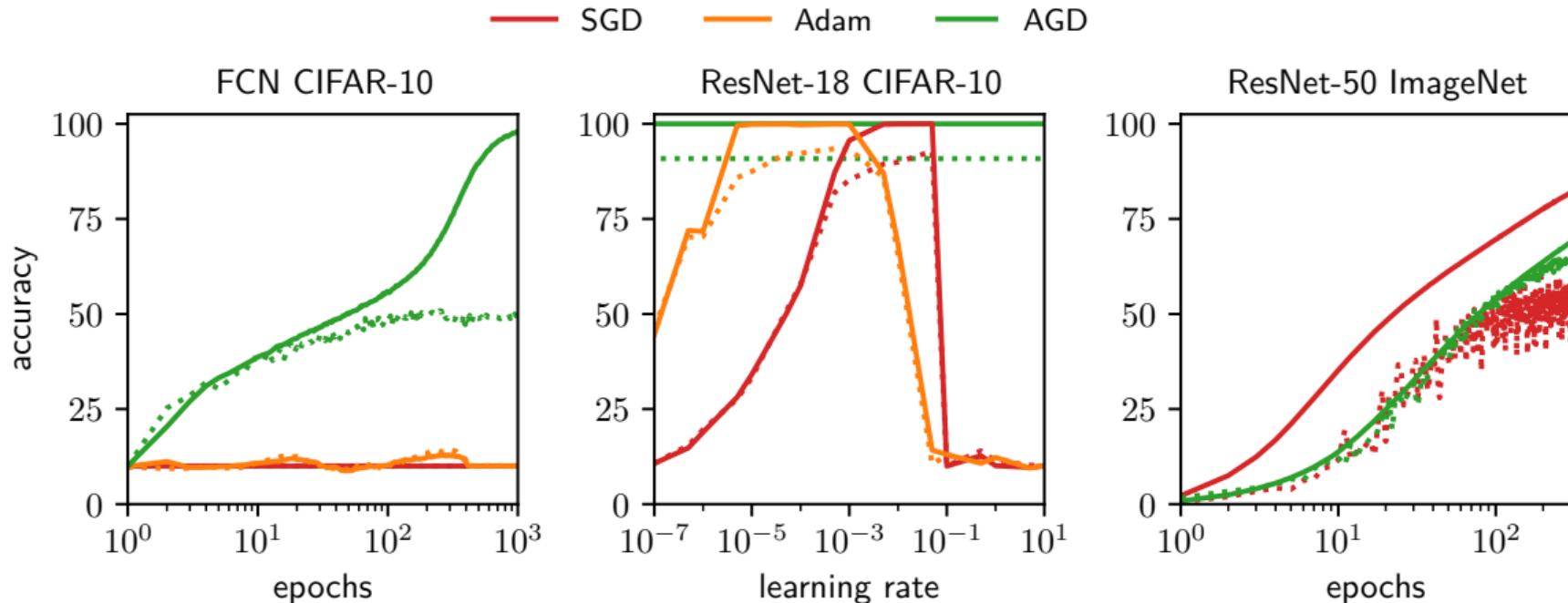
Automatic Gradient Descent⁵

```
def initialise_weights():
    for layer k in {1,...,L}:
         $\mathbf{W}_k \sim \text{UNIFORM}(\text{orthogonal}(d_k, d_{k-1}))$  # sample a semi-orthogonal matrix
         $\mathbf{W}_k \leftarrow \mathbf{W}_k \cdot \sqrt{\frac{d_k}{d_{k-1}}}$  # rescale its singular values
    def update_weights():
         $G \leftarrow \frac{1}{L} \sum_{l=1}^L \|\nabla_{\mathbf{W}_k} \mathcal{L}\|_F \cdot \sqrt{\frac{d_k}{d_{k-1}}}$  # get gradient summary
         $\eta \leftarrow \log \frac{1+\sqrt{1+4G}}{2}$  # set automatic learning rate
        for layer k in {1,...,L}:
             $\mathbf{W}_k \leftarrow \mathbf{W}_k - \frac{\eta}{L} \cdot \frac{\nabla_{\mathbf{W}_k} \mathcal{L}}{\|\nabla_{\mathbf{W}_k} \mathcal{L}\|_F} \cdot \sqrt{\frac{d_k}{d_{k-1}}}$  # update weights
```

Algorithm 1: Automatic gradient descent. The matrix \mathbf{W}_k in $\mathbb{R}^{d_k \times d_{k-1}}$ is the weight matrix at layer k . The gradient $\nabla_{\mathbf{W}_k} \mathcal{L}$ is with respect to the objective \mathcal{L} evaluated on a mini-batch B of training samples.

⁵Automatic Gradient Descent: Deep Learning without Hyperparameters

Automatic Gradient Descent⁶



⁶Automatic Gradient Descent: Deep Learning without Hyperparameters

Prodigy⁷

Algorithm 1 Prodigy (GD version)

```
1: Input:  $d_0 > 0, x_0, G \geq 0$ 
2: for  $k = 0$  to  $n$  do
3:    $g_k \in \partial f(x_k)$ 
4:   Choose weight  $\lambda_k$  (default:  $\lambda_k = 1$ )
5:    $\eta_k = \frac{d_k^2 \lambda_k}{\sqrt{d_k^2 G^2 + \sum_{i=0}^k d_i^2 \lambda_i^2 \|g_i\|^2}}$ 
6:    $x_{k+1} = x_k - \eta_k g_k$ 
7:    $\hat{d}_{k+1} = \frac{\sum_{i=0}^k \eta_i \langle g_i, x_0 - x_i \rangle}{\|x_{k+1} - x_0\|}$ 
8:    $d_{k+1} = \max(d_k, \hat{d}_{k+1})$ 
9: end for
10: Return  $\hat{x}_n = \frac{1}{n+1} \sum_{k=0}^n \eta_k x_k$ 
```

Algorithm 2 Prodigy (Dual Averaging version)

```
1: Input:  $d_0 > 0, x_0, G \geq 0; s_0 = 0 \in \mathbb{R}^p$ 
2: for  $k = 0$  to  $n$  do
3:    $g_k \in \partial f(x_k)$ 
4:    $\lambda_k = d_k^2$ 
5:    $s_{k+1} = s_k + \lambda_k g_k$ 
6:    $\hat{d}_{k+1} = \frac{\sum_{i=0}^k \lambda_i \langle g_i, x_0 - x_i \rangle}{\|s_{k+1}\|}$ 
7:    $d_{k+1} = \max(d_k, \hat{d}_{k+1})$ 
8:    $\gamma_{k+1} = \frac{1}{\sqrt{\lambda_{k+1} G^2 + \sum_{i=0}^k \lambda_i \|g_i\|^2}}$ 
9:    $x_{k+1} = x_0 - \gamma_{k+1} s_{k+1}$ 
10: end for
11: Return  $\bar{x}_n = \frac{1}{n+1} \sum_{k=0}^n \lambda_k x_k$ 
```

⁷Prodigy: An Expeditiously Adaptive Parameter-Free Learner

Algorithm 1 Proposed optimizer

Require: Learning rate η , momentum μ , weight decay λ

- 1: Initialize $B_0 \leftarrow 0$
 - 2: **for** $t = 1, \dots$ **do**
 - 3: Compute gradient $G_t \leftarrow \nabla_{\theta} \mathcal{L}_t(\theta_{t-1})$
 - 4: $B_t \leftarrow \mu B_{t-1} + G_t$
 - 5: $G_t \leftarrow \mu B_t + G_t$
 - 6: $O_t \leftarrow \text{NewtonSchulz5}(G_t)$
 - 7: Update parameters $\theta_t \leftarrow \theta_{t-1} - \eta(O_t + \lambda \theta_{t-1})$
 - 8: **end for**
 - 9: **return** θ_t
-

Scaling Laws

Cooldown^{10 11}



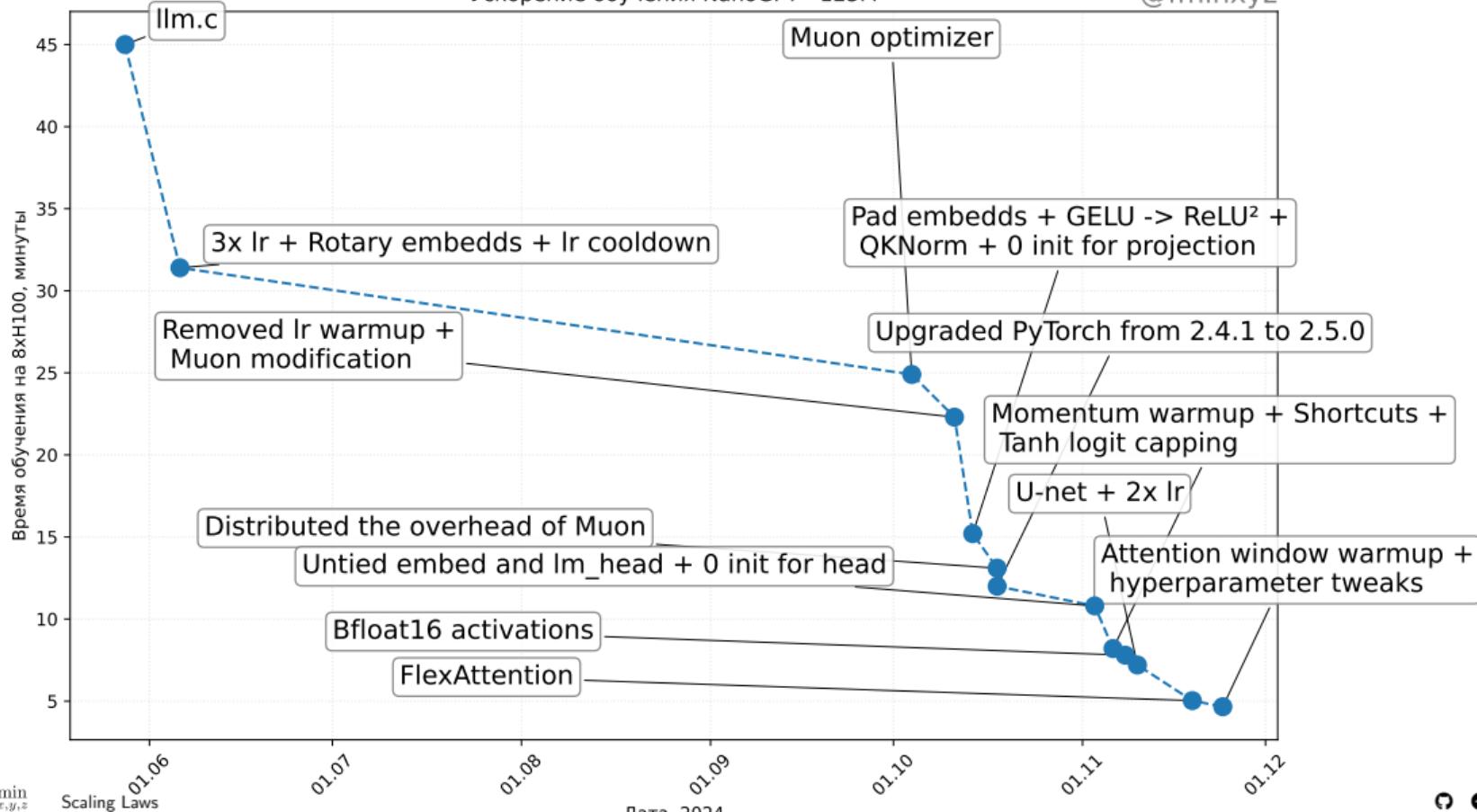
¹⁰Scaling Laws and Compute-Optimal Training Beyond Fixed Training Durations

¹¹Scaling Vision Transformers

NanoGPT speedrun

Ускорение обучения NanoGPT - 125M

@fminxyz



Работают ли трюки, если увеличить размер модели?

Scaling up the NanoGPT (124M) speedrun



Рис. 5: Источник

Работают ли трюки, если увеличить размер модели?

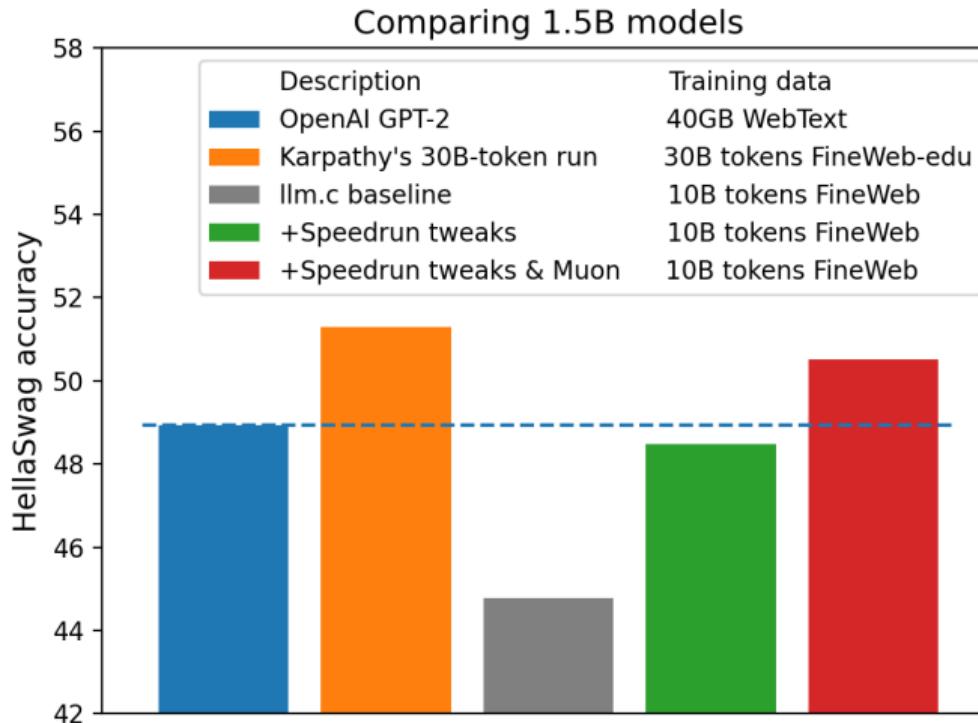
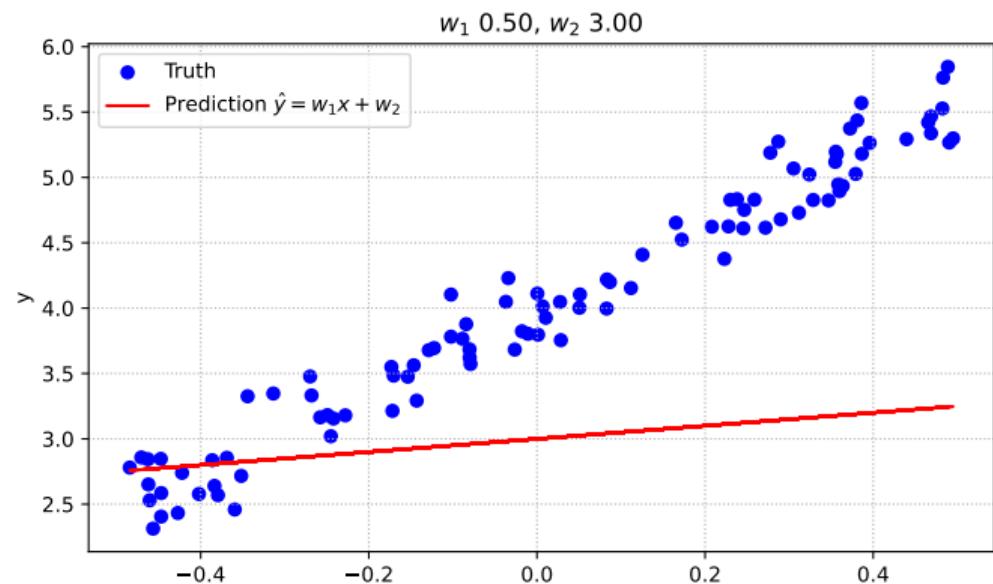
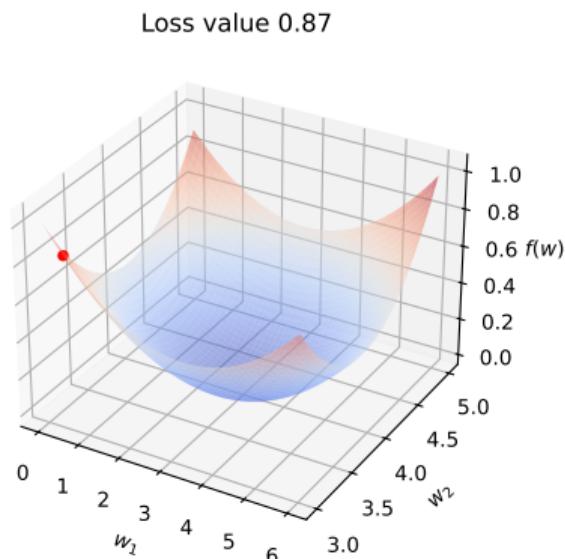


Рис. 6: Источник

Градиентный спуск для линейной регрессии



Методы оптимизации

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

Методы нулевого порядка

- Метод Нелдера - Мида
- Эволюционные методы
- Генетические алгоритмы
- Безградиентные методы
- и другие...

Методы оптимизации

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

Методы нулевого порядка

- Метод Нелдера - Мида
- Эволюционные методы
- Генетические алгоритмы
- Безградиентные методы
- и другие...

Методы первого порядка

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

Методы оптимизации

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

Методы нулевого порядка

- Метод Нелдера - Мида
- Эволюционные методы
- Генетические алгоритмы
- Безградиентные методы
- и другие...

Методы первого порядка

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

Методы второго порядка

$$x_{k+1} = x_k - \alpha_k [\nabla^2 f(x_k)]^{-1} \nabla f(x_k)$$

Проклятие размерности методов нулевого порядка

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

Проклятие размерности методов нулевого порядка

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

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

Zero order GD: $x_{k+1} = x_k - \alpha_k G,$

где G - двухточечная или многоточечная оценка градиента по значениям функции

Проклятие размерности методов нулевого порядка

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

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

Zero order GD: $x_{k+1} = x_k - \alpha_k G,$

где G - двухточечная или многоточечная оценка градиента по значениям функции

	$f(x)$ - гладкая	$f(x)$ - гладкая и выпуклая	$f(x)$ - гладкая и сильно выпуклая
GD	$\ \nabla f(x_k)\ ^2 \approx \mathcal{O}\left(\frac{1}{k}\right)$	$f(x_k) - f^* \approx \mathcal{O}\left(\frac{1}{k}\right)$	$\ x_k - x^*\ ^2 \approx \mathcal{O}\left(\left(1 - \frac{\mu}{L}\right)^k\right)$
Zero order GD	$\ \nabla f(x_k)\ ^2 \approx \mathcal{O}\left(\frac{n}{k}\right)$	$f(x_k) - f^* \approx \mathcal{O}\left(\frac{n}{k}\right)$	$\ x_k - x^*\ ^2 \approx \mathcal{O}\left(\left(1 - \frac{\mu}{nL}\right)^k\right)$

Пример: задача многомерного шкалирования

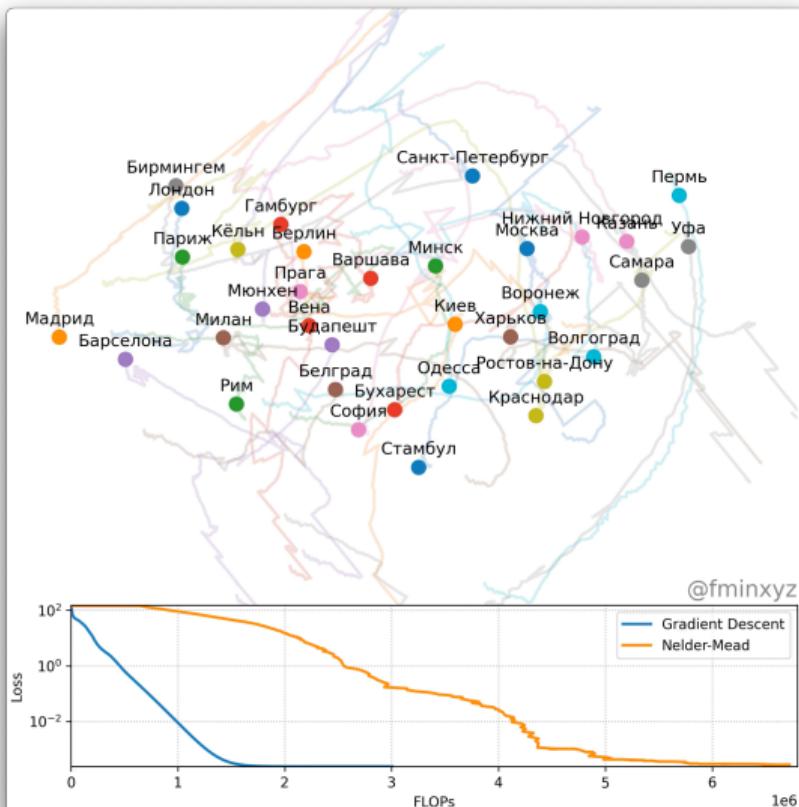
Пусть у нас есть матрица попарных расстояний для N d -мерных объектов $D \in \mathbb{R}^{N \times N}$. По этой матрице мы должны восстановить начальные координаты $W_i \in \mathbb{R}^d$, $i = 1, \dots, N$.

Пример: задача многомерного шкалирования

Пусть у нас есть матрица попарных расстояний для N d -мерных объектов $D \in \mathbb{R}^{N \times N}$. По этой матрице мы должны восстановить начальные координаты $W_i \in \mathbb{R}^d$, $i = 1, \dots, N$.

$$L(W) = \sum_{i,j=1}^N (\|W_i - W_j\|_2^2 - D_{i,j})^2 \rightarrow \min_{W \in \mathbb{R}^{N \times d}}$$

Пример: задача многомерного шкалирования



В машинном обучении задача оптимизации часто имеет особенный вид

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

- $f_i(x)$ - значение функции потерь модели при весах x на i -ом объекте обучающей выборки

В машинном обучении задача оптимизации часто имеет особенный вид

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

- $f_i(x)$ - значение функции потерь модели при весах x на i -ом объекте обучающей выборки
- n - число обучаемых параметров модели ($175 \cdot 10^9$ для GPT-3.5, $405 \cdot 10^9$ для Llama 3.2)

В машинном обучении задача оптимизации часто имеет особенный вид

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

- $f_i(x)$ - значение функции потерь модели при весах x на i -ом объекте обучающей выборки
- n - число обучаемых параметров модели ($175 \cdot 10^9$ для GPT-3.5, $405 \cdot 10^9$ для Llama 3.2)
- N - размер обучающей выборки (для ImageNet $\approx 1.4 \cdot 10^7$, для WikiText $\approx 10^8$, для FineWeb-Edu $\approx 1.3 \cdot 10^{12}$).

В машинном обучении задача оптимизации часто имеет особенный вид

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

- $f_i(x)$ - значение функции потерь модели при весах x на i -ом объекте обучающей выборки
- n - число обучаемых параметров модели ($175 \cdot 10^9$ для GPT-3.5, $405 \cdot 10^9$ для Llama 3.2)
- N - размер обучающей выборки (для ImageNet $\approx 1.4 \cdot 10^7$, для WikiText $\approx 10^8$, для FineWeb-Edu $\approx 1.3 \cdot 10^{12}$).

В машинном обучении задача оптимизации часто имеет особенный вид

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

- $f_i(x)$ - значение функции потерь модели при весах x на i -ом объекте обучающей выборки
- n - число обучаемых параметров модели ($175 \cdot 10^9$ для GPT-3.5, $405 \cdot 10^9$ для Llama 3.2)
- N - размер обучающей выборки (для ImageNet $\approx 1.4 \cdot 10^7$, для WikiText $\approx 10^8$, для FineWeb-Edu $\approx 1.3 \cdot 10^{12}$).

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

В машинном обучении задача оптимизации часто имеет особенный вид

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

- $f_i(x)$ - значение функции потерь модели при весах x на i -ом объекте обучающей выборки
- n - число обучаемых параметров модели ($175 \cdot 10^9$ для GPT-3.5, $405 \cdot 10^9$ для Llama 3.2)
- N - размер обучающей выборки (для ImageNet $\approx 1.4 \cdot 10^7$, для WikiText $\approx 10^8$, для FineWeb-Edu $\approx 1.3 \cdot 10^{12}$).

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

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

Тяжело считать при больших N !

В машинном обучении задача оптимизации часто имеет особенный вид

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

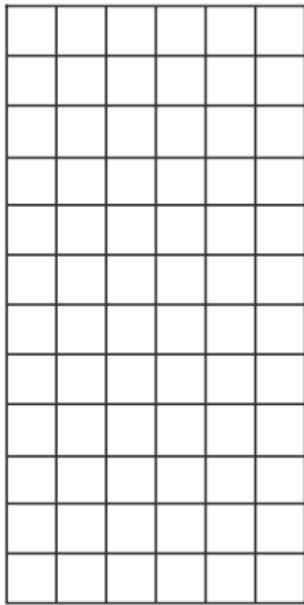
- $f_i(x)$ - значение функции потерь модели при весах x на i -ом объекте обучающей выборки
- n - число обучаемых параметров модели ($175 \cdot 10^9$ для GPT-3.5, $405 \cdot 10^9$ для Llama 3.2)
- N - размер обучающей выборки (для ImageNet $\approx 1.4 \cdot 10^7$, для WikiText $\approx 10^8$, для FineWeb-Edu $\approx 1.3 \cdot 10^{12}$).

$$\nabla f(x_k) \approx \frac{1}{b} \sum_{i=1}^b \nabla f_{j_i}(x)$$

$$x_{k+1} = x_k - \frac{\alpha_k}{b} \sum_{i=1}^b \nabla f_{j_i}(x) \tag{SGD}$$

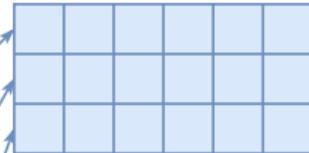
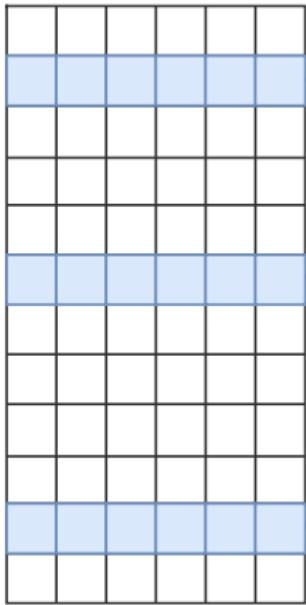
Можно считать при больших N !

Данные



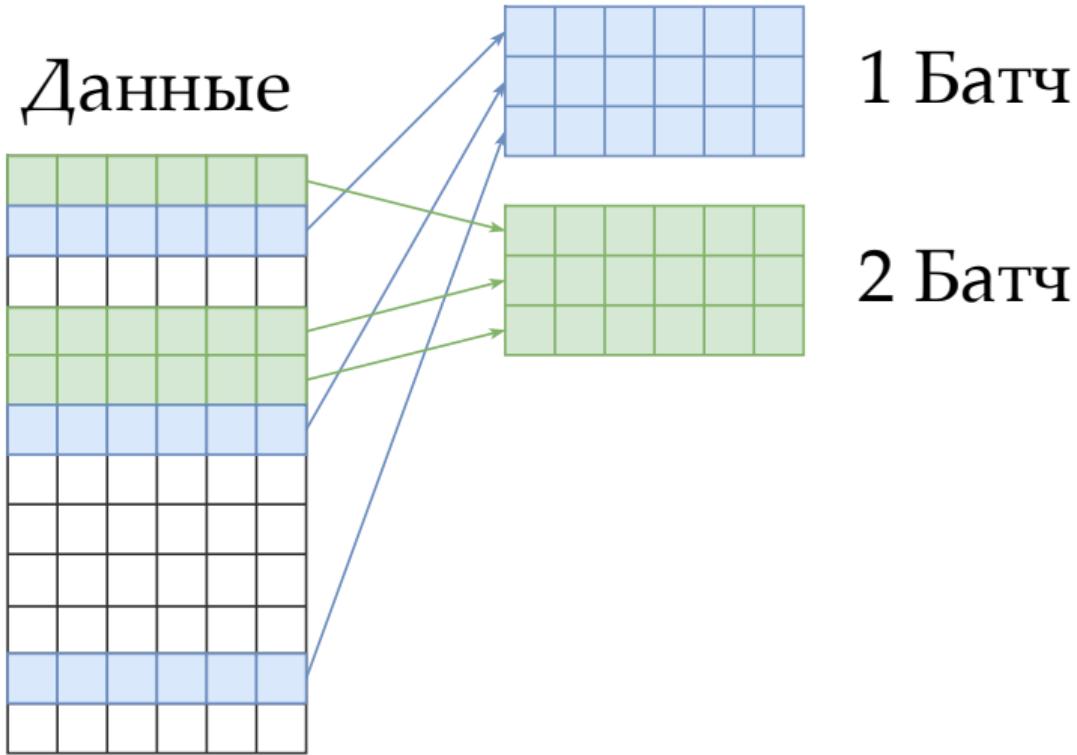
Идея SGD и батчей

Данные

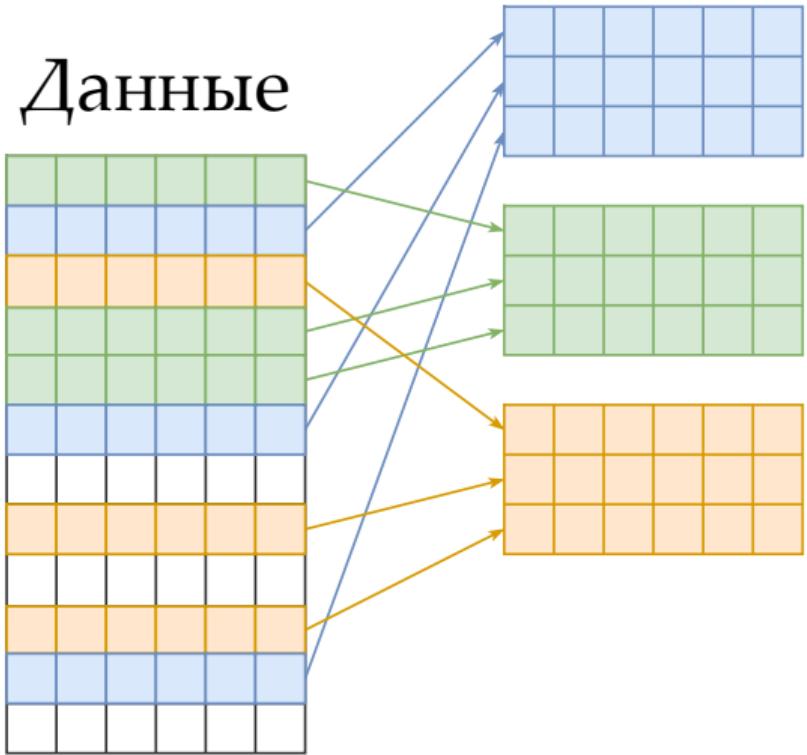


1 Батч

Идея SGD и батчей



Идея SGD и батчей

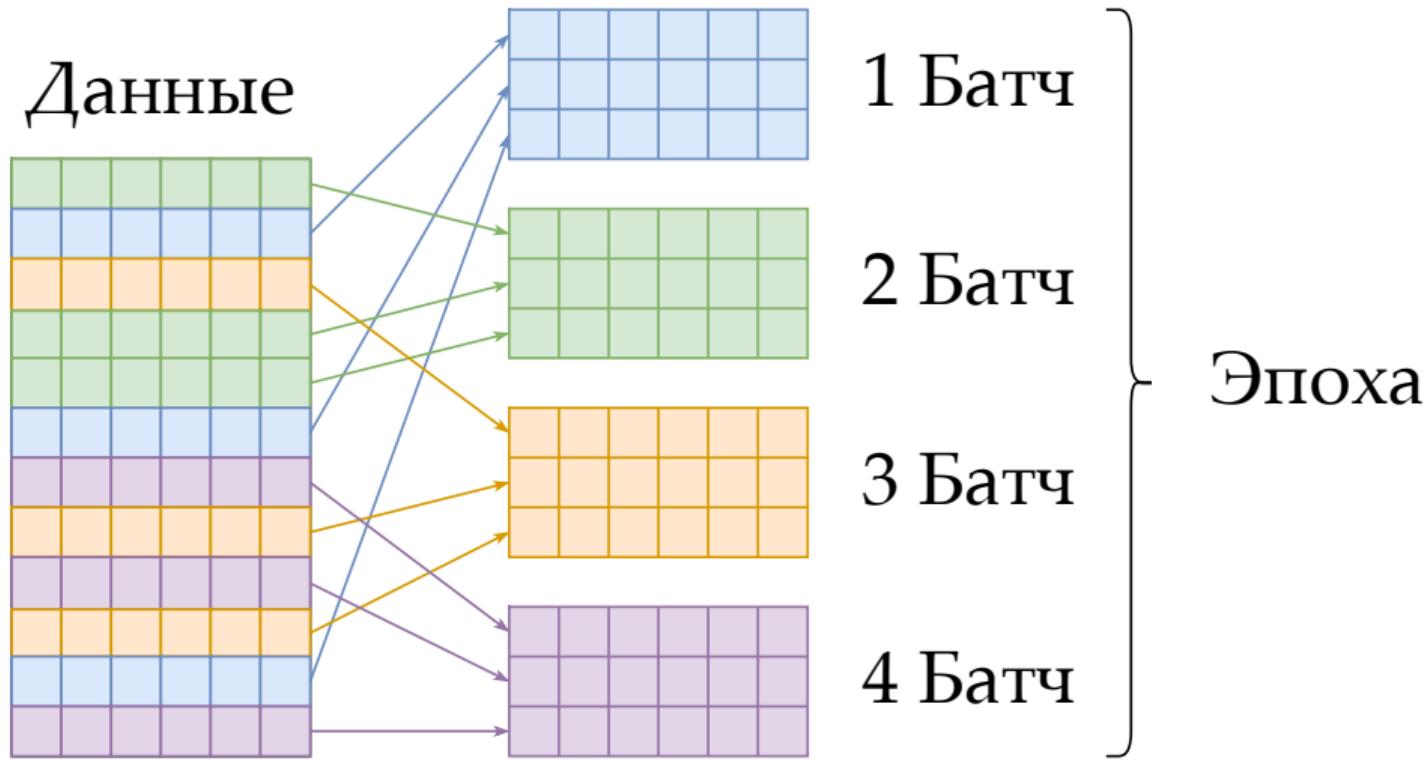


1 Батч

2 Батч

3 Батч

Идея SGD и батчей



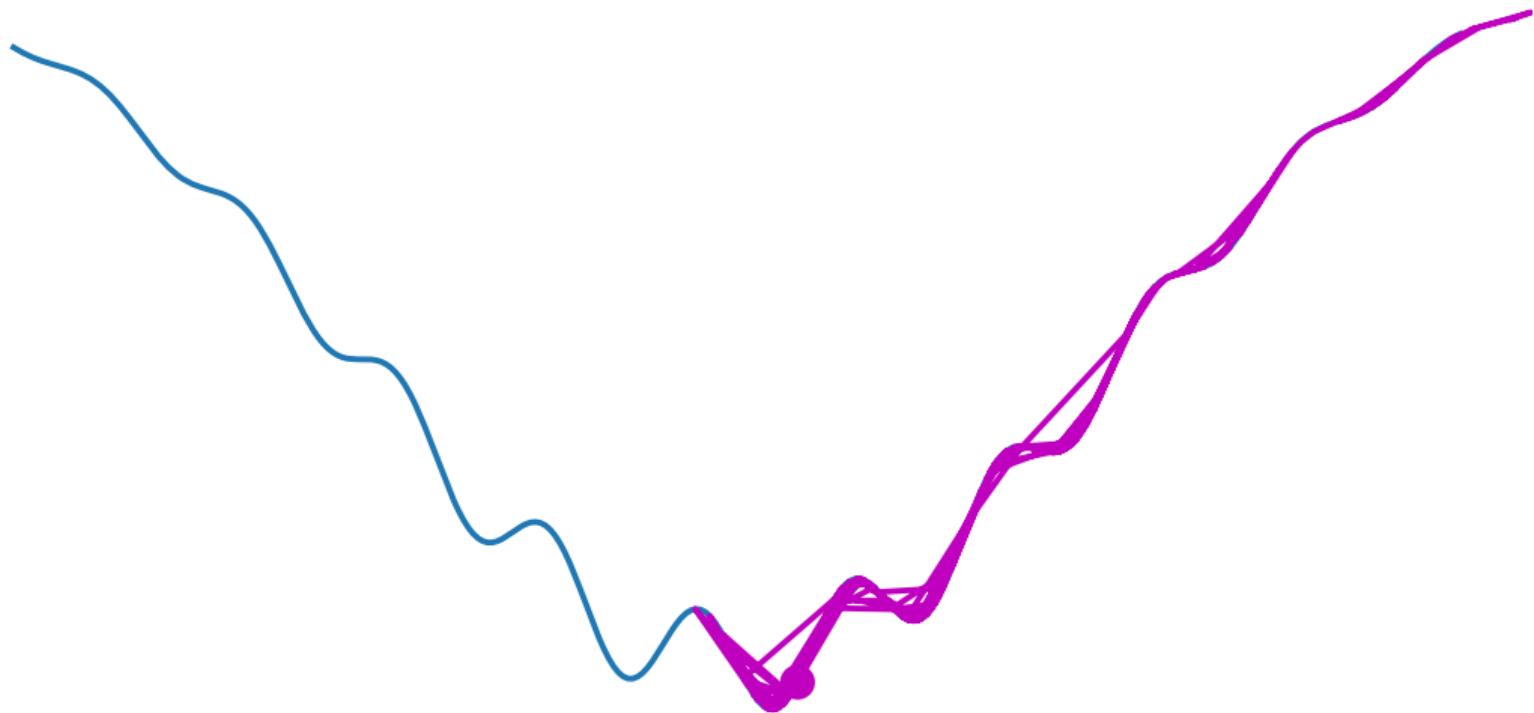
Градиентный спуск сходится к локальному минимуму



Градиентный спуск сходится к локальному минимуму

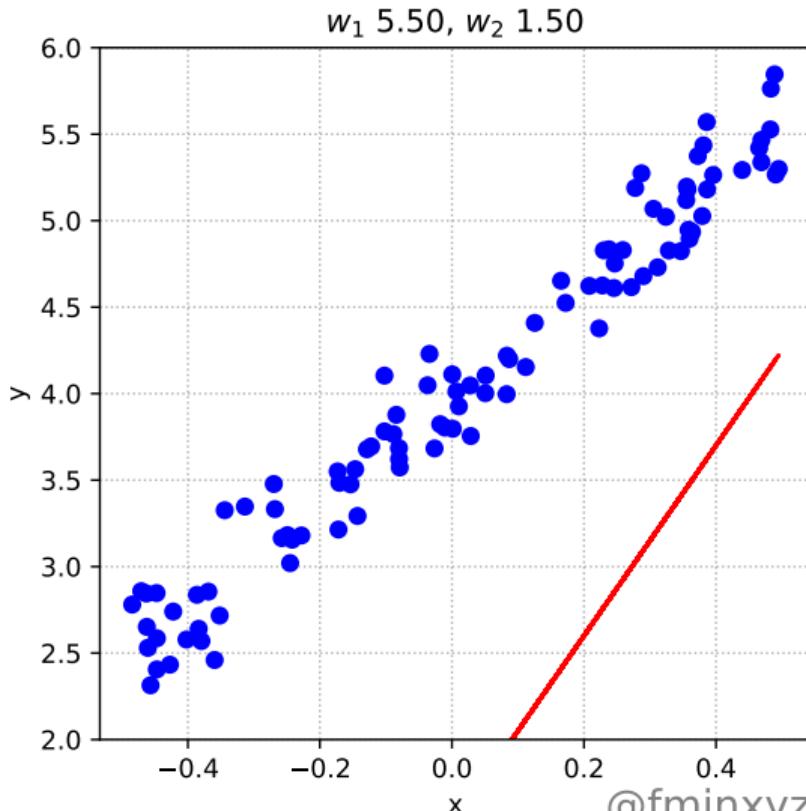


Стохастический градиентный спуск
выпрыгивает из локальных минимумов



SGD не сходится с постоянным шагом для выпуклой функции

Stochastic Gradient Descent. Batch = 1



@fminxyz

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:

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

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:

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

Сходимость в зависимости от размера батча

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

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



Эта задача оптимизации даже сложнее, чем кажется

Улучшаем SGD - адаптивные методы (Adam) ^{12 13}

- Одна из самых цитируемых научных работ в мире

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

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

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

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

Улучшаем SGD - адаптивные методы (Adam) ^{12 13}

- Одна из самых цитируемых научных работ в мире
- В 2018-2019 годах вышли статьи, указывающие на ошибку в оригинальной статье

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

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

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

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

Улучшаем SGD - адаптивные методы (Adam) ^{12 13}

- 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)

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

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

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

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

Улучшаем SGD - адаптивные методы (Adam) 12 13

- 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

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

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

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

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

Улучшаем SGD - адаптивные методы (Adam) ^{12 13}

- 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?

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

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

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

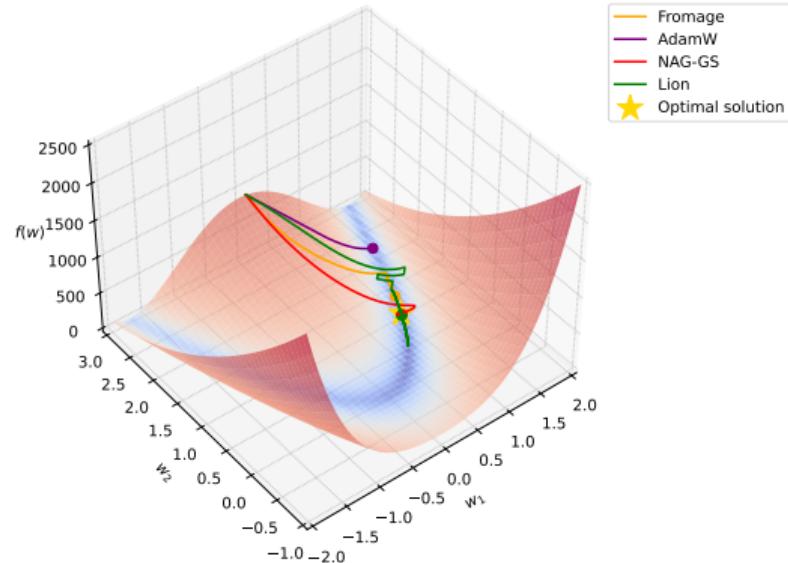
$$x_j^{(k)} = x_j^{(k-1)} - \alpha \frac{\hat{m}_j}{\sqrt{\hat{v}_j} + \epsilon}$$

¹²Adam: A Method for Stochastic Optimization

¹³On the Convergence of Adam and Beyond

- Требует хранения одного дополнительного вектора, вместо двух, как в Adam.

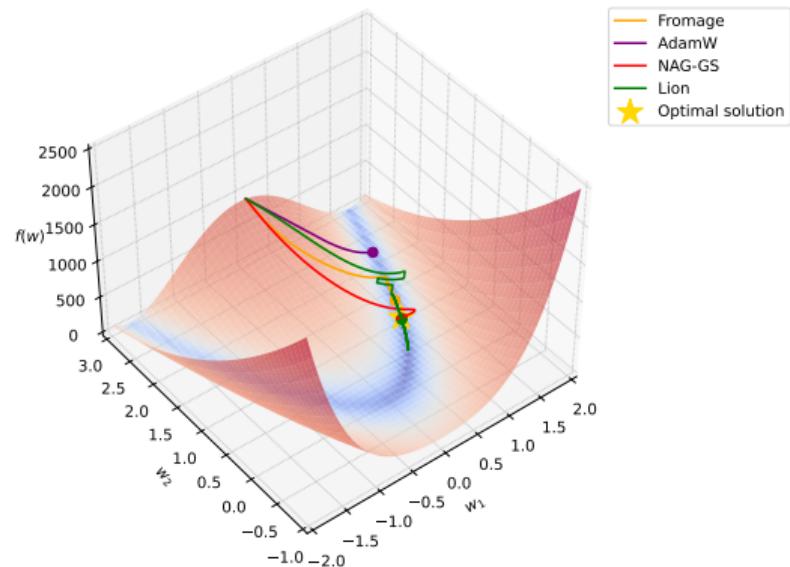
Rosenbrock Function.
Adaptive stochastic gradient algorithms.
Learning rate 0.003



NAG-GS¹⁴

- Требует хранения одного дополнительного вектора, вместо двух, как в Adam.
- Качество в ряде задач сопоставимо с AdamW

Rosenbrock Function.
Adaptive stochastic gradient algorithms.
Learning rate 0.003



¹⁴NAG-GS: Semi-Implicit, Accelerated and Robust Stochastic Optimizer

Визуализация с помощью проекции на прямую

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

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

Визуализация с помощью проекции на прямую

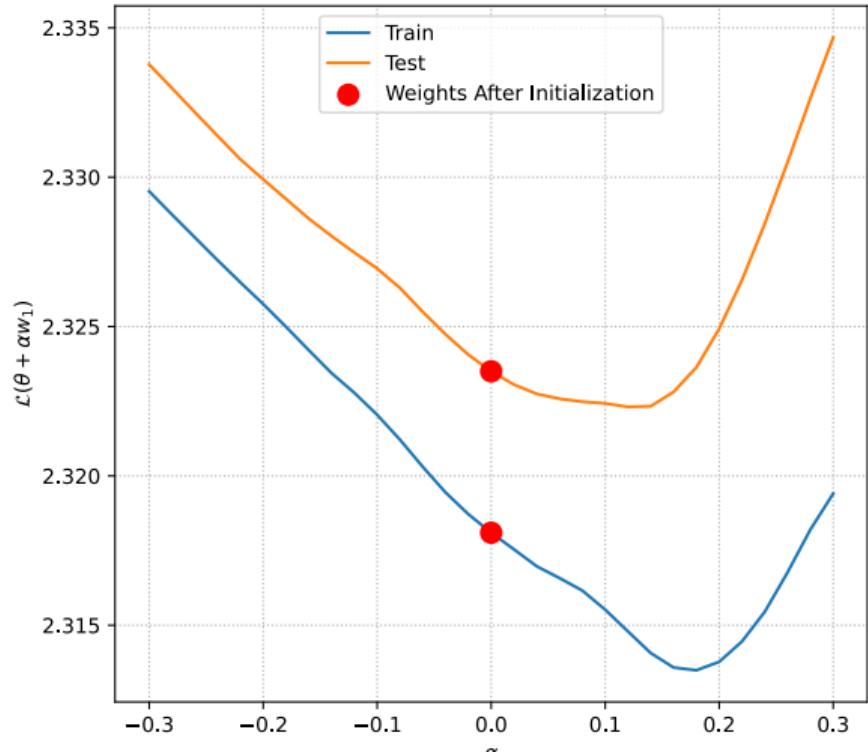
- Обозначим начальную точку как w_0 , представляющую собой веса нейронной сети при инициализации. Веса, полученные после обучения, обозначим как \hat{w} .
- Генерируем случайный вектор такой же размерности и нормы $w_1 \in \mathbb{R}^p$, затем вычисляем значение функции потерь вдоль этого вектора:

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

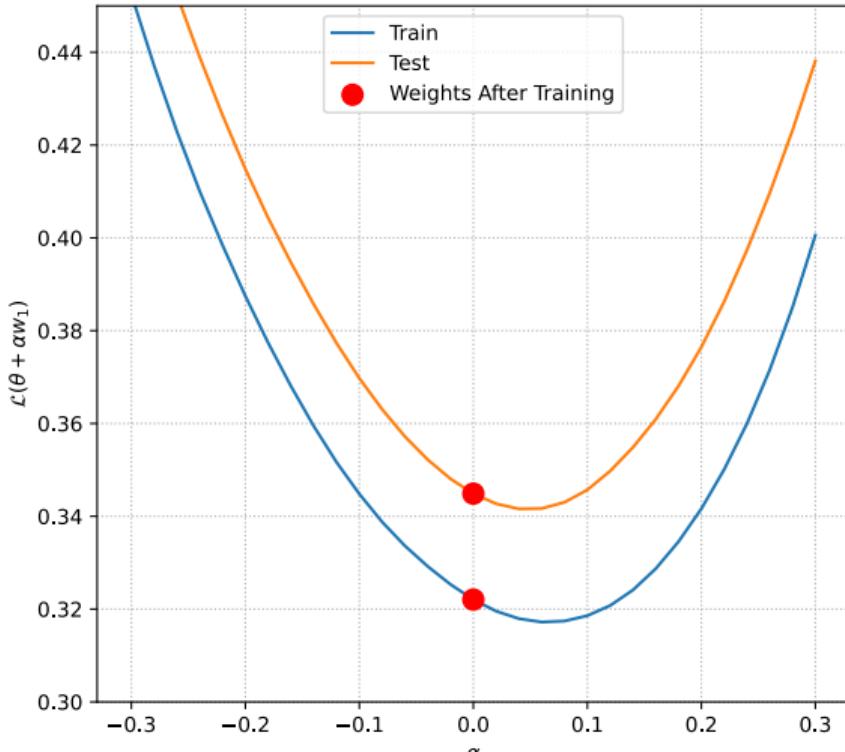
Проекция функции потерь нейронной сети на прямую

No Dropout

Loss surface, Line projection around the starting point



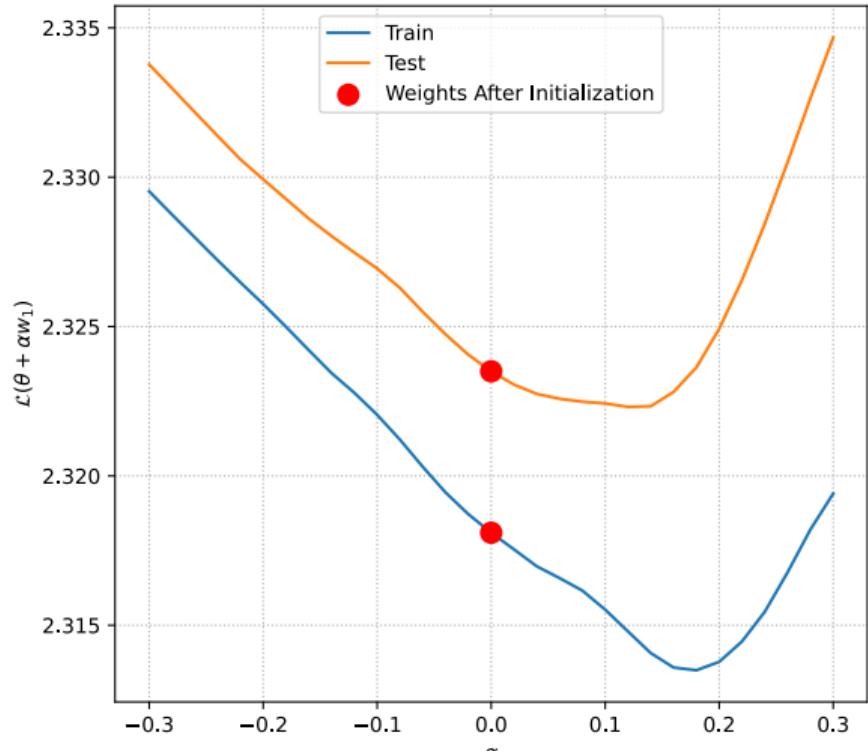
Loss surface, Line projection around the final point



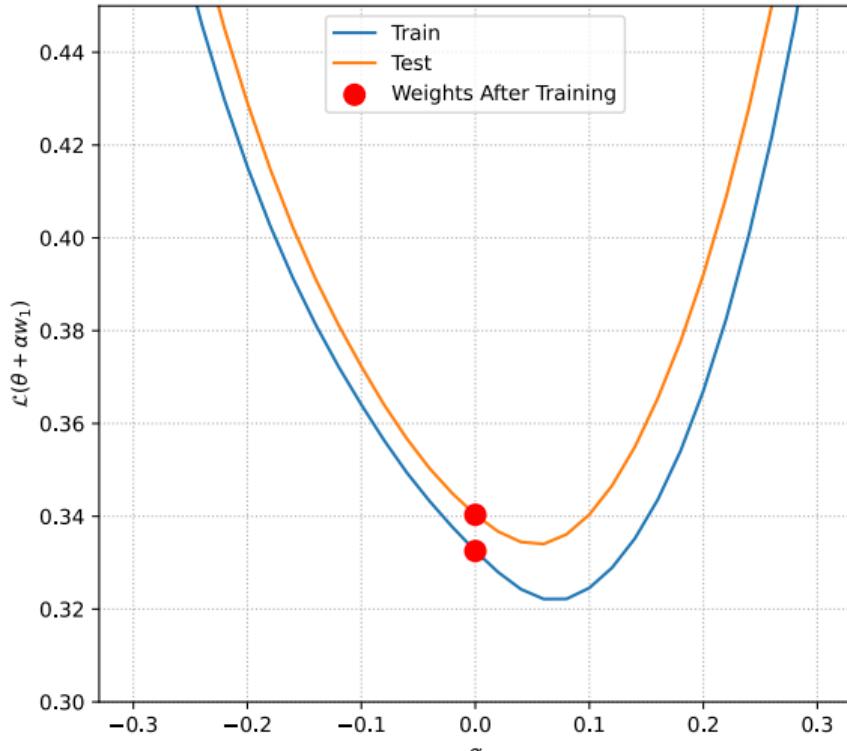
Проекция функции потерь нейронной сети на прямую

Dropout 0.2

Loss surface, Line projection around the starting point



Loss surface, Line projection around the final point



Проекция функции потерь нейронной сети на плоскость

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

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

No Dropout. Plane projection of loss surface.

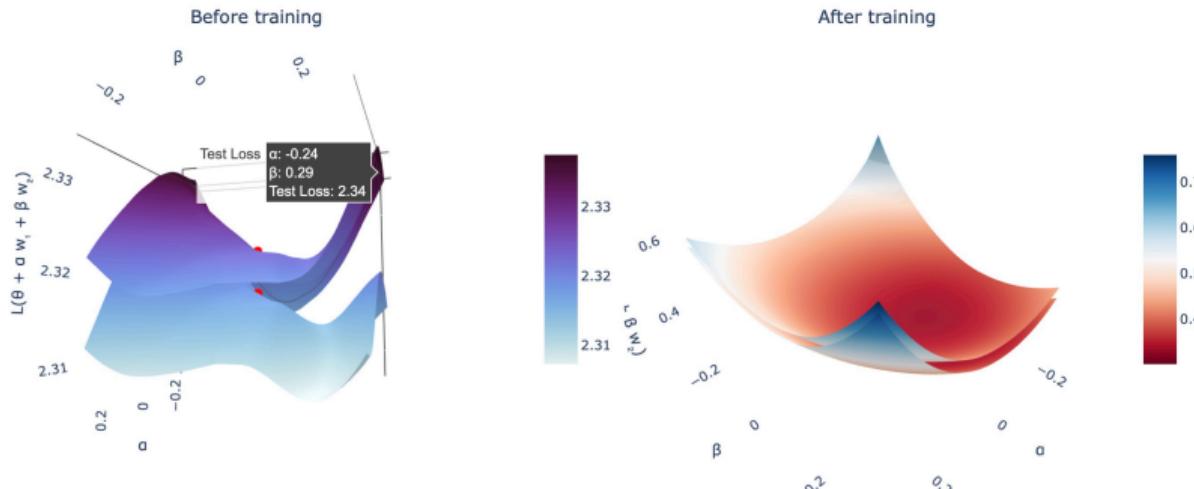


Проекция функции потерь нейронной сети на плоскость

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

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

No Dropout. Plane projection of loss surface.



Может ли быть полезно изучение таких проекций? ¹⁵



Рис. 10: The loss surface of ResNet-56
without skip connections

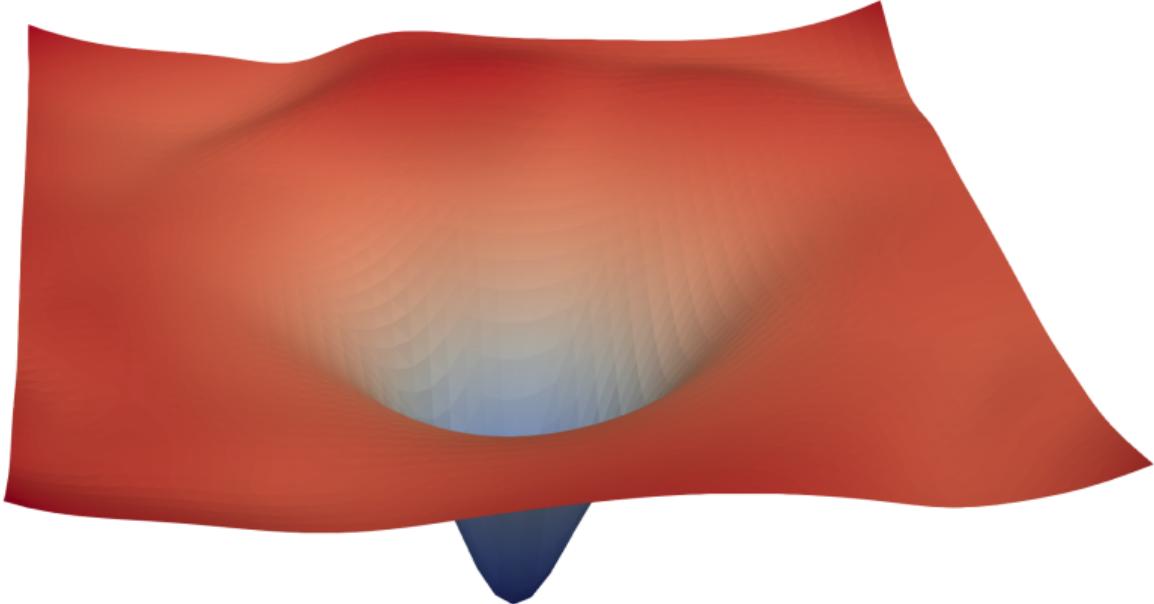


Рис. 11: The loss surface of ResNet-56 with skip connections

¹⁵Visualizing 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? ¹⁶

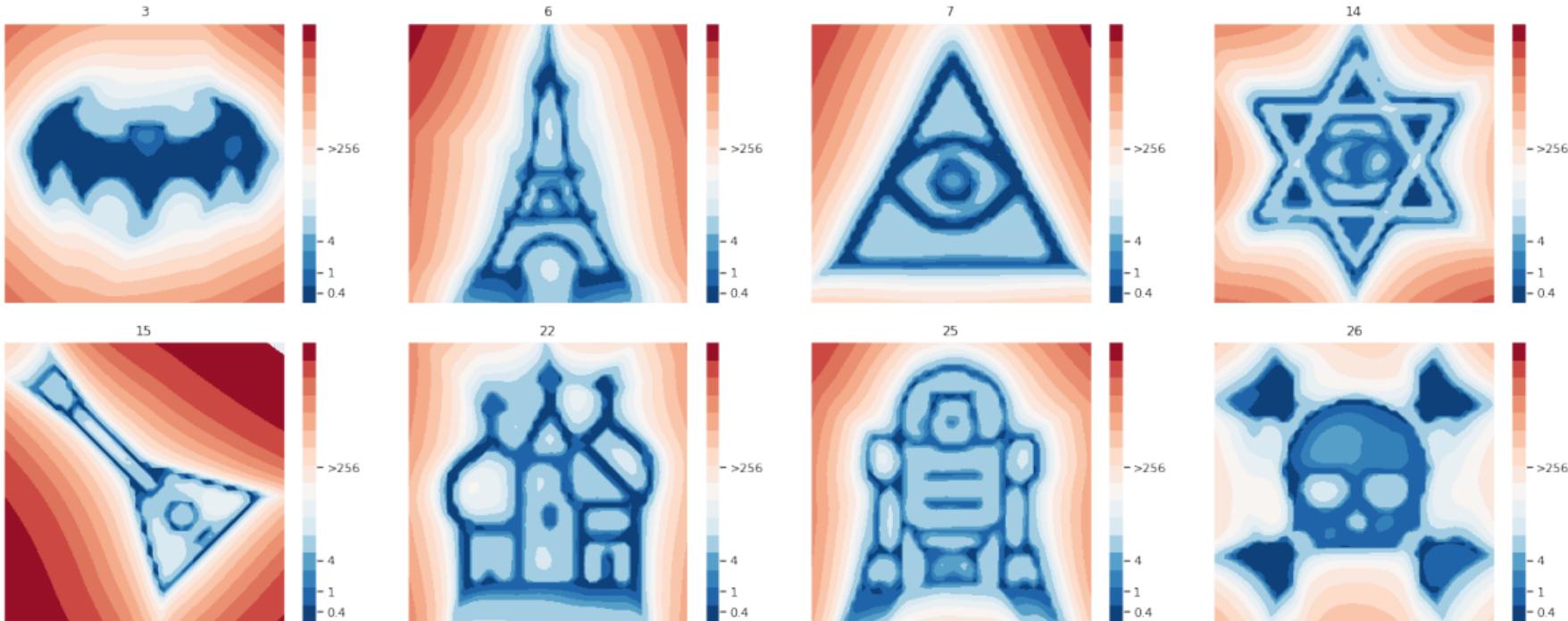


Рис. 12: Examples of a loss landscape of a typical CNN model on FashionMNIST and CIFAR10 datasets found with MPO. Loss values are color-coded according to a logarithmic scale

¹⁶Loss Landscape Sightseeing with Multi-Point Optimization, Ivan Skorokhodov, Mikhail Burtsev

Ширина локальных минимумов

Узкие и широкие локальные минимумы



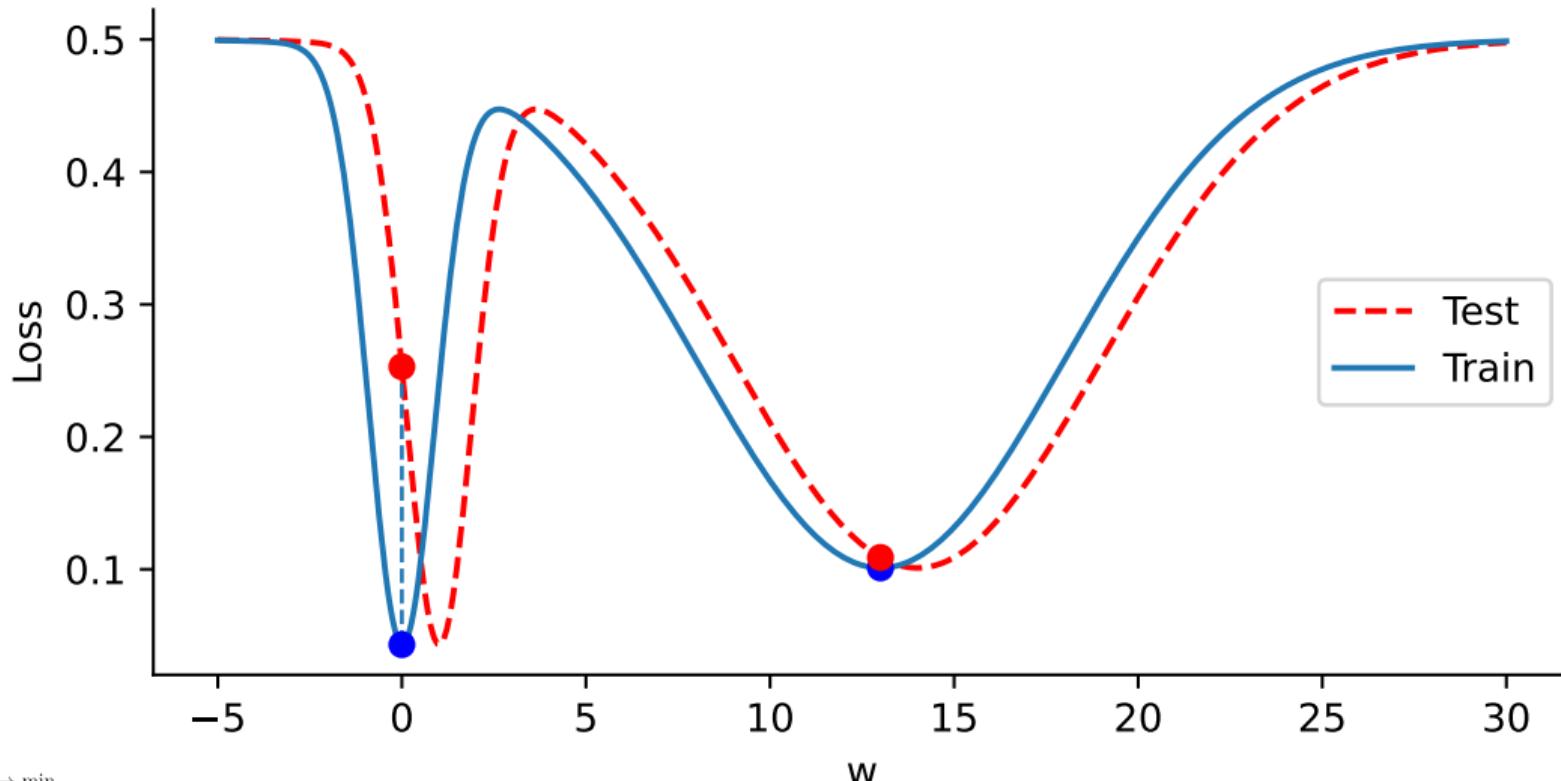
Ширина локальных минимумов

Узкие и широкие локальные минимумы



Ширина локальных минимумов

Узкие и широкие локальные минимумы



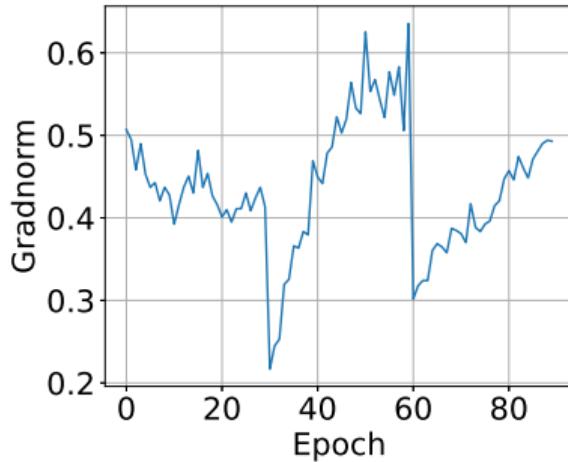
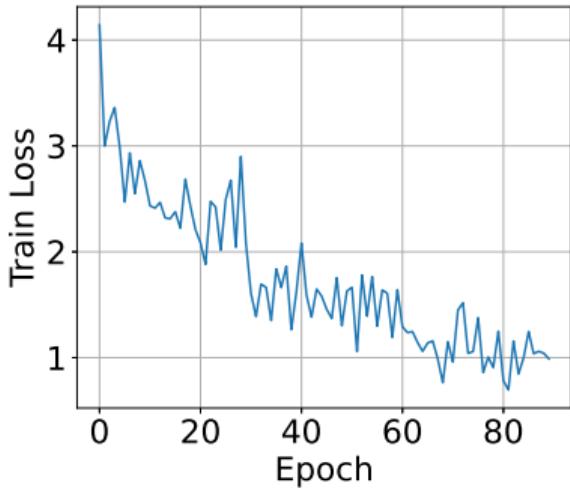
Градиентный спуск с маленьким шагом
сходится в узкий локальный минимум



Градиентный спуск с большим шагом
избегает узкого локального минимума



Модели не сходятся к стационарным точкам, но это не страшно¹⁷



¹⁷NN Weights Do Not Converge to Stationary Points

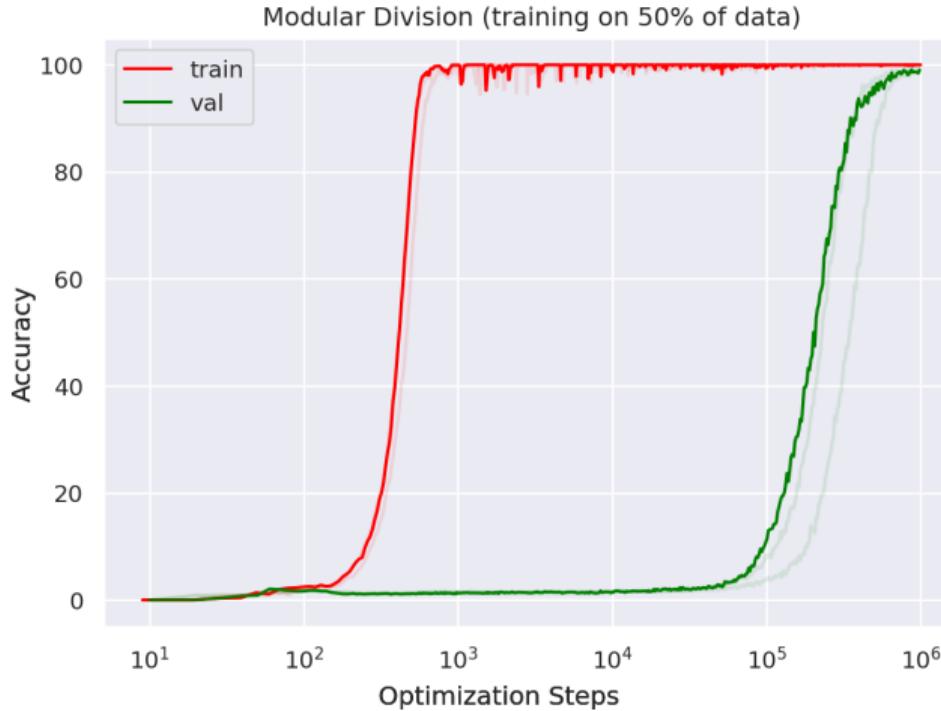
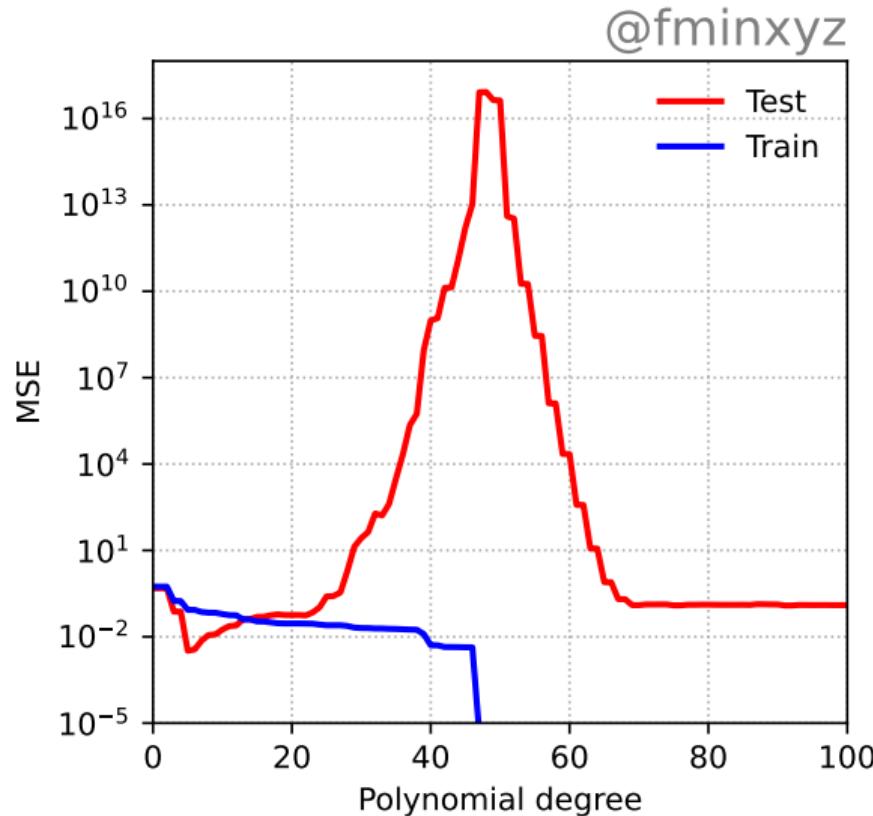


Рис. 13: Training transformer with 2 layers, width 128, and 4 attention heads, with a total of about $4 \cdot 10^5$ non-embedding parameters. Reproduction of experiments (~ half an hour) is available here

¹⁸Grokking: Generalization Beyond Overfitting on Small Algorithmic Datasets, Alethea Power, Yuri Burda, Harri Edwards, Igor Babuschkin, Vedant Misra

Double Descent¹⁹



¹⁹Reconciling modern machine learning practice and the bias-variance trade-off, Mikhail Belkin, Daniel Hsu, Siyuan Ma, Soumik Mandal
 $f \rightarrow \min_{x,y,z}$ Эта задача оптимизации даже сложнее, чем кажется

Обучение больших моделей

Потребление памяти при обучении GPT-2²⁰



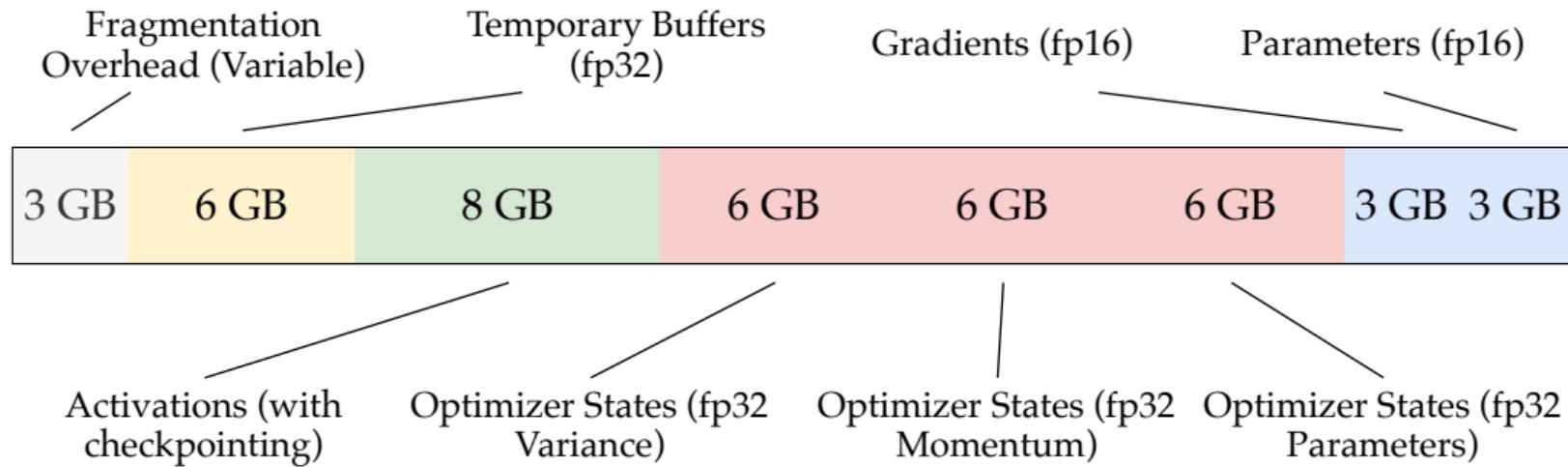
- Размер модели 1.5 В. Веса модели в fp16 занимают всего 3 GB, однако, для наивного обучения не хватит GPU даже на 32 GB

Потребление памяти при обучении GPT-2²⁰



- Размер модели 1.5 В. Веса модели в fp16 занимают всего 3 GB, однако, для наивного обучения не хватит GPU даже на 32 GB
- Для использования Adam в режиме mixed precision необходимо хранить 3 (!) копии модели в fp32.

Потребление памяти при обучении GPT-2²⁰



- Размер модели 1.5 В. Веса модели в fp16 занимают всего 3 GB, однако, для наивного обучения не хватит GPU даже на 32 GB
- Для использования Adam в режиме mixed precision необходимо хранить 3 (!) копии модели в fp32.
- Активации в наивном режиме могут занимать гораздо больше памяти: для длины последовательности 1K и размера батча 32 нужно 60 GB для хранения всех промежуточных активаций. Чекпоинтинг активаций позволяет сократить потребление до 8 GB за счёт их перевычисления (33% computational overhead)

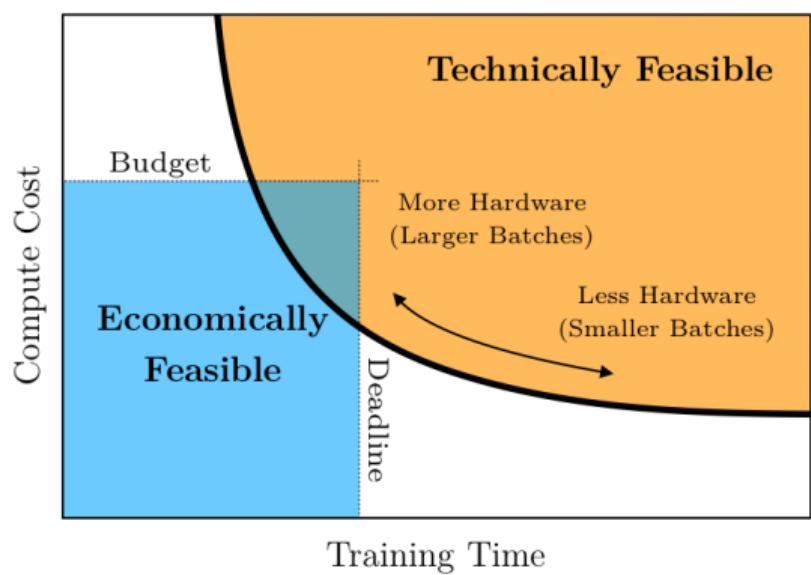
²⁰ZeRO: Memory Optimizations Toward Training Trillion Parameter Models

Large batch training ²¹

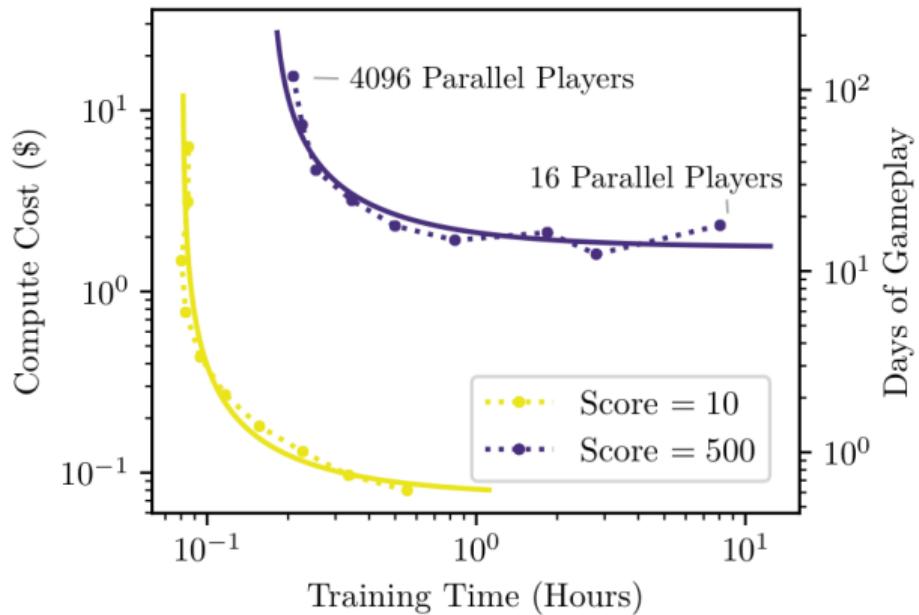


²¹Accurate, Large Minibatch SGD: Training ImageNet in 1 Hour

Large batch training²²

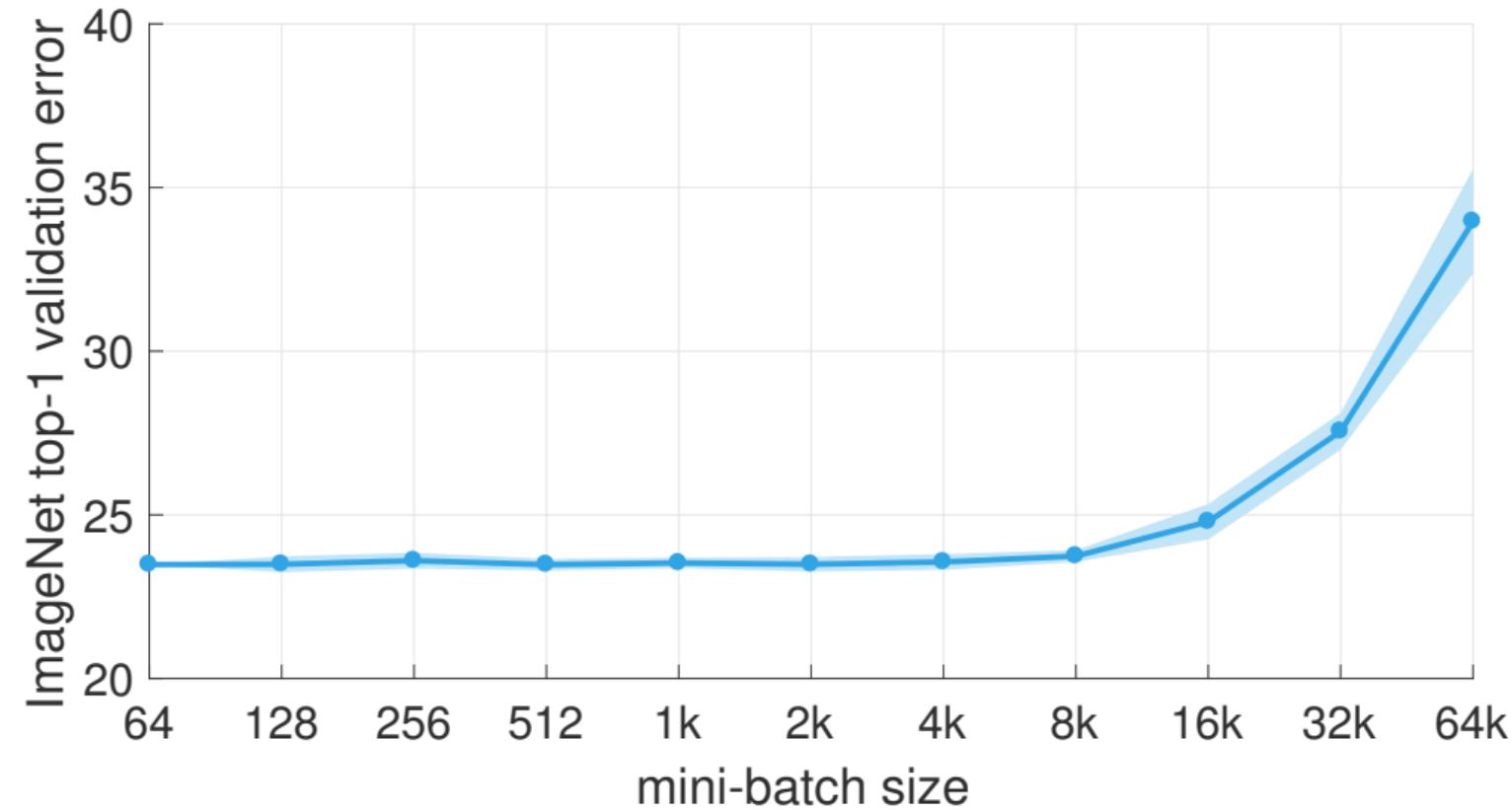


Atari Breakout - Pareto Fronts



²²An Empirical Model of Large-Batch Training

Large batch training²³



²³Accurate, Large Minibatch SGD: Training ImageNet in 1 Hour

Linear and square root scaling rules

When training with large batches, the learning rate must be adjusted to maintain convergence speed and stability. The **linear scaling rule**²⁴ suggests multiplying the learning rate by the same factor as the increase in batch size:

$$\alpha_{\text{new}} = \alpha_{\text{base}} \cdot \frac{\text{Batch Size}_{\text{new}}}{\text{Batch Size}_{\text{base}}}$$

The **square root scaling rule**²⁵ proposes scaling the learning rate with the square root of the batch size increase:

$$\alpha_{\text{new}} = \alpha_{\text{base}} \cdot \sqrt{\frac{\text{Batch Size}_{\text{new}}}{\text{Batch Size}_{\text{base}}}}$$

Authors claimed, that it suits for adaptive optimizers like Adam, RMSProp and etc. while linear scaling rule serves well for SGD.

²⁴Accurate, Large Minibatch SGD: Training ImageNet in 1 Hour

²⁵Learning Rates as a Function of Batch Size: A Random Matrix Theory Approach to Neural Network Training

Gradual warmup²⁶

Gradual warmup helps to avoid instability when starting with large learning rates by slowly increasing the learning rate from a small value to the target value over a few epochs. This is defined as:

$$\alpha_t = \alpha_{\max} \cdot \frac{t}{T_w}$$

where t is the current iteration and T_w is the warmup duration in iterations. In the original paper, authors used first 5 epochs for gradual warmup.

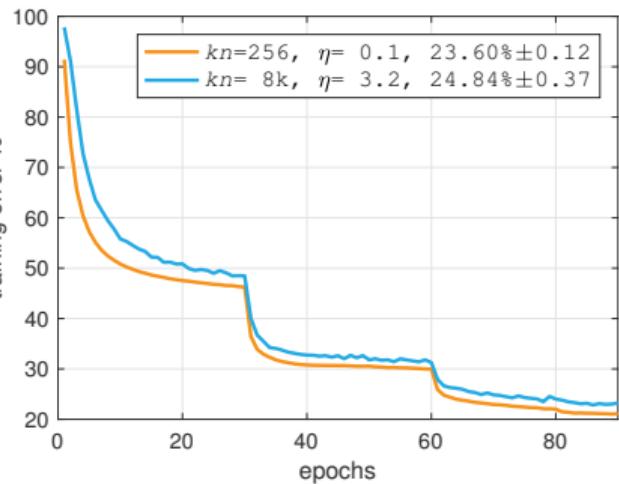


Рис. 14: no warmup

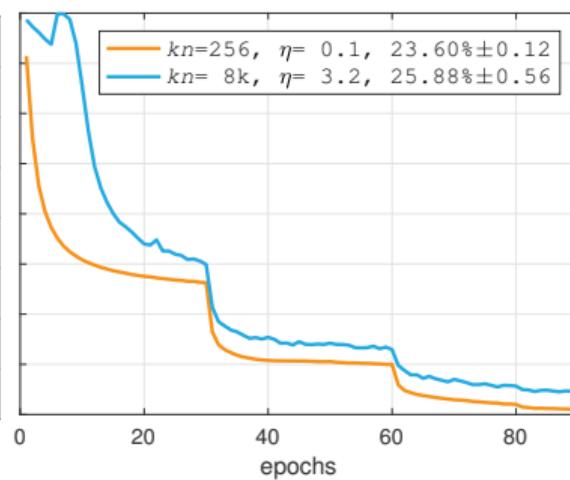


Рис. 15: constant warmup

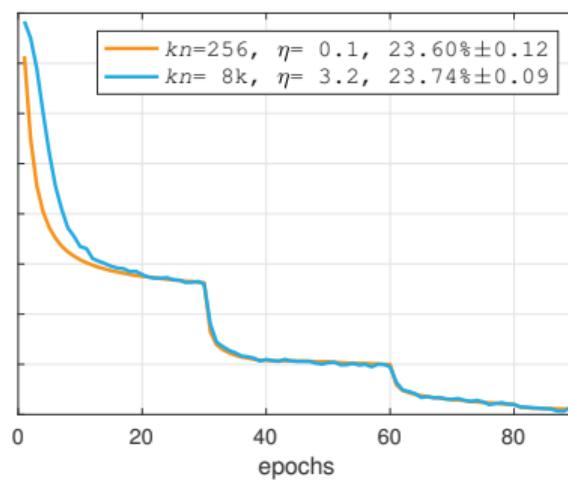


Рис. 16: gradual warmup

²⁶Accurate, Large Minibatch SGD: Training ImageNet in 1 Hour

Спасибо за внимание!



Рис. 17: Мои контакты

Запас

Влияние инициализации весов нейронной сети на сходимость методов

27



²⁷Delving Deep into Rectifiers: Surpassing Human-Level Performance on ImageNet Classification, Kaiming He, Xiangyu Zhang, Shaoqing Ren, Jian Sun

Методы уменьшения дисперсии? Не всё так просто на практике²⁸

²⁸On the Ineffectiveness of Variance Reduced Optimization for Deep Learning