Методы редукции дисперсии: SAG, SVRG, SAGA. Адаптивные стохастические градиентные методы.

Даня Меркулов

ФКН ВШЭ

Напоминание: задача минимизации конечной суммы

От градиентного спуска к стохастическому

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:

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

- Стоимость итерации линейна по n.

От градиентного спуска к стохастическому

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:

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

- Стоимость итерации линейна по n.

От градиентного спуска к стохастическому

$n \sim 15T$ токенов

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:

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

- Стоимость итерации линейна по n.

Стохастический градиентный спуск — несмещённая оценка градиента по случайному индексу $i_k \sim \mathrm{U}\{1, \dots, n\}$:

$$x_{k+1} = x_k - \alpha_k \nabla f_{i_k}(x_k), \qquad \mathbb{E}[\nabla f_{i_k}(x)] = \nabla f(x) \tag{SGD}$$

Сравнение GD и SGD: что мы знаем

Если ∇f — L-липшицев, то:

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

мин
субл

} субл.

- **SGD** — дешёвая итерация $O(1)$, но медленная сублинейная сходимость.

Сравнение GD и SGD: что мы знаем

Если ∇f — L-липшицев, то:

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

- **SGD** — дешёвая итерация $O(1)$, но медленная сублинейная сходимость.
- Сублинейная скорость даже в сильно выпуклом случае.

Сравнение GD и SGD: что мы знаем

Если ∇f — L-липшицев, то:

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

- **SGD** — дешёвая итерация $O(1)$, но медленная сублинейная сходимость.
- Сублинейная скорость даже в сильно выпуклом случае.
- Оценки неулучшаемы при стандартных предположениях.

Сравнение GD и SGD: что мы знаем

Если ∇f — L-липшицев, то:

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

- **SGD** — дешёвая итерация $O(1)$, но медленная сублинейная сходимость.
- Сублинейная скорость даже в сильно выпуклом случае.
- Оценки неулучшаемы при стандартных предположениях.

Сравнение GD и SGD: что мы знаем

Если ∇f — L-липшицев, то:

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

- **SGD** — дешёвая итерация $O(1)$, но медленная сублинейная сходимость.
- Сублинейная скорость даже в сильно выпуклом случае.
- Оценки неулучшаемы при стандартных предположениях.

- Методы с моментом и квазиньютоновские методы **не улучшают скорость** в стохастическом случае — узким местом становится дисперсия, а не число обусловленности.

Сравнение GD и SGD: что мы знаем

Если ∇f — L-липшицев, то:

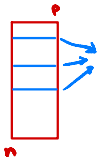
Предположение	Градиентный спуск	Стохастический ГС
PL	$O(\log(1/\varepsilon))$	$O(1/\varepsilon)$
Выпуклая	$O(1/\varepsilon)$	$O(1/\varepsilon^2)$
Невыпуклая	$O(1/\varepsilon)$	$O(1/\varepsilon^2)$

- **SGD** — дешёвая итерация $O(1)$, но медленная сублинейная сходимость.
- Сублинейная скорость даже в сильно выпуклом случае.
- Оценки неулучшаемы при стандартных предположениях.

- Методы с моментом и квазиньютоновские методы **не улучшают скорость** в стохастическом случае — узким местом становится дисперсия, а не число обусловленности.

- **Вопрос лекции**: можно ли получить **линейную** скорость, как у GD, при стоимости итерации, как у SGD?

SGD с постоянным шагом не сходится



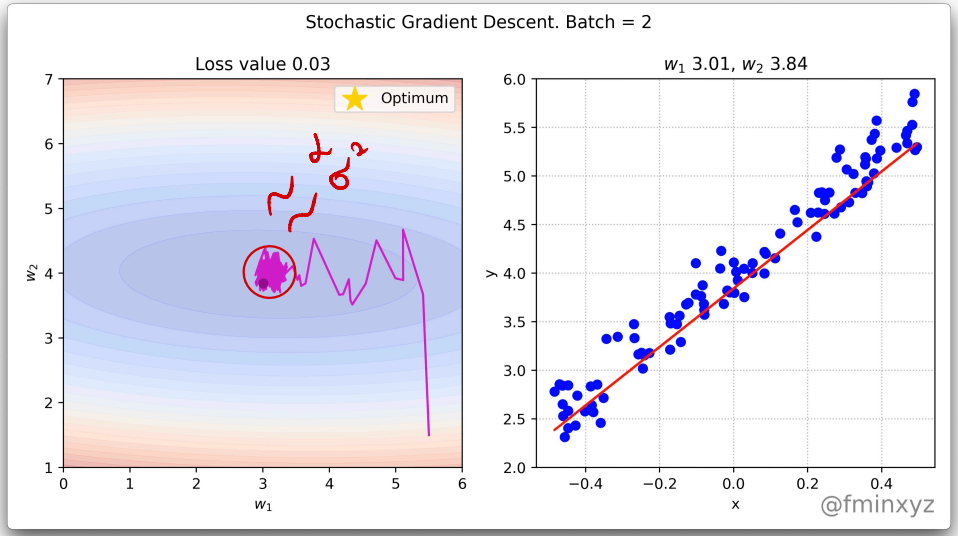
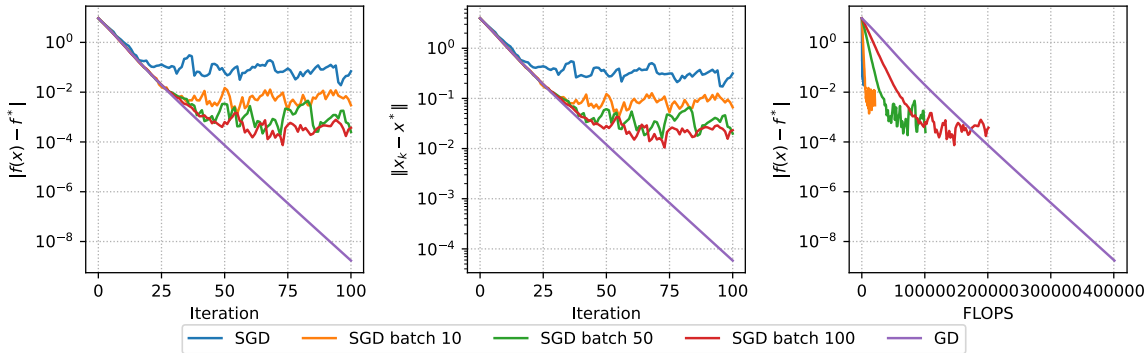


Figure 1: Расходимость SGD при постоянном шаге

Основная проблема SGD

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

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



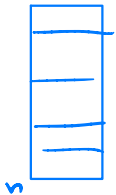
Методы редукции дисперсии

Дисперсия мини-батч градиента: с возвращением

Обозначим $\sigma^2 = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \|\nabla f_i(x_k) - \nabla f(x_k)\|^2$ — дисперсия индивидуальных градиентов.

Схема с возвращением (sampling with replacement): индексы $i_1, \dots, i_B$ выбираются независимо и равномерно из $\{1, \dots, n\}$ (могут повторяться).

$$g^k = \frac{1}{B}\sum_{j=1}^{B} \nabla f_{i_j}(x_k)$$



Дисперсия мини-батч градиента: с возвращением

Обозначим $\sigma^2 = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \|\nabla f_i(x_k) - \nabla f(x_k)\|^2$ — дисперсия индивидуальных градиентов.

Схема с возвращением (sampling with replacement): индексы $i_1, \dots, i_B$ выбираются независимо и равномерно из $\{1, \dots, n\}$ (могут повторяться).

$$g^k = \frac{1}{B}\sum_{j=1}^{B} \nabla f_{i_j}(x_k)$$

$\nabla f(x_k)$ ← не случ. величина

Поскольку индексы i_j независимы и одинаково распределены, слагаемые $\nabla f_{i_j}(x_k)$ — также независимые одинаково распределённые случайные величины. Дисперсия среднего из B независимых величин:

$$\mathbb{E}\left[\left\|g^k - \nabla f(x_k)\right\|^2\right] = \frac{1}{B^2}\sum_{j=1}^{B} \mathbb{E}\left[\left\|\nabla f_{i_j}(x_k) - \nabla f(x_k)\right\|^2\right] = \frac{\sigma^2}{B}$$

$\mathbb{E}[\cdot] = \mathbb{E}[\cdot \mid x_k]$

$$\mathbb{E}\left\| \frac{1}{B}\sum_{j=1}^{B} \nabla f_{i_j}(x_k) - \nabla f(x_k)\right\|^2 =$$

Дисперсия мини-батч градиента: без возвращения (постановка)

Схема без возвращения (sampling without replacement): батч $\mathcal{B}_k$ — равномерно случайное подмножество размера B из $\{1, \dots, n\}$ (без повторов).

$$g^k = \frac{1}{B} \sum_{i \in \mathcal{B}_k} \nabla f_i(x_k)$$

Дисперсия мини-батч градиента: без возвращения (постановка)

Схема без возвращения (sampling without replacement): батч $\mathcal{B}_k$ — равномерно случайное подмножество размера B из $\{1, \dots, n\}$ (без повторов).

$$g^k = \frac{1}{B} \sum_{i \in \mathcal{B}_k} \nabla f_i(x_k)$$

Слагаемые теперь **зависимы**: если знаем, что некоторый индекс уже попал в батч, вероятности для остальных меняются.

Дисперсия мини-батч градиента: без возвращения (постановка)

Схема без возвращения (sampling without replacement): батч $\mathcal{B}_k$ — равномерно случайное подмножество размера B из $\{1, \dots, n\}$ (без повторов).

$$g^k = \frac{1}{B} \sum_{i \in \mathcal{B}_k} \nabla f_i(x_k)$$

Слагаемые теперь **зависимы**: если знаем, что некоторый индекс уже попал в батч, вероятности для остальных меняются.

Введём индикаторы $\mathrm{I}_i = [i \in \mathcal{B}_k]$. Тогда:

- $\mathbb{E}[\mathrm{I}_i] = \frac{B}{n}$,

Отсюда $\mathrm{Cov}(\mathrm{I}_i, \mathrm{I}_j) = -\frac{B(n-B)}{n^2(n-1)}$ — отрицательная ковариация, которая и даёт уменьшение дисперсии по сравнению со схемой с возвращением.

Дисперсия мини-батч градиента: без возвращения (постановка)

Схема без возвращения (sampling without replacement): батч $\mathcal{B}_k$ — равномерно случайное подмножество размера B из $\{1, \dots, n\}$ (без повторов).

$$g^k = \frac{1}{B} \sum_{i \in \mathcal{B}_k} \nabla f_i(x_k)$$

Слагаемые теперь **зависимы**: если знаем, что некоторый индекс уже попал в батч, вероятности для остальных меняются.

Введём индикаторы $\mathrm{I}_i = [i \in \mathcal{B}_k]$. Тогда:

- $\mathbb{E}[\mathrm{I}_i] = \frac{B}{n}$,
- $\mathbb{E}[\mathrm{I}_i^2] = \frac{B}{n}$,

Отсюда $\mathrm{Cov}(\mathrm{I}_i, \mathrm{I}_j) = -\frac{B(n-B)}{n^2(n-1)}$ — отрицательная ковариация, которая и даёт уменьшение дисперсии по сравнению со схемой с возвращением.

Дисперсия мини-батч градиента: без возвращения (постановка)

Схема без возвращения (sampling without replacement): батч $\mathcal{B}_k$ — равномерно случайное подмножество размера B из $\{1, \dots, n\}$ (без повторов).

$$g^k = \frac{1}{B} \sum_{i \in \mathcal{B}_k} \nabla f_i(x_k)$$

Слагаемые теперь **зависимы**: если знаем, что некоторый индекс уже попал в батч, вероятности для остальных меняются.

Введём индикаторы $\mathrm{I}_i = [i \in \mathcal{B}_k]$. Тогда:

- $\mathbb{E}[\mathrm{I}_i] = \frac{B}{n}$,
- $\mathbb{E}[\mathrm{I}_i^2] = \frac{B}{n}$,
- $\mathbb{E}[\mathrm{I}_i \mathrm{I}_j] = \frac{B(B-1)}{n(n-1)}$ для $i \neq j$.

Отсюда $\mathrm{Cov}(\mathrm{I}_i, \mathrm{I}_j) = -\frac{B(n-B)}{n^2(n-1)}$ — отрицательная ковариация, которая и даёт уменьшение дисперсии по сравнению со схемой с возвращением.

Дисперсия мини-батч градиента: без возвращения (вывод)

Обозначим $d_i = \nabla f_i(x_k) - \nabla f(x_k)$. Тогда $\sum_i d_i = 0$ и $\sigma^2 = \frac{1}{n}\sum_i \|d_i\|^2$.

Дисперсия мини-батч градиента: без возвращения (вывод)

Обозначим $d_i = \nabla f_i(x_k) - \nabla f(x_k)$. Тогда $\sum_i d_i = 0$ и $\sigma^2 = \frac{1}{n}\sum_i \|d_i\|^2$.

Перепишем $g^k - \nabla f(x_k)$ через индикаторы I_i, пользуясь тем, что $\sum_i \mathrm{I}_i = B$:

$$g^k - \nabla f(x_k) = \frac{1}{B}\sum_{i=1}^{n} \mathrm{I}_i \nabla f_i(x_k) - \nabla f(x_k) = \frac{1}{B}\sum_{i=1}^{n} \mathrm{I}_i\, d_i.$$

Дисперсия мини-батч градиента: без возвращения (вывод)

Обозначим $d_i = \nabla f_i(x_k) - \nabla f(x_k)$. Тогда $\sum_i d_i = 0$ и $\sigma^2 = \frac{1}{n}\sum_i \|d_i\|^2$.

Перепишем $g^k - \nabla f(x_k)$ через индикаторы I_i, пользуясь тем, что $\sum_i \mathrm{I}_i = B$:

$$g^k - \nabla f(x_k) = \frac{1}{B}\sum_{i=1}^{n} \mathrm{I}_i \nabla f_i(x_k) - \nabla f(x_k) = \frac{1}{B}\sum_{i=1}^{n} \mathrm{I}_i\, d_i.$$

Берём квадрат нормы и матожидание:

$$\mathbb{E}\big[\|g^k - \nabla f(x_k)\|^2\big] = \frac{1}{B^2}\sum_{i,j} \mathbb{E}[\mathrm{I}_i \mathrm{I}_j]\,\langle d_i, d_j\rangle.$$

Дисперсия мини-батч градиента: без возвращения (вывод)

Обозначим $d_i = \nabla f_i(x_k) - \nabla f(x_k)$. Тогда $\sum_i d_i = 0$ и $\sigma^2 = \frac{1}{n}\sum_i \|d_i\|^2$.

Перепишем $g^k - \nabla f(x_k)$ через индикаторы I_i, пользуясь тем, что $\sum_i \mathrm{I}_i = B$:

$$g^k - \nabla f(x_k) = \frac{1}{B}\sum_{i=1}^{n} \mathrm{I}_i \nabla f_i(x_k) - \nabla f(x_k) = \frac{1}{B}\sum_{i=1}^{n} \mathrm{I}_i\, d_i.$$

Берём квадрат нормы и матожидание:

$$\mathbb{E}\left[\|g^k - \nabla f(x_k)\|^2\right] = \frac{1}{B^2}\sum_{i,j} \mathbb{E}[\mathrm{I}_i \mathrm{I}_j]\,\langle d_i, d_j\rangle.$$

Подставим моменты индикаторов:

$$= \frac{1}{B^2}\left[\frac{B}{n}\sum_i \|d_i\|^2 + \frac{B(B-1)}{n(n-1)}\sum_{i\neq j}\langle d_i, d_j\rangle\right].$$

Дисперсия мини-батч градиента: без возвращения (вывод)

Обозначим $d_i = \nabla f_i(x_k) - \nabla f(x_k)$. Тогда $\sum_i d_i = 0$ и $\sigma^2 = \frac{1}{n}\sum_i \|d_i\|^2$.

Перепишем $g^k - \nabla f(x_k)$ через индикаторы I_i, пользуясь тем, что $\sum_i \mathrm{I}_i = B$:

$$g^k - \nabla f(x_k) = \frac{1}{B}\sum_{i=1}^{n} \mathrm{I}_i \nabla f_i(x_k) - \nabla f(x_k) = \frac{1}{B}\sum_{i=1}^{n} \mathrm{I}_i\, d_i.$$

Берём квадрат нормы и матожидание:

$$\mathbb{E}\left[\|g^k - \nabla f(x_k)\|^2\right] = \frac{1}{B^2}\sum_{i,j} \mathbb{E}[\mathrm{I}_i \mathrm{I}_j]\,\langle d_i, d_j\rangle.$$

Подставим моменты индикаторов:

$$= \frac{1}{B^2}\left[\frac{B}{n}\sum_i \|d_i\|^2 + \frac{B(B-1)}{n(n-1)}\sum_{i\neq j}\langle d_i, d_j\rangle\right].$$

Из $\sum_i d_i = 0$ следует $\sum_{i\neq j}\langle d_i, d_j\rangle = -\sum_i \|d_i\|^2 = -n\sigma^2$.

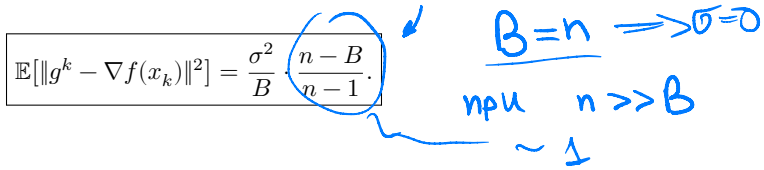
Дисперсия мини-батч градиента: без возвращения (результат)

Сворачиваем выражение, помня, что $\sum_i \|d_i\|^2 = n\sigma^2$:

$$\mathbb{E}[\|g^k - \nabla f(x_k)\|^2] = \frac{1}{B^2}\left[\frac{B}{n} \cdot n\sigma^2 - \frac{B(B-1)}{n(n-1)} \cdot n\sigma^2\right] = \frac{\sigma^2}{B}\left[1 - \frac{B-1}{n-1}\right].$$

Окончательно:

$$\boxed{\mathbb{E}[\|g^k - \nabla f(x_k)\|^2] = \frac{\sigma^2}{B} \cdot \frac{n-B}{n-1}.}$$



Дисперсия мини-батч градиента: без возвращения (результат)

Сворачиваем выражение, помня, что $\sum_i \|d_i\|^2 = n\sigma^2$:

$$\mathbb{E}[\|g^k - \nabla f(x_k)\|^2] = \frac{1}{B^2}\left[\frac{B}{n} \cdot n\sigma^2 - \frac{B(B-1)}{n(n-1)} \cdot n\sigma^2\right] = \frac{\sigma^2}{B}\left[1 - \frac{B-1}{n-1}\right].$$

Окончательно:

$$\boxed{\mathbb{E}[\|g^k - \nabla f(x_k)\|^2] = \frac{\sigma^2}{B} \cdot \frac{n-B}{n-1}.}$$

Множитель $\dfrac{n-B}{n-1}$ — **поправка на конечность генеральной совокупности** (finite population correction).

Дисперсия мини-батч градиента: без возвращения (результат)

Сворачиваем выражение, помня, что $\sum_i \|d_i\|^2 = n\sigma^2$:

$$\mathbb{E}[\|g^k - \nabla f(x_k)\|^2] = \frac{1}{B^2}\left[\frac{B}{n} \cdot n\sigma^2 - \frac{B(B-1)}{n(n-1)} \cdot n\sigma^2\right] = \frac{\sigma^2}{B}\left[1 - \frac{B-1}{n-1}\right].$$

Окончательно:

$$\boxed{\mathbb{E}[\|g^k - \nabla f(x_k)\|^2] = \frac{\sigma^2}{B} \cdot \frac{n-B}{n-1}.}$$

Множитель $\dfrac{n-B}{n-1}$ — **поправка на конечность генеральной совокупности** (finite population correction).

Что отсюда видно:

- при $B = 1$ — поправка равна 1, обе схемы совпадают (один элемент — нет разницы, с повтором или без);

В частности, для одинакового B схема без возвращения **всегда не хуже** схемы с возвращением.

Дисперсия мини-батч градиента: без возвращения (результат)

Сворачиваем выражение, помня, что $\sum_i \|d_i\|^2 = n\sigma^2$:

$$\mathbb{E}[\|g^k - \nabla f(x_k)\|^2] = \frac{1}{B^2}\Big[\frac{B}{n}\cdot n\sigma^2 - \frac{B(B-1)}{n(n-1)}\cdot n\sigma^2\Big] = \frac{\sigma^2}{B}\Big[1 - \frac{B-1}{n-1}\Big].$$

Окончательно:

$$\boxed{\mathbb{E}[\|g^k - \nabla f(x_k)\|^2] = \frac{\sigma^2}{B}\cdot\frac{n-B}{n-1}.}$$

Множитель $\dfrac{n-B}{n-1}$ — **поправка на конечность генеральной совокупности** (finite population correction).

Что отсюда видно:

- при $B = 1$ — поправка равна 1, обе схемы совпадают (один элемент — нет разницы, с повтором или без);
- при $B \ll n$ — поправка ≈ 1, обе схемы дают почти одинаковую дисперсию σ^2/B;

В частности, для одинакового B схема без возвращения **всегда не хуже** схемы с возвращением.

Дисперсия мини-батч градиента: без возвращения (результат)

Сворачиваем выражение, помня, что $\sum_i \|d_i\|^2 = n\sigma^2$:

$$\mathbb{E}[\|g^k - \nabla f(x_k)\|^2] = \frac{1}{B^2}\Big[\frac{B}{n}\cdot n\sigma^2 - \frac{B(B-1)}{n(n-1)}\cdot n\sigma^2\Big] = \frac{\sigma^2}{B}\Big[1 - \frac{B-1}{n-1}\Big].$$

Окончательно:

$$\boxed{\mathbb{E}[\|g^k - \nabla f(x_k)\|^2] = \frac{\sigma^2}{B}\cdot\frac{n-B}{n-1}.}$$

Множитель $\dfrac{n-B}{n-1}$ — **поправка на конечность генеральной совокупности** (finite population correction).

Что отсюда видно:

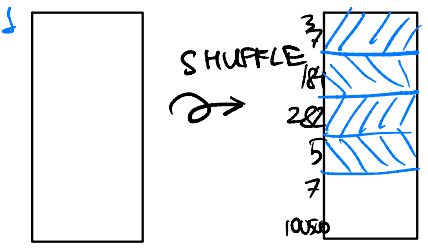
- при $B = 1$ — поправка равна 1, обе схемы совпадают (один элемент — нет разницы, с повтором или без);
- при $B \ll n$ — поправка ≈ 1, обе схемы дают почти одинаковую дисперсию σ^2/B;
- при $B = n$ — поправка 0: батч равен всей выборке, и оценка совпадает с точным градиентом, дисперсия 0.

В частности, для одинакового B схема без возвращения **всегда не хуже** схемы с возвращением.

Сравнение двух схем сэмплирования

	С возвращением	Без возвращения
Дисперсия	$\frac{\sigma^2}{B}$	$\frac{\sigma^2}{B} \cdot \frac{n-B}{n-1} \leq 1$
$B \ll n$	$\frac{\sigma^2}{B}$	$\approx \frac{\sigma^2}{B}$
$B = n$	$\frac{\sigma^2}{n} > 0$	0 (точный градиент)

- Схема без возвращения **всегда не хуже**: $\frac{n-B}{n-1} \leq 1$.



Сравнение двух схем сэмплирования

	С возвращением	Без возвращения
Дисперсия	$\dfrac{\sigma^2}{B}$	$\dfrac{\sigma^2}{B} \cdot \dfrac{n-B}{n-1}$
$B \ll n$	$\dfrac{\sigma^2}{B}$	$\approx \dfrac{\sigma^2}{B}$
$B = n$	$\dfrac{\sigma^2}{n} > 0$	0 (точный градиент)

- Схема без возвращения **всегда не хуже**: $\frac{n-B}{n-1} \leq 1$.
- Дисперсия с возвращением **не зависит** от n и **точно** равна σ^2/B — независимо от B относительно n.

Сравнение двух схем сэмплирования

	С возвращением	Без возвращения
Дисперсия	$\dfrac{\sigma^2}{B}$	$\dfrac{\sigma^2}{B} \cdot \dfrac{n-B}{n-1}$
$B \ll n$	$\dfrac{\sigma^2}{B}$	$\approx \dfrac{\sigma^2}{B}$
$B = n$	$\dfrac{\sigma^2}{n} > 0$	0 (точный градиент)

- Схема без возвращения **всегда не хуже**: $\frac{n-B}{n-1} \leq 1$.
- Дисперсия с возвращением **не зависит** от n и **точно** равна σ^2/B — независимо от B относительно n.
- Дисперсия убывает как $1/B$: удвоение батча снижает дисперсию вдвое.

Сравнение двух схем сэмплирования

	С возвращением	Без возвращения
Дисперсия	$\dfrac{\sigma^2}{B}$	$\dfrac{\sigma^2}{B} \cdot \dfrac{n-B}{n-1}$
$B \ll n$	$\dfrac{\sigma^2}{B}$	$\approx \dfrac{\sigma^2}{B}$
$B = n$	$\dfrac{\sigma^2}{n} > 0$	0 (точный градиент)

- Схема без возвращения **всегда не хуже**: $\frac{n-B}{n-1} \leq 1$.
- Дисперсия с возвращением **не зависит** от n и **точно** равна σ^2/B — независимо от B относительно n.
- Дисперсия убывает как $1/B$: удвоение батча снижает дисперсию вдвое.
- Но стоимость итерации растёт линейно по B.

Сравнение двух схем сэмплирования

	С возвращением	Без возвращения
Дисперсия	$\dfrac{\sigma^2}{B}$	$\dfrac{\sigma^2}{B} \cdot \dfrac{n-B}{n-1}$
$B \ll n$	$\dfrac{\sigma^2}{B}$	$\approx \dfrac{\sigma^2}{B}$
$B = n$	$\dfrac{\sigma^2}{n} > 0$	0 (точный градиент)

- Схема без возвращения **всегда не хуже**: $\frac{n-B}{n-1} \leq 1$.
- Дисперсия с возвращением **не зависит** от n и **точно** равна σ^2/B — независимо от B относительно n.
- Дисперсия убывает как $1/B$: удвоение батча снижает дисперсию вдвое.
- Но стоимость итерации растёт линейно по B.
- **Дилемма**: маленький батч — дешёвые, но шумные шаги; большой батч — точные, но дорогие.

Сравнение двух схем сэмплирования

	С возвращением	Без возвращения
Дисперсия	$\dfrac{\sigma^2}{B}$	$\dfrac{\sigma^2}{B} \cdot \dfrac{n-B}{n-1}$
$B \ll n$	$\dfrac{\sigma^2}{B}$	$\approx \dfrac{\sigma^2}{B}$
$B = n$	$\dfrac{\sigma^2}{n} > 0$	0 (точный градиент)

- Схема без возвращения **всегда не хуже**: $\frac{n-B}{n-1} \leq 1$.
- Дисперсия с возвращением **не зависит** от n и **точно** равна σ^2/B — независимо от B относительно n.
- Дисперсия убывает как $1/B$: удвоение батча снижает дисперсию вдвое.
- Но стоимость итерации растёт линейно по B.
- **Дилемма**: маленький батч — дешёвые, но шумные шаги; большой батч — точные, но дорогие.
- **Вопрос**: можно ли снизить дисперсию, не увеличивая батч?

Ключевая идея редукции дисперсии: метод контрольной переменной

$\mathbb{E}Y$ - известно

Идея: снизить дисперсию случайной величины X с помощью другой, **вспомогательной** случайной величины Y, у которой математическое ожидание известно точно. В англоязычной литературе этот приём называют *control variate*, в русской — **метод контрольной переменной**. Рассмотрим новую случайную величину Z_α:

$$Z_\alpha = \alpha(X - Y) + \mathbb{E}[Y]$$

- $\mathbb{E}[Z_\alpha] = \alpha\mathbb{E}[X] + (1 - \alpha)\mathbb{E}[Y]$

$\alpha = 1 \rightarrow \mathbb{E}Z_\alpha = \mathbb{E}X$

$\mathrm{Var}(Z_\alpha)$

Ключевая идея редукции дисперсии: метод контрольной переменной

Идея: снизить дисперсию случайной величины X с помощью другой, **вспомогательной** случайной величины Y, у которой математическое ожидание известно точно. В англоязычной литературе этот приём называют *control variate*; в русской — **метод контрольной переменной**. Рассмотрим новую случайную величину Z_α:

$$Z_\alpha = \alpha(X - Y) + \mathbb{E}[Y]$$

- $\mathbb{E}[Z_\alpha] = \alpha\mathbb{E}[X] + (1-\alpha)\mathbb{E}[Y]$
- $\mathsf{var}(Z_\alpha) = \alpha^2\left(\mathsf{var}(X) + \mathsf{var}(Y) - 2\,\mathsf{cov}(X,Y)\right)$

Ключевая идея редукции дисперсии: метод контрольной переменной

Идея: снизить дисперсию случайной величины X с помощью другой, **вспомогательной** случайной величины Y, у которой математическое ожидание известно точно. В англоязычной литературе этот приём называют *control variate*; в русской — **метод контрольной переменной**. Рассмотрим новую случайную величину Z_α:

$$Z_\alpha = \alpha(X - Y) + \mathbb{E}[Y]$$

- $\mathbb{E}[Z_\alpha] = \alpha\mathbb{E}[X] + (1-\alpha)\mathbb{E}[Y]$
- $\mathsf{var}(Z_\alpha) = \alpha^2\left(\mathsf{var}(X) + \mathsf{var}(Y) - 2\,\mathsf{cov}(X,Y)\right)$
  - Если $\alpha = 1$: без смещения, $\mathbb{E}[Z_1] = \mathbb{E}[X]$.

Ключевая идея редукции дисперсии: метод контрольной переменной

Идея: снизить дисперсию случайной величины X с помощью другой, **вспомогательной** случайной величины Y, у которой математическое ожидание известно точно. В англоязычной литературе этот приём называют *control variate*; в русской — **метод контрольной переменной**. Рассмотрим новую случайную величину Z_α:

$$Z_\alpha = \alpha(X - Y) + \mathbb{E}[Y]$$

- $\mathbb{E}[Z_\alpha] = \alpha\mathbb{E}[X] + (1-\alpha)\mathbb{E}[Y]$
- $\mathsf{var}(Z_\alpha) = \alpha^2\left(\mathsf{var}(X) + \mathsf{var}(Y) - 2\,\mathsf{cov}(X,Y)\right)$
  - Если $\alpha = 1$: без смещения, $\mathbb{E}[Z_1] = \mathbb{E}[X]$.
  - Если $\alpha < 1$: возможно смещение (но меньше дисперсия).

Ключевая идея редукции дисперсии: метод контрольной переменной

Идея: снизить дисперсию случайной величины X с помощью другой, **вспомогательной** случайной величины Y, у которой математическое ожидание известно точно. В англоязычной литературе этот приём называют *control variate*; в русской — **метод контрольной переменной**. Рассмотрим новую случайную величину Z_α:

$$Z_\alpha = \alpha(X - Y) + \mathbb{E}[Y]$$

- $\mathbb{E}[Z_\alpha] = \alpha\mathbb{E}[X] + (1-\alpha)\mathbb{E}[Y]$
- $\mathsf{var}(Z_\alpha) = \alpha^2\left(\mathsf{var}(X) + \mathsf{var}(Y) - 2\,\mathsf{cov}(X,Y)\right)$
  - Если $\alpha = 1$: без смещения, $\mathbb{E}[Z_1] = \mathbb{E}[X]$.
  - Если $\alpha < 1$: возможно смещение (но меньше дисперсия).
- Полезно, если Y положительно коррелирована с X: тогда $\mathsf{cov}(X,Y) > 0$ и $\mathsf{var}(Z_\alpha) < \alpha^2\mathsf{var}(X)$.

Интуиция: «якорь + малая поправка»

Если $Y \approx X$, то $X - Y \approx 0$ — разность почти детерминирована, и дисперсия мала. При этом $\mathbb{E}[Y]$ нам известно точно, поэтому мы «якоримся» к точному значению и корректируем на маленькую стохастическую добавку:

$$\underbrace{Z_1}_{\text{наша оценка}} = \underbrace{\mathbb{E}[Y]}_{\text{точный якорь}} + \underbrace{(X - Y)}_{\approx 0,\ \text{малая дисперсия}}$$

Интуиция: «якорь + малая поправка»

Если $Y \approx X$, то $X - Y \approx 0$ — разность почти детерминирована, и дисперсия мала. При этом $\mathbb{E}[Y]$ нам известно точно, поэтому мы «якоримся» к точному значению и корректируем на маленькую стохастическую добавку:

$$\underbrace{Z_1}_{\text{наша оценка}} = \underbrace{\mathbb{E}[Y]}_{\text{точный якорь}} + \underbrace{(X-Y)}_{\approx 0,\ \text{малая дисперсия}}$$

Применение к оценке градиента. Пусть $X = \nabla f_{i_k}(x^{(k-1)})$ и $Y = \nabla f_{i_k}(\tilde{x})$, где $\tilde{x}$ — некоторая «опорная» точка, в которой однажды вычислен полный градиент. Тогда

$$g^k = \underbrace{\nabla f(\tilde{x})}_{\text{якорь}} + \underbrace{\nabla f_{i_k}(x^{(k-1)}) - \nabla f_{i_k}(\tilde{x})}_{\text{стохастическая коррекция}}$$

- Коррекция мала, когда $x^{(k-1)} \approx \tilde{x}$.

Интуиция: «якорь + малая поправка»

Если $Y \approx X$, то $X - Y \approx 0$ — разность почти детерминирована, и дисперсия мала. При этом $\mathbb{E}[Y]$ нам известно точно, поэтому мы «якоримся» к точному значению и корректируем на маленькую стохастическую добавку:

$$\underbrace{Z_1}_{\text{наша оценка}} = \underbrace{\mathbb{E}[Y]}_{\text{точный якорь}} + \underbrace{(X-Y)}_{\approx 0,\ \text{малая дисперсия}}$$

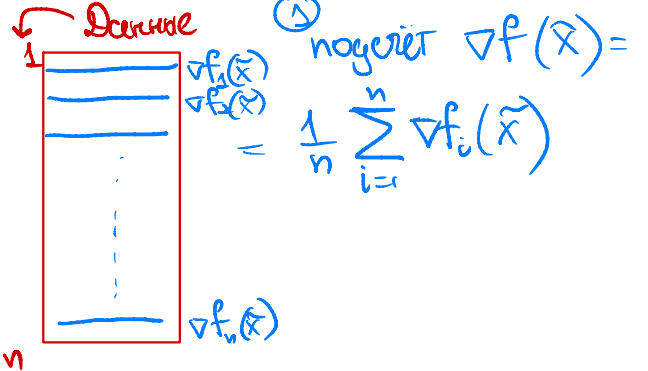
Применение к оценке градиента. Пусть $X = \nabla f_{i_k}(x^{(k-1)})$ и $Y = \nabla f_{i_k}(\tilde{x})$, где $\tilde{x}$ — некоторая «опорная» точка, в которой однажды вычислен полный градиент. Тогда

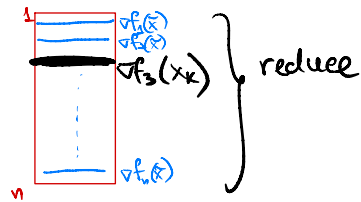
$$g^k = \underbrace{\nabla f(\tilde{x})}_{\text{якорь}} + \underbrace{\nabla f_{i_k}(x^{(k-1)}) - \nabla f_{i_k}(\tilde{x})}_{\text{стохастическая коррекция}}$$

- Коррекция мала, когда $x^{(k-1)} \approx \tilde{x}$.
- Дисперсия $\to 0$ при $x^{(k-1)} \to x^*$ (если $\tilde{x}$ тоже близка к x^*) — в отличие от SGD.

SAG (Stochastic Average Gradient) [1]

- Поддерживаем таблицу градиентов g_i функции f_i, $i = 1, \dots, n$.





SAG (Stochastic Average Gradient) [1]

- Поддерживаем таблицу градиентов g_i функции f_i, $i = 1, \dots, n$.
- Инициализируем $x^{(0)}$ и $g_i^{(0)} = \nabla f_i(x^{(0)})$, $i = 1, \dots, n$.

подсчёт всей таблицы

SAG (Stochastic Average Gradient) [1]

- Поддерживаем таблицу градиентов g_i функции f_i, $i = 1, \dots, n$.
- Инициализируем $x^{(0)}$ и $g_i^{(0)} = \nabla f_i(x^{(0)})$, $i = 1, \dots, n$.
- На шаге $k = 1, 2, 3, \dots$ выбираем случайный $i_k \in \{1, \dots, n\}$:

$$\boxed{g_{i_k}^{(k)} = \nabla f_{i_k}(x^{(k-1)})}$$ (свежий градиент f_{i_k}),

остальные $g_i^{(k)} = g_i^{(k-1)}$, $i \neq i_k$, — не меняются.

SAG (Stochastic Average Gradient) [1]

- Поддерживаем таблицу градиентов g_i функции f_i, $i = 1, \dots, n$.
- Инициализируем $x^{(0)}$ и $g_i^{(0)} = \nabla f_i(x^{(0)})$, $i = 1, \dots, n$.
- На шаге $k = 1, 2, 3, \dots$ выбираем случайный $i_k \in \{1, \dots, n\}$:

$$g_{i_k}^{(k)} = \nabla f_{i_k}(x^{(k-1)}) \quad \text{(свежий градиент } f_{i_k}\text{)},$$

  остальные $g_i^{(k)} = g_i^{(k-1)}$, $i \neq i_k$, — не меняются.
- Обновление:

$$x^{(k)} = x^{(k-1)} - \alpha_k \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} g_i^{(k)}$$

обновленный сток градиент

SAG (Stochastic Average Gradient) [1]

- Поддерживаем таблицу градиентов g_i функции f_i, $i = 1, \dots, n$.
- Инициализируем $x^{(0)}$ и $g_i^{(0)} = \nabla f_i(x^{(0)})$, $i = 1, \dots, n$.
- На шаге $k = 1, 2, 3, \dots$ выбираем случайный $i_k \in \{1, \dots, n\}$:

$$g_{i_k}^{(k)} = \nabla f_{i_k}(x^{(k-1)}) \quad \text{(свежий градиент } f_{i_k}\text{)},$$

  остальные $g_i^{(k)} = g_i^{(k-1)}$, $i \neq i_k$, — не меняются.
- Обновление:

$$x^{(k)} = x^{(k-1)} - \alpha_k \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} g_i^{(k)}$$

- Оценки градиента SAG **смещённые** (на каждой итерации $\mathbb{E}[g^{(k)}] \neq \nabla f(x^{(k-1)})$), но с сильно сниженной дисперсией.

SAG (Stochastic Average Gradient) [1]

- Поддерживаем таблицу градиентов g_i функции f_i, $i = 1, \dots, n$.
- Инициализируем $x^{(0)}$ и $g_i^{(0)} = \nabla f_i(x^{(0)})$, $i = 1, \dots, n$.
- На шаге $k = 1, 2, 3, \dots$ выбираем случайный $i_k \in \{1, \dots, n\}$:

$$g_{i_k}^{(k)} = \nabla f_{i_k}(x^{(k-1)}) \quad \text{(свежий градиент } f_{i_k}\text{)},$$

остальные $g_i^{(k)} = g_i^{(k-1)}$, $i \neq i_k$, — не меняются.

- Обновление:

$$x^{(k)} = x^{(k-1)} - \alpha_k \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} g_i^{(k)}$$

- Оценки градиента SAG **смещённые** (на каждой итерации $\mathbb{E}[g^{(k)}] \neq \nabla f(x^{(k-1)})$), но с сильно сниженной дисперсией.
- Дёшево обновлять среднее: один член меняется в сумме, остальные $n-1$ — нет:

$$x^{(k)} = x^{(k-1)} - \alpha_k \left(\underbrace{\frac{1}{n} g_{i_k}^{(k)} - \frac{1}{n} g_{i_k}^{(k-1)} + \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} g_i^{(k-1)}}_{\text{новое среднее}} \right)$$

(старое среднее)

[1] Schmidt, Le Roux, Bach (2013). Minimizing Finite Sums with the Stochastic Average Gradient.

Сходимость SAG

Предположим $f(x) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} f_i(x)$, каждая f_i дифференцируема, ∇f_i — липшицев с константой L.

Обозначим $\bar{x}^{(k)} = \frac{1}{k}\sum_{l=0}^{k-1} x^{(l)}$ — среднее итераций после $k-1$ шагов.

Теорема (SAG, выпускный случай)

SAG с фиксированным шагом $\alpha = \frac{1}{16L}$ и инициализацией

$$g_i^{(0)} = \nabla f_i(x^{(0)}) - \nabla f(x^{(0)}), \quad i = 1, \dots, n$$

удовлетворяет

$$\mathbb{E}[f(\bar{x}^{(k)})] - f^\star \leq \frac{48n}{k}[f(x^{(0)}) - f^\star] + \frac{128L}{k}\|x^{(0)} - x^\star\|^2.$$

- Скорость $\mathcal{O}(1/k)$ для SAG — как у GD, но при стоимости итерации $O(1)$.

Сходимость SAG

Предположим $f(x) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} f_i(x)$, каждая f_i дифференцируема, ∇f_i — липшицев с константой L.

Обозначим $\bar{x}^{(k)} = \frac{1}{k}\sum_{l=0}^{k-1} x^{(l)}$ — среднее итераций после $k-1$ шагов.

Теорема (SAG, выпуклый случай)

SAG с фиксированным шагом $\alpha = \frac{1}{16L}$ и инициализацией

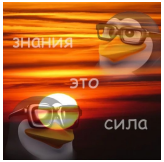
$$g_i^{(0)} = \nabla f_i(x^{(0)}) - \nabla f(x^{(0)}), \quad i = 1, \dots, n$$

удовлетворяет

$$\mathbb{E}[f(\bar{x}^{(k)})] - f^\star \leq \frac{48n}{k}[f(x^{(0)}) - f^\star] + \frac{128L}{k}\|x^{(0)} - x^\star\|^2.$$

- Скорость $\mathcal{O}(1/k)$ для SAG — как у GD, но при стоимости итерации $O(1)$.
- Первый член содержит множитель n; авторы рекомендуют разумную инициализацию (например, n шагов SGD).

Сходимость SAG: сильно выпуклый случай



Дополнительно: каждая f_i сильно выпукла с параметром μ.

Теорема (SAG, сильно выпуклый случай)

SAG с шагом $\alpha = \frac{1}{16L}$ и той же инициализацией:

$$\mathbb{E}[f(x^{(k)})] - f^\star \leq \left(1 - \min\left(\frac{\mu}{16L}, \frac{1}{8n}\right)\right)^k \left(\frac{3}{2}\left(f(x^{(0)}) - f^\star\right) + \frac{4L}{n}\|x^{(0)} - x^\star\|^2\right).$$

- **Линейная** скорость $\mathcal{O}(\gamma^k)$ для SAG. Сравните: $\mathcal{O}(\gamma^k)$ для GD и лишь $\mathcal{O}(1/k)$ для SGD.

$\frac{\mu}{16L} < \frac{1}{8n}$ — SMOL DATA — сходимость определяется геометрией задачи

$\frac{\mu}{16L} > \frac{1}{8n}$ — BIG DATA n очень большое — сходимость определяется кол-вом данных

Сходимость SAG: сильно выпуклый случай

Дополнительно: каждая f_i сильно выпукла с параметром μ.

Теорема (SAG, сильно выпуклый случай)

SAG с шагом $\alpha = \frac{1}{16L}$ и той же инициализацией:

$$\mathbb{E}[f(x^{(k)})] - f^\star \leq \left(1 - \min\left(\frac{\mu}{16L}, \frac{1}{8n}\right)\right)^k \left(\frac{3}{2}\left(f(x^{(0)}) - f^\star\right) + \frac{4L}{n}\|x^{(0)} - x^\star\|^2\right).$$

- **Линейная** скорость $\mathcal{O}(\gamma^k)$ для SAG. Сравните: $\mathcal{O}(\gamma^k)$ для GD и лишь $\mathcal{O}(1/k)$ для SGD.
- Как и GD, SAG адаптивен к сильной выпуклости.

Сходимость SAG: сильно выпуклый случай

Дополнительно: каждая f_i сильно выпукла с параметром μ.

Теорема (SAG, сильно выпуклый случай)

SAG с шагом $\alpha = \frac{1}{16L}$ и той же инициализацией:

$$\mathbb{E}[f(x^{(k)})] - f^\star \leq \left(1 - \min\left(\frac{\mu}{16L}, \frac{1}{8n}\right)\right)^k \left(\frac{3}{2}\left(f(x^{(0)}) - f^\star\right) + \frac{4L}{n}\|x^{(0)} - x^\star\|^2\right).$$

- **Линейная** скорость $\mathcal{O}(\gamma^k)$ для SAG. Сравните: $\mathcal{O}(\gamma^k)$ для GD и лишь $\mathcal{O}(1/k)$ для SGD.
- Как и GD, SAG адаптивен к сильной выпуклости.
- Доказательство непростое: около 15 страниц, часть выкладок выполняется с помощью компьютера.

Замечания к SAG

- В исходной формулировке требует $\mathcal{O}(np)$ памяти — не применим к большим нейросетям.

Замечания к SAG

- В исходной формулировке требует $\mathcal{O}(np)$ памяти — не применим к большим нейросетям.
- На практике константу Липшица L можно подбирать по ходу — линейным поиском с дроблением шага:

Замечания к SAG

- В исходной формулировке требует $\mathcal{O}(np)$ памяти — не применим к большим нейросетям.
- На практике константу Липшица L можно подбирать по ходу — линейным поиском с дроблением шага:
  - выбираем начальное L_0;

Замечания к SAG

- В исходной формулировке требует $\mathcal{O}(np)$ памяти — не применим к большим нейросетям.
- На практике константу Липшица L можно подбирать по ходу — линейным поиском с дроблением шага:
  - выбираем начальное L_0;
  - увеличиваем L, пока не выполнится

$$f_{i_k}(x^{k+1}) \leq f_{i_k}(x^k) + \langle \nabla f_{i_k}(x^k), x^{k+1} - x^k \rangle + \frac{L}{2}\|x^{k+1} - x^k\|_2^2;$$

Замечания к SAG

- В исходной формулировке требует $\mathcal{O}(np)$ памяти — не применим к большим нейросетям.
- На практике константу Липшица L можно подбирать по ходу — линейным поиском с дроблением шага:
  - выбираем начальное L_0;
  - увеличиваем L, пока не выполнится

$$f_{i_k}(x^{k+1}) \leq f_{i_k}(x^k) + \langle \nabla f_{i_k}(x^k), x^{k+1} - x^k \rangle + \frac{L}{2}\|x^{k+1} - x^k\|_2^2;$$

  - между итерациями L можно уменьшать.

Замечания к SAG

- В исходной формулировке требует $\mathcal{O}(np)$ памяти — не применим к большим нейросетям.
- На практике константу Липшица L можно подбирать по ходу — линейным поиском с дроблением шага:
  - выбираем начальное L_0;
  - увеличиваем L, пока не выполнится

$$f_{i_k}(x^{k+1}) \leq f_{i_k}(x^k) + \langle \nabla f_{i_k}(x^k), x^{k+1} - x^k \rangle + \frac{L}{2}\|x^{k+1} - x^k\|_2^2;$$

  - между итерациями L можно уменьшать.
- По мере сходимости $x^k \to x^*$ дисперсия оценки $g(x^k)$ уменьшается и значение оценки сходится к истинному градиенту $\nabla f(x^k)$, поэтому норму $\|g(x^k)\|$ можно использовать как критерий остановки (в SGD это бесполезно, так как дисперсия не убывает).

Замечания к SAG

- В исходной формулировке требует $\mathcal{O}(np)$ памяти — не применим к большим нейросетям.
- На практике константу Липшица L можно подбирать по ходу — линейным поиском с дроблением шага:
  - выбираем начальное L_0;
  - увеличиваем L, пока не выполнится

$$f_{i_k}(x^{k+1}) \leq f_{i_k}(x^k) + \langle \nabla f_{i_k}(x^k), x^{k+1} - x^k \rangle + \frac{L}{2}\|x^{k+1} - x^k\|_2^2;$$

  - между итерациями L можно уменьшать.
- По мере сходимости $x^k \to x^*$ дисперсия оценки $g(x^k)$ уменьшается и значение оценки сходится к истинному градиенту $\nabla f(x^k)$, поэтому норму $\|g(x^k)\|$ можно использовать как критерий остановки (в SGD это бесполезно, так как дисперсия не убывает).
- Для обобщённых линейных моделей (LogReg, МНК) достаточно $\mathcal{O}(n)$ памяти вместо $\mathcal{O}(np)$:

$$f_i(w) = \varphi(w^T x_i) \quad \Rightarrow \quad \nabla f_i(w) = \varphi'(w^T x_i)\, x_i.$$

$\varphi: \mathbb{R} \to \mathbb{R} \Rightarrow \varphi' \in \mathbb{R}$

SAG: неравномерный выбор индекса

$$f(x) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} f_i(x)$$

- Скорость определяется $L = \max_i L_i$, где L_i — константа Липшица для f_i.

$$\alpha \sim \frac{1}{L}$$

SAG: неравномерный выбор индекса

- Скорость определяется $L = \max_i L_i$, где L_i — константа Липшица для f_i.
- Если индекс i выбирать с вероятностью, пропорциональной L_i, эффективная константа Липшица становится $\bar{L} = \frac{1}{n}\sum_i L_i$ — обычно существенно меньше $\max_i L_i$.

SAG: неравномерный выбор индекса

- Скорость определяется $L = \max_i L_i$, где L_i — константа Липшица для f_i.
- Если индекс i выбирать с вероятностью, пропорциональной L_i, эффективная константа Липшица становится $\bar{L} = \frac{1}{n}\sum_i L_i$ — обычно существенно меньше $\max_i L_i$.

SAG: неравномерный выбор индекса

- Скорость определяется $L = \max_i L_i$, где L_i — константа Липшица для f_i.
- Если индекс i выбирать с вероятностью, пропорциональной L_i, эффективная константа Липшица становится $\bar{L} = \frac{1}{n}\sum_i L_i$ — обычно существенно меньше $\max_i L_i$.

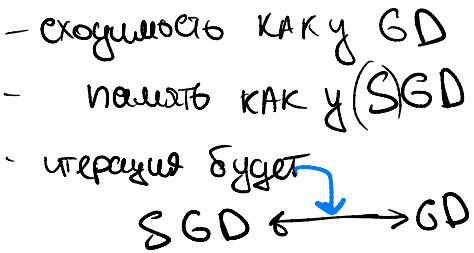
- Для гарантии сходимости берут смешанное распределение: с вероятностью $\frac{1}{2}$ — равномерный выбор, с вероятностью $\frac{1}{2}$ — выбор с весами $L_i / \sum_j L_j$.

SAG: неравномерный выбор индекса

- Скорость определяется $L = \max_i L_i$, где L_i — константа Липшица для f_i.
- Если индекс i выбирать с вероятностью, пропорциональной L_i, эффективная константа Липшица становится $\bar{L} = \frac{1}{n}\sum_i L_i$ — обычно существенно меньше $\max_i L_i$.
- Для гарантии сходимости берут смешанное распределение: с вероятностью $\frac{1}{2}$ — равномерный выбор, с вероятностью $\frac{1}{2}$ — выбор с весами $L_i / \sum_j L_j$.
- Реализация такой выборки возможна за $O(\log n)$ на одну итерацию.

SVRG (Stochastic Variance Reduced Gradient) [2]

- **Инициализация:** $\tilde{x} \in \mathbb{R}^p$.



SVRG (Stochastic Variance Reduced Gradient) [2]

- **Инициализация:** $\tilde{x} \in \mathbb{R}^p$.
- **Для** $s = 1, 2, \ldots$ (внешний цикл — эпохи):

SVRG (Stochastic Variance Reduced Gradient) [2]

- **Инициализация:** $\tilde{x} \in \mathbb{R}^p$.
- **Для** $s = 1, 2, \ldots$ (внешний цикл — эпохи):
  - Вычисляем все градиенты $\nabla f_i(\tilde{x})$ и сохраняем $\nabla f(\tilde{x}) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \nabla f_i(\tilde{x})$.

SVRG (Stochastic Variance Reduced Gradient) [2]

- **Инициализация:** $\tilde{x} \in \mathbb{R}^p$.
- **Для** $s = 1, 2, \ldots$ (внешний цикл — эпохи):
  - Вычисляем все градиенты $\nabla f_i(\tilde{x})$ и сохраняем $\nabla f(\tilde{x}) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \nabla f_i(\tilde{x})$.
  - Инициализируем $x_0 = \tilde{x}$.

SVRG (Stochastic Variance Reduced Gradient) [2]

- **Инициализация:** $\tilde{x} \in \mathbb{R}^p$.
- **Для** $s = 1, 2, \ldots$ (внешний цикл — эпохи):
  - Вычисляем все градиенты $\nabla f_i(\tilde{x})$ и сохраняем $\nabla f(\tilde{x}) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \nabla f_i(\tilde{x})$.
  - Инициализируем $x_0 = \tilde{x}$.
  - **Для** $t = 1, \ldots, m$ (внутренний цикл):

длина эпохи

SVRG (Stochastic Variance Reduced Gradient) [2]

- **Инициализация:** $\tilde{x} \in \mathbb{R}^p$.
- **Для** $s = 1, 2, \ldots$ (внешний цикл — эпохи):
  - Вычисляем все градиенты $\nabla f_i(\tilde{x})$ и сохраняем $\nabla f(\tilde{x}) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \nabla f_i(\tilde{x})$.
  - Инициализируем $x_0 = \tilde{x}$.
  - **Для** $t = 1, \ldots, m$ (внутренний цикл):
    - выбираем $i_t \in \{1, \ldots, n\}$ равномерно;

SVRG (Stochastic Variance Reduced Gradient) [2]

- **Инициализация:** $\tilde{x} \in \mathbb{R}^p$.
- **Для** $s = 1, 2, \ldots$ (внешний цикл — эпохи):
  - Вычисляем все градиенты $\nabla f_i(\tilde{x})$ и сохраняем $\nabla f(\tilde{x}) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \nabla f_i(\tilde{x})$.
  - Инициализируем $x_0 = \tilde{x}$.
  - **Для** $t = 1, \ldots, m$ (внутренний цикл):
    - выбираем $i_t \in \{1, \ldots, n\}$ равномерно;
    - $x_t = x_{t-1} - \alpha \left[\nabla f_{i_t}(x_{t-1}) - \nabla f_{i_t}(\tilde{x}) + \nabla f(\tilde{x}) \right]$.

не храним

храним

выч.

вычисляем

итерация — 2 SGD

SVRG (Stochastic Variance Reduced Gradient) [2]

- **Инициализация:** $\tilde{x} \in \mathbb{R}^p$.
- **Для** $s = 1, 2, \ldots$ (внешний цикл — эпохи):
  - Вычисляем все градиенты $\nabla f_i(\tilde{x})$ и сохраняем $\nabla f(\tilde{x}) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \nabla f_i(\tilde{x})$.
  - Инициализируем $x_0 = \tilde{x}$.
  - **Для** $t = 1, \ldots, m$ (внутренний цикл):
    - выбираем $i_t \in \{1, \ldots, n\}$ равномерно;
    - $x_t = x_{t-1} - \alpha \left[\nabla f_{i_t}(x_{t-1}) - \nabla f_{i_t}(\tilde{x}) + \nabla f(\tilde{x}) \right]$.
  - Обновляем $\tilde{x} = x_m$.

SVRG (Stochastic Variance Reduced Gradient) [2]

- **Инициализация:** $\tilde{x} \in \mathbb{R}^p$.
- **Для** $s = 1, 2, \ldots$ (внешний цикл — эпохи):
  - Вычисляем все градиенты $\nabla f_i(\tilde{x})$ и сохраняем $\nabla f(\tilde{x}) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \nabla f_i(\tilde{x})$.
  - Инициализируем $x_0 = \tilde{x}$.
  - **Для** $t = 1, \ldots, m$ (внутренний цикл):
    - выбираем $i_t \in \{1, \ldots, n\}$ равномерно;
    - $x_t = x_{t-1} - \alpha \left[\nabla f_{i_t}(x_{t-1}) - \nabla f_{i_t}(\tilde{x}) + \nabla f(\tilde{x}) \right]$.
  - Обновляем $\tilde{x} = x_m$.

итерация GD (например, аккумулируя)

итерации в духе SGD

SVRG (Stochastic Variance Reduced Gradient) [2]

- **Инициализация:** $\tilde{x} \in \mathbb{R}^p$.
- **Для** $s = 1, 2, \ldots$ (внешний цикл — эпохи):
  - Вычисляем все градиенты $\nabla f_i(\tilde{x})$ и сохраняем $\nabla f(\tilde{x}) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \nabla f_i(\tilde{x})$.
  - Инициализируем $x_0 = \tilde{x}$.
  - **Для** $t = 1, \ldots, m$ (внутренний цикл):
    - выбираем $i_t \in \{1, \ldots, n\}$ равномерно;
    - $x_t = x_{t-1} - \alpha \left[\nabla f_{i_t}(x_{t-1}) - \nabla f_{i_t}(\tilde{x}) + \nabla f(\tilde{x}) \right]$.
  - Обновляем $\tilde{x} = x_m$.

Замечания:

- Два вычисления градиента на внутреннем шаге.

SVRG (Stochastic Variance Reduced Gradient) [2]

- **Инициализация:** $\tilde{x} \in \mathbb{R}^p$.
- **Для** $s = 1, 2, \ldots$ (внешний цикл — эпохи):
  - Вычисляем все градиенты $\nabla f_i(\tilde{x})$ и сохраняем $\nabla f(\tilde{x}) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \nabla f_i(\tilde{x})$.
  - Инициализируем $x_0 = \tilde{x}$.
  - **Для** $t = 1, \ldots, m$ (внутренний цикл):
    - выбираем $i_t \in \{1, \ldots, n\}$ равномерно;
    - $x_t = x_{t-1} - \alpha \left[\nabla f_{i_t}(x_{t-1}) - \nabla f_{i_t}(\tilde{x}) + \nabla f(\tilde{x}) \right]$.
  - Обновляем $\tilde{x} = x_m$.

Замечания:

- Два вычисления градиента на внутреннем шаге.
- Только два параметра: длина эпохи m и шаг α.

SVRG (Stochastic Variance Reduced Gradient) [2]

- **Инициализация:** $\tilde{x} \in \mathbb{R}^p$.
- **Для** $s = 1, 2, \ldots$ (внешний цикл — эпохи):
  - Вычисляем все градиенты $\nabla f_i(\tilde{x})$ и сохраняем $\nabla f(\tilde{x}) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \nabla f_i(\tilde{x})$.
  - Инициализируем $x_0 = \tilde{x}$.
  - **Для** $t = 1, \ldots, m$ (внутренний цикл):
    - выбираем $i_t \in \{1, \ldots, n\}$ равномерно;
    - $x_t = x_{t-1} - \alpha \left[\nabla f_{i_t}(x_{t-1}) - \nabla f_{i_t}(\tilde{x}) + \nabla f(\tilde{x}) \right]$.
  - Обновляем $\tilde{x} = x_m$.

Замечания:

- Два вычисления градиента на внутреннем шаге.
- Только два параметра: длина эпохи m и шаг α.
- Память $O(p)$ — в n раз меньше, чем у SAG.

SVRG (Stochastic Variance Reduced Gradient) [2]

- **Инициализация:** $\tilde{x} \in \mathbb{R}^p$.
- **Для** $s = 1, 2, \ldots$ (внешний цикл — эпохи):
  - Вычисляем все градиенты $\nabla f_i(\tilde{x})$ и сохраняем $\nabla f(\tilde{x}) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \nabla f_i(\tilde{x})$.
  - Инициализируем $x_0 = \tilde{x}$.
  - **Для** $t = 1, \ldots, m$ (внутренний цикл):
    - выбираем $i_t \in \{1, \ldots, n\}$ равномерно;
    - $x_t = x_{t-1} - \alpha \left[\nabla f_{i_t}(x_{t-1}) - \nabla f_{i_t}(\tilde{x}) + \nabla f(\tilde{x}) \right]$.
  - Обновляем $\tilde{x} = x_m$.

Замечания:

- Два вычисления градиента на внутреннем шаге.
- Только два параметра: длина эпохи m и шаг α.
- Память $O(p)$ — в n раз меньше, чем у SAG.
- Линейная скорость сходимости в сильно выпуклом случае, доказательство гораздо короче.

[2] Johnson, Zhang (2013). Accelerating SGD using Predictive Variance Reduction.

SAGA [3] (follow-up SAG)

SAGA — прямое развитие SAG. Структура та же, отличается **одна** деталь в обновлении.

- Поддерживаем таблицу градиентов g_i функции f_i, $i = 1, \dots, n$.

SAGA [3]

SAGA — прямое развитие SAG. Структура та же, отличается **одна** деталь в обновлении.

- Поддерживаем таблицу градиентов g_i функции f_i, $i = 1, \dots, n$.
- Инициализируем $x^{(0)}$ и $g_i^{(0)} = \nabla f_i(x^{(0)})$.

SAGA [3]

SAGA — прямое развитие SAG. Структура та же, отличается **одна** деталь в обновлении.

- Поддерживаем таблицу градиентов g_i функции f_i, $i = 1, \dots, n$.
- Инициализируем $x^{(0)}$ и $g_i^{(0)} = \nabla f_i(x^{(0)})$.
- На шаге $k = 1, 2, \dots$ выбираем случайный $i_k \in \{1, \dots, n\}$, обновляем только одну запись:

$$g_{i_k}^{(k)} = \nabla f_{i_k}(x^{(k-1)}), \qquad g_i^{(k)} = g_i^{(k-1)} \text{ для } i \neq i_k.$$

SAGA [3]

SAGA — прямое развитие SAG. Структура та же, отличается **одна** деталь в обновлении.

- Поддерживаем таблицу градиентов g_i функции f_i, $i = 1, \dots, n$.
- Инициализируем $x^{(0)}$ и $g_i^{(0)} = \nabla f_i(x^{(0)})$.
- На шаге $k = 1, 2, \dots$ выбираем случайный $i_k \in \{1, \dots, n\}$, обновляем только одну запись:

$$g_{i_k}^{(k)} = \nabla f_{i_k}(x^{(k-1)}), \qquad g_i^{(k)} = g_i^{(k-1)} \text{ для } i \neq i_k.$$

- Обновление параметра:

$$x^{(k)} = x^{(k-1)} - \alpha \Big[\underbrace{g_{i_k}^{(k)} - g_{i_k}^{(k-1)}}_{\text{свежая поправка}} + \underbrace{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} g_i^{(k-1)}}_{\text{старое среднее}} \Big].$$

SAGA [3]

SAGA — прямое развитие SAG. Структура та же, отличается **одна** деталь в обновлении.

- Поддерживаем таблицу градиентов g_i функции f_i, $i = 1, \dots, n$.
- Инициализируем $x^{(0)}$ и $g_i^{(0)} = \nabla f_i(x^{(0)})$.
- На шаге $k = 1, 2, \dots$ выбираем случайный $i_k \in \{1, \dots, n\}$, обновляем только одну запись:

$$g_{i_k}^{(k)} = \nabla f_{i_k}(x^{(k-1)}), \qquad g_i^{(k)} = g_i^{(k-1)} \text{ для } i \neq i_k.$$

- Обновление параметра:

$$x^{(k)} = x^{(k-1)} - \alpha \Big[\underbrace{g_{i_k}^{(k)} - g_{i_k}^{(k-1)}}_{\text{свежая поправка}} + \underbrace{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} g_i^{(k-1)}}_{\text{старое среднее}} \Big].$$

[3] Defazio, Bach, Lacoste-Julien (2014). SAGA: A Fast Incremental Gradient Method.

SAGA [3]

SAGA — прямое развитие SAG. Структура та же, отличается **одна** деталь в обновлении.

- Поддерживаем таблицу градиентов g_i функции f_i, $i = 1, \dots, n$.
- Инициализируем $x^{(0)}$ и $g_i^{(0)} = \nabla f_i(x^{(0)})$.
- На шаге $k = 1, 2, \dots$ выбираем случайный $i_k \in \{1, \dots, n\}$, обновляем только одну запись:

$$g_{i_k}^{(k)} = \nabla f_{i_k}(x^{(k-1)}), \qquad g_i^{(k)} = g_i^{(k-1)} \text{ для } i \neq i_k.$$

- Обновление параметра:

$$x^{(k)} = x^{(k-1)} - \alpha \Big[\underbrace{g_{i_k}^{(k)} - g_{i_k}^{(k-1)}}_{\text{свежая поправка}} + \underbrace{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} g_i^{(k-1)}}_{\text{старое среднее}} \Big].$$

Сравнение оценок: $g_{\text{SAGA}}^{(k)} = g_{i_k}^{(k)} - g_{i_k}^{(k-1)} + \frac{1}{n} \sum_i g_i^{(k-1)}$ — отличается от SAG только **отсутствием множителя** $\frac{1}{n}$ у поправки.

[3] Defazio, Bach, Lacoste-Julien (2014). SAGA: A Fast Incremental Gradient Method.

SAG vs SAGA: смещённость через контрольную переменную

Вернёмся к семейству оценок $\theta_\alpha = \alpha(X - Y) + \mathbb{E}[Y]$ для оценивания $\mathbb{E}[X]$, где X, Y — коррелированы:

$$\mathbb{E}[\theta_\alpha] = \alpha\,\mathbb{E}[X] + (1-\alpha)\,\mathbb{E}[Y], \qquad \mathrm{Var}(\theta_\alpha) = \alpha^2(\mathrm{Var}(X) + \mathrm{Var}(Y) - 2\,\mathrm{Cov}(X,Y)).$$

SAG vs SAGA: смещённость через контрольную переменную

Вернёмся к семейству оценок $\theta_\alpha = \alpha(X - Y) + \mathbb{E}[Y]$ для оценивания $\mathbb{E}[X]$, где X, Y — коррелированы:

$$\mathbb{E}[\theta_\alpha] = \alpha\,\mathbb{E}[X] + (1-\alpha)\,\mathbb{E}[Y], \qquad \mathrm{Var}(\theta_\alpha) = \alpha^2(\mathrm{Var}(X) + \mathrm{Var}(Y) - 2\,\mathrm{Cov}(X,Y)).$$

Для оценок градиента возьмём $X = g_{i_k}^{(k)}$ (свежий), $Y = g_{i_k}^{(k-1)}$ (старый), $\mathbb{E}[Y] = \frac{1}{n}\sum_i g_i^{(k-1)}$.

- **SAGA** использует $\alpha = 1 \Rightarrow$ оценка **несмещённая**: $\mathbb{E}[g_{\mathsf{SAGA}}^{(k)}] = \nabla f(x^{(k-1)})$.

SAG vs SAGA: смещённость через контрольную переменную

Вернёмся к семейству оценок $\theta_\alpha = \alpha(X - Y) + \mathbb{E}[Y]$ для оценивания $\mathbb{E}[X]$, где X, Y — коррелированы:

$$\mathbb{E}[\theta_\alpha] = \alpha\,\mathbb{E}[X] + (1-\alpha)\,\mathbb{E}[Y], \qquad \mathrm{Var}(\theta_\alpha) = \alpha^2(\mathrm{Var}(X) + \mathrm{Var}(Y) - 2\,\mathrm{Cov}(X,Y)).$$

Для оценок градиента возьмём $X = g_{i_k}^{(k)}$ (свежий), $Y = g_{i_k}^{(k-1)}$ (старый), $\mathbb{E}[Y] = \frac{1}{n}\sum_i g_i^{(k-1)}$.

- **SAGA** использует $\alpha = 1 \Rightarrow$ оценка **несмещённая**: $\mathbb{E}[g_{\mathsf{SAGA}}^{(k)}] = \nabla f(x^{(k-1)})$.
- **SAG** использует $\alpha = 1/n \Rightarrow$ оценка **смещённая**, но дисперсия в n^2 раз меньше.

SAG vs SAGA: смещённость через контрольную переменную

Вернёмся к семейству оценок $\theta_\alpha = \alpha(X - Y) + \mathbb{E}[Y]$ для оценивания $\mathbb{E}[X]$, где X, Y — коррелированы:

$$\mathbb{E}[\theta_\alpha] = \alpha\,\mathbb{E}[X] + (1-\alpha)\,\mathbb{E}[Y], \qquad \mathrm{Var}(\theta_\alpha) = \alpha^2(\mathrm{Var}(X) + \mathrm{Var}(Y) - 2\,\mathrm{Cov}(X,Y)).$$

Для оценок градиента возьмём $X = g_{i_k}^{(k)}$ (свежий), $Y = g_{i_k}^{(k-1)}$ (старый), $\mathbb{E}[Y] = \frac{1}{n}\sum_i g_i^{(k-1)}$.

- **SAGA** использует $\alpha = 1 \Rightarrow$ оценка **несмещённая**: $\mathbb{E}[g_{\mathsf{SAGA}}^{(k)}] = \nabla f(x^{(k-1)})$.
- **SAG** использует $\alpha = 1/n \Rightarrow$ оценка **смещённая**, но дисперсия в n^2 раз меньше.

SAG vs SAGA: смещённость через контрольную переменную

Вернёмся к семейству оценок $\theta_\alpha = \alpha(X - Y) + \mathbb{E}[Y]$ для оценивания $\mathbb{E}[X]$, где X, Y — коррелированы:

$$\mathbb{E}[\theta_\alpha] = \alpha\,\mathbb{E}[X] + (1-\alpha)\,\mathbb{E}[Y], \qquad \mathrm{Var}(\theta_\alpha) = \alpha^2(\mathrm{Var}(X) + \mathrm{Var}(Y) - 2\,\mathrm{Cov}(X,Y)).$$

Для оценок градиента возьмём $X = g_{i_k}^{(k)}$ (свежий), $Y = g_{i_k}^{(k-1)}$ (старый), $\mathbb{E}[Y] = \frac{1}{n}\sum_i g_i^{(k-1)}$.

- **SAGA** использует $\alpha = 1 \Rightarrow$ оценка **несмещённая**: $\mathbb{E}[g_{\mathsf{SAGA}}^{(k)}] = \nabla f(x^{(k-1)})$.
- **SAG** использует $\alpha = 1/n \Rightarrow$ оценка **смещённая**, но дисперсия в n^2 раз меньше.

Замечательный факт: SAGA достигает **тех же скоростей сходимости**, что и SAG, при значительно более простом доказательстве (несмещённость убирает кучу хитростей).

Сходимость SAGA

Те же предположения: каждая f_i выпукла, дифференцируема, ∇f_i — L-липшицев.

Теорема (SAGA, выпуклый случай)

SAGA с шагом $\alpha = \frac{1}{3L}$ и инициализацией $g_i^{(0)} = \nabla f_i(x^{(0)}) - \nabla f(x^{(0)})$:

$$\mathbb{E}[f(\bar{x}^{(k)})] - f^\star \leq \frac{4n}{k}[f(x^{(0)}) - f^\star] + \frac{8L}{k}\left\|x^{(0)} - x^\star\right\|^2.$$

- В сильно выпуклом случае ($\mu > 0$): шаг $\alpha = \frac{1}{2(\mu n + L)}$, линейная скорость с коэффициентом сжатия $1 - \frac{\mu}{2(\mu n + L)}$.

Сходимость SAGA

Те же предположения: каждая f_i выпукла, дифференцируема, ∇f_i — L-липшицев.

Теорема (SAGA, выпуклый случай)

SAGA с шагом $\alpha = \frac{1}{3L}$ и инициализацией $g_i^{(0)} = \nabla f_i(x^{(0)}) - \nabla f(x^{(0)})$:

$$\mathbb{E}[f(\bar{x}^{(k)})] - f^\star \le \frac{4n}{k}[f(x^{(0)}) - f^\star] + \frac{8L}{k}\|x^{(0)} - x^\star\|^2.$$

- В сильно выпуклом случае ($\mu > 0$): шаг $\alpha = \frac{1}{2(\mu n + L)}$, линейная скорость с коэффициентом сжатия $1 - \frac{\mu}{2(\mu n + L)}$.
- SAGA естественно расширяется на композитные задачи $\min f(x) + h(x)$ через проксимальный оператор от h.

Сравнение методов

Метод	Стоимость итерации	Сходимость (сильно выпуклый)	Память	Несмещён?
GD	$O(n)$	Линейная	$O(p)$	—
SGD	$O(1)$	Сублинейная $O(1/k)$	$O(p)$	да
SAG	$O(1)$	Линейная	$O(np)$	нет
SVRG	$O(1)^*$	Линейная	$O(p)$	да
SAGA	$O(1)$	Линейная	$O(np)$	да

* стоимость внутр. итерации

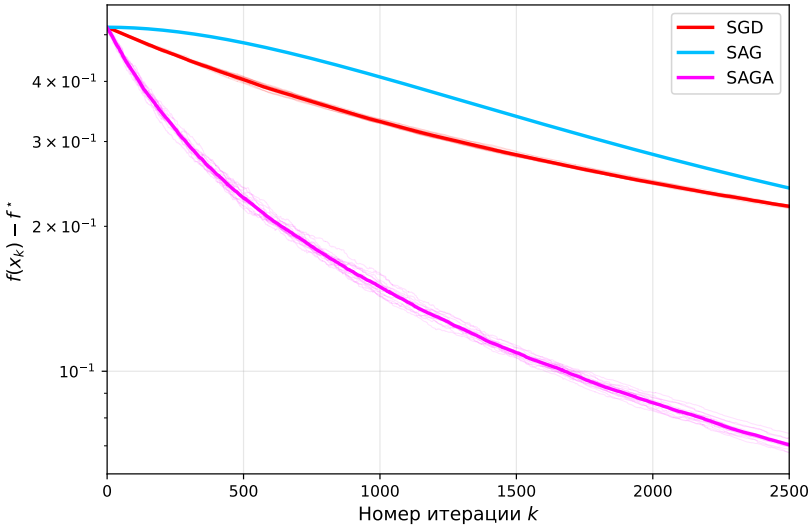
Сравнение методов

Метод	Стоимость итерации	Сходимость (сильно выпуклый)	Память	Несмещён?
GD	$O(n)$	Линейная	$O(p)$	—
SGD	$O(1)$	Сублинейная $O(1/k)$	$O(p)$	да
SAG	$O(1)$	Линейная	$O(np)$	нет
SVRG	$O(1)$	Линейная	$O(p)$	да
SAGA	$O(1)$	Линейная	$O(np)$	да

Главное достижение: VR-методы достигают **линейной** сходимости при стоимости итерации $O(1)$ — то, чего нет у обычного SGD.

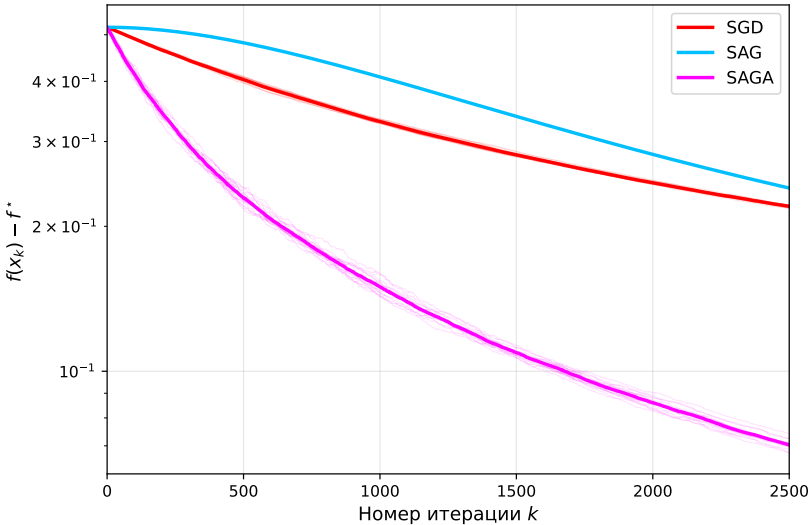
Численный эксперимент: SGD vs SAG vs SAGA

Логистическая регрессия с ℓ_2-регуляризацией, $n = 800$, $d = 100$. Шаги: $\alpha_{\text{SAG}} = \alpha_{\text{SGD}} = \frac{1}{16L}$, $\alpha_{\text{SAGA}} = \frac{1}{3L}$. По 15 запусков с разными случайными перестановками.



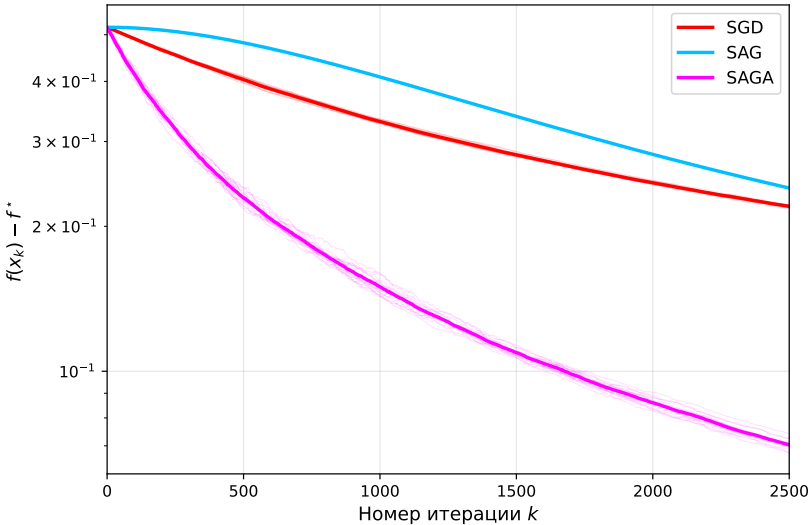
Численный эксперимент: SGD vs SAG vs SAGA

Логистическая регрессия с ℓ_2-регуляризацией, $n = 800$, $d = 100$. Шаги: $\alpha_{\text{SAG}} = \alpha_{\text{SGD}} = \frac{1}{16L}$, $\alpha_{\text{SAGA}} = \frac{1}{3L}$. По 15 запусков с разными случайными перестановками.



Численный эксперимент: SGD vs SAG vs SAGA

Логистическая регрессия с ℓ_2-регуляризацией, $n = 800$, $d = 100$. Шаги: $\alpha_{\text{SAG}} = \alpha_{\text{SGD}} = \frac{1}{16L}$, $\alpha_{\text{SAGA}} = \frac{1}{3L}$. По 15 запусков с разными случайными перестановками.



Можно ли быстрее? Нижние оценки и ускорение

Для выпуклой задачи с конечной суммой (n компонент, μ-сильно выпуклых, L-гладких) известны **точные нижние оценки**.

Можно ли быстрее? Нижние оценки и ускорение

Для выпуклой задачи с конечной суммой (n компонент, μ-сильно выпуклых, L-гладких) известны **точные нижние оценки**.

Верхняя оценка для SAG / SAGA / SVRG (и им подобных):

$$\#\,\text{итераций} = \mathcal{O}\Big((n + \tfrac{L}{\mu})\log\tfrac{1}{\varepsilon}\Big)\,.$$

[4] Lan, Zhou (2015). *An optimal randomized incremental gradient method.*; Woodworth, Srebro (2016).

Можно ли быстрее? Нижние оценки и ускорение

Для выпуклой задачи с конечной суммой (n компонент, μ-сильно выпуклых, L-гладких) известны **точные нижние оценки**.

Верхняя оценка для SAG / SAGA / SVRG (и им подобных):

$$\#\,\text{итераций} = \mathcal{O}\Big((n + \tfrac{L}{\mu})\log\tfrac{1}{\varepsilon}\Big)\,.$$

Нижняя оценка [4]:

$$\#\,\text{итераций} = \Omega\Big((n + \sqrt{\tfrac{nL}{\mu}})\log\tfrac{1}{\varepsilon}\Big)\,.$$

Между ними есть **зазор**: на плохо обусловленных задачах ($L/\mu \gg n$) можно ускориться в $\sqrt{n}$ раз.

[4] Lan, Zhou (2015). *An optimal randomized incremental gradient method.*; Woodworth, Srebro (2016).

Можно ли быстрее? Нижние оценки и ускорение

Для выпуклой задачи с конечной суммой (n компонент, μ-сильно выпуклых, L-гладких) известны **точные нижние оценки**.

Верхняя оценка для SAG / SAGA / SVRG (и им подобных):

$$\#\text{ итераций} = \mathcal{O}\Big((n + \tfrac{L}{\mu})\log\tfrac{1}{\varepsilon}\Big).$$

Нижняя оценка [4]:

$$\#\text{ итераций} = \Omega\Big((n + \sqrt{\tfrac{nL}{\mu}})\log\tfrac{1}{\varepsilon}\Big).$$

Между ними есть **зазор**: на плохо обусловленных задачах ($L/\mu \gg n$) можно ускориться в $\sqrt{n}$ раз.

Ускоренные VR-методы (Catalyst, Lan-Zhou, Allen-Zhu Katyusha) этот зазор закрывают:

$$\#\text{ итераций} = \mathcal{O}\Big((n + \sqrt{\tfrac{nL}{\mu}})\log\tfrac{1}{\varepsilon}\Big) \;-\; \text{оптимально.}$$

[4] Lan, Zhou (2015). *An optimal randomized incremental gradient method.*; Woodworth, Srebro (2016).

Моментум, ускорение и невыпуклый случай

- **Выпуклая задача с конечной суммой** — закрыта: VR + ускорение дают оптимальную скорость.

Моментум, ускорение и невыпуклый случай

- **Выпуклая задача с конечной суммой** — закрыта: VR + ускорение дают оптимальную скорость.
- **Общий выпуклый стохастический случай** (без конечной суммы): SGD оптимален, улучшить нельзя [5].

[5] Nemirovski, Juditsky, Lan, Shapiro (2009)

Моментум, ускорение и невыпуклый случай

- **Выпуклая задача с конечной суммой** — закрыта: VR + ускорение дают оптимальную скорость.
- **Общий выпуклый стохастический случай** (без конечной суммы): SGD оптимален, улучшить нельзя [5].

[5] Nemirovski, Juditsky, Lan, Shapiro (2009)

Моментум, ускорение и невыпуклый случай

- **Выпуклая задача с конечной суммой** — закрыта: VR + ускорение дают оптимальную скорость.
- **Общий выпуклый стохастический случай** (без конечной суммы): SGD оптимален, улучшить нельзя [5].
- **Невыпуклый случай** — история сильно сложнее. Ускорение в стиле Нестерова используется реже; вместо него — **момент** (Polyak 1964, предшествует ускорению почти на 20 лет):

$$x^{k+1} = x^k + \beta\,(x^k - x^{k-1}) - \alpha\,\nabla f_{i_k}(x^k).$$

[5] Nemirovski, Juditsky, Lan, Shapiro (2009)

Моментум, ускорение и невыпуклый случай

- **Выпуклая задача с конечной суммой** — закрыта: VR + ускорение дают оптимальную скорость.
- **Общий выпуклый стохастический случай** (без конечной суммы): SGD оптимален, улучшить нельзя [5].
- **Невыпуклый случай** — история сильно сложнее. Ускорение в стиле Нестерова используется реже; вместо него — **момент** (Polyak 1964, предшествует ускорению почти на 20 лет):

$$x^{k+1} = x^k + \beta\,(x^k - x^{k-1}) - \alpha\,\nabla f_{i_k}(x^k).$$

- На практике моментум работает очень хорошо, но менее устойчив.

[5] Nemirovski, Juditsky, Lan, Shapiro (2009)

Моментум, ускорение и невыпуклый случай

- **Выпуклая задача с конечной суммой** — закрыта: VR + ускорение дают оптимальную скорость.
- **Общий выпуклый стохастический случай** (без конечной суммы): SGD оптимален, улучшить нельзя [5].
- **Невыпуклый случай** — история сильно сложнее. Ускорение в стиле Нестерова используется реже; вместо него — **момент** (Polyak 1964, предшествует ускорению почти на 20 лет):

$$x^{k+1} = x^k + \beta\,(x^k - x^{k-1}) - \alpha\,\nabla f_{i_k}(x^k).$$

- На практике моментум работает очень хорошо, но менее устойчив.
- Ускорение Нестерова отличается **корректирующим градиентным членом**, и сама корректировка устроена по-разному в выпуклом и сильно выпуклом случае.

[5] Nemirovski, Juditsky, Lan, Shapiro (2009)

Моментум, ускорение и невыпуклый случай

- **Выпуклая задача с конечной суммой** — закрыта: VR + ускорение дают оптимальную скорость.
- **Общий выпуклый стохастический случай** (без конечной суммы): SGD оптимален, улучшить нельзя [5].
- **Невыпуклый случай** — история сильно сложнее. Ускорение в стиле Нестерова используется реже; вместо него — **момент** (Polyak 1964, предшествует ускорению почти на 20 лет):

$$x^{k+1} = x^k + \beta\,(x^k - x^{k-1}) - \alpha\,\nabla f_{i_k}(x^k).$$

- На практике моментум работает очень хорошо, но менее устойчив.
- Ускорение Нестерова отличается **корректирующим градиентным членом**, и сама корректировка устроена по-разному в выпуклом и сильно выпуклом случае.
- **Открытая задача**: когда и почему всё это работает в невыпуклом случае?

[5] Nemirovski, Juditsky, Lan, Shapiro (2009)

Работают ли VR-методы для нейросетей? [6]

- Обучение нейросетей нарушает большинство предположений, на которых строятся VR-методы:

Работают ли VR-методы для нейросетей? [6]

- Обучение нейросетей нарушает большинство предположений, на которых строятся VR-методы:
  - данные не фиксированы — на каждой эпохе работают аугментации и dropout;

Работают ли VR-методы для нейросетей? [6]

- Обучение нейросетей нарушает большинство предположений, на которых строятся VR-методы:
  - данные не фиксированы — на каждой эпохе работают аугментации и dropout;
  - траектория обучения долго остаётся вдали от окрестности оптимума x^*;

Работают ли VR-методы для нейросетей? [6]

- Обучение нейросетей нарушает большинство предположений, на которых строятся VR-методы:
  - данные не фиксированы — на каждой эпохе работают аугментации и dropout;
  - траектория обучения долго остаётся вдали от окрестности оптимума x^*;
  - задача невыпуклая и нелинейная.

+ невыпуклая часто

Работают ли VR-методы для нейросетей? [6]

- Обучение нейросетей нарушает большинство предположений, на которых строятся VR-методы:
  - данные не фиксированы — на каждой эпохе работают аугментации и dropout;
  - траектория обучения долго остаётся вдали от окрестности оптимума x^*;
  - задача невыпуклая и нелинейная.
- Авторы рассматривают SVRG (наиболее экономный по памяти) и получают **либо ухудшение качества, либо расходимость** на CIFAR и ImageNet.

Работают ли VR-методы для нейросетей? [6]

- Обучение нейросетей нарушает большинство предположений, на которых строятся VR-методы:
  - данные не фиксированы — на каждой эпохе работают аугментации и dropout;
  - траектория обучения долго остаётся вдали от окрестности оптимума x^*;
  - задача невыпуклая и нелинейная.
- Авторы рассматривают SVRG (наиболее экономный по памяти) и получают **либо ухудшение качества, либо расходимость** на CIFAR и ImageNet.
- В конце они предлагают комбинировать редукцию дисперсии с адаптивными методами (AdaGrad, Adam, ...). Это естественный мостик к следующей части лекции.

[6] Defazio, Bottou (2019). On the Ineffectiveness of Variance Reduced Optimization for Deep Learning.

Адаптивные стохастические методы

Почему нужна адаптивность

- Единый скаляр α — плохой выбор, когда **разные координаты** имеют существенно разные масштабы:

Почему нужна адаптивность

- Единый скаляр α — плохой выбор, когда **разные координаты** имеют существенно разные масштабы:
  - редкие признаки в логистической регрессии и NLP-моделях, отдельные параметры в глубоких сетях;

Почему нужна адаптивность

- Единый скаляр α — плохой выбор, когда **разные координаты** имеют существенно разные масштабы:
  - редкие признаки в логистической регрессии и NLP-моделях, отдельные параметры в глубоких сетях;
  - слой эмбеддингов для редких слов обновляется намного реже, чем плотные слои.

Почему нужна адаптивность

- Единый скаляр α — плохой выбор, когда **разные координаты** имеют существенно разные масштабы:
  - редкие признаки в логистической регрессии и NLP-моделях, отдельные параметры в глубоких сетях;
  - слой эмбеддингов для редких слов обновляется намного реже, чем плотные слои.
- Идея адаптивных методов — **подобрать свой эффективный шаг каждой координате**, опираясь на накопленную историю градиентов.

Почему нужна адаптивность

- Единый скаляр α — плохой выбор, когда **разные координаты** имеют существенно разные масштабы:
  - редкие признаки в логистической регрессии и NLP-моделях, отдельные параметры в глубоких сетях;
  - слой эмбеддингов для редких слов обновляется намного реже, чем плотные слои.
- Идея адаптивных методов — **подобрать свой эффективный шаг каждой координате**, опираясь на накопленную историю градиентов.
- Содержательно это можно трактовать как грубое приближение диагонали гессиана (или информационной матрицы Фишера).

Adagrad [7]

Пусть $g^{(k)} = \nabla f_{i_k}(x^{(k-1)})$. Обновление для каждой координаты $j = 1, \dots, p$:

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

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

Замечания:

- Не требует тонкой настройки α — эффективный шаг убывает автоматически по каждой координате.

Adagrad [7]

Пусть $g^{(k)} = \nabla f_{i_k}(x^{(k-1)})$. Обновление для каждой координаты $j = 1, \dots, p$:

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

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

Замечания:

- Не требует тонкой настройки α — эффективный шаг убывает автоматически по каждой координате.
- Для редких, но информативных признаков шаг убывает медленно — алгоритм даёт им «работать» дольше.

Adagrad [7]

Пусть $g^{(k)} = \nabla f_{i_k}(x^{(k-1)})$. Обновление для каждой координаты $j = 1, \dots, p$:

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

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

Замечания:

- Не требует тонкой настройки α — эффективный шаг убывает автоматически по каждой координате.
- Для редких, но информативных признаков шаг убывает медленно — алгоритм даёт им «работать» дольше.
- Заметно улучшает SGD в разреженных задачах (NLP, рекомендательные системы).

Adagrad [7]

Пусть $g^{(k)} = \nabla f_{i_k}(x^{(k-1)})$. Обновление для каждой координаты $j = 1, \dots, p$:

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

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

Замечания:

- Не требует тонкой настройки α — эффективный шаг убывает автоматически по каждой координате.
- Для редких, но информативных признаков шаг убывает медленно — алгоритм даёт им «работать» дольше.
- Заметно улучшает SGD в разреженных задачах (NLP, рекомендательные системы).
- Главная слабость — **монотонное** накопление в знаменателе: эффективный шаг $\to 0$ слишком рано, и обучение «затухает».

[7] Duchi, Hazan, Singer (2010). Adaptive Subgradient Methods for Online Learning and Stochastic Optimization.

RMSProp [8]

Решает проблему монотонно убывающей скорости обучения. Использует экспоненциально затухающее среднее квадратов градиентов:

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

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

Замечания:

- В знаменателе — корень из скользящего среднего квадратов градиентов: грубая оценка корня из среднеквадратичной величины градиента по каждой координате.

RMSProp [8]

Решает проблему монотонно убывающей скорости обучения. Использует экспоненциально затухающее среднее квадратов градиентов:

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

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

Замечания:

- В знаменателе — корень из скользящего среднего квадратов градиентов: грубая оценка корня из среднеквадратичной величины градиента по каждой координате.
- Более гибкая настройка, чем у AdaGrad, подходит для нестационарных задач.

RMSProp [8]

Решает проблему монотонно убывающей скорости обучения. Использует экспоненциально затухающее среднее квадратов градиентов:

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

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

Замечания:

- В знаменателе — корень из скользящего среднего квадратов градиентов: грубая оценка корня из среднеквадратичной величины градиента по каждой координате.
- Более гибкая настройка, чем у AdaGrad, подходит для нестационарных задач.
- Долгое время был выбором по умолчанию при обучении рекуррентных сетей.

[8] Tieleman, Hinton (2012). Coursera Lecture 6.

Adadelta [9]

Развитие RMSProp: вообще **не требует** глобального шага α. Вместо этого использует «единицы измерения» обновлений:

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

$$\tilde{g}_j^{(k)} = \frac{\sqrt{\Delta x_j^{(k-1)} + \varepsilon}}{\sqrt{v_j^{(k)} + \varepsilon}}\, g_j^{(k)}$$

$$x_j^{(k)} = x_j^{(k-1)} - \tilde{g}_j^{(k)}, \qquad \Delta x_j^{(k)} = \rho\, \Delta x_j^{(k-1)} + (1-\rho)\left(\tilde{g}_j^{(k)}\right)^2$$

Замечания:

- Шаг автоматически масштабируется так, чтобы иметь те же единицы, что и параметр.

Adadelta [9]

Развитие RMSProp: вообще **не требует** глобального шага α. Вместо этого использует «единицы измерения» обновлений:

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

$$\tilde{g}_j^{(k)} = \frac{\sqrt{\Delta x_j^{(k-1)} + \varepsilon}}{\sqrt{v_j^{(k)} + \varepsilon}}\, g_j^{(k)}$$

$$x_j^{(k)} = x_j^{(k-1)} - \tilde{g}_j^{(k)}, \qquad \Delta x_j^{(k)} = \rho\, \Delta x_j^{(k-1)} + (1-\rho)\left(\tilde{g}_j^{(k)}\right)^2$$

Замечания:

- Шаг автоматически масштабируется так, чтобы иметь те же единицы, что и параметр.
- Полезен, когда масштабы параметров между слоями существенно различаются.

[9] Zeiler (2012). ADADELTA: An Adaptive Learning Rate Method.

Adam [10] [11]

Комбинирует элементы AdaGrad и RMSProp. Экспоненциально затухающее среднее градиентов и квадратов градиентов:

EMA:
$$m_j^{(k)} = \beta_1 m_j^{(k-1)} + (1-\beta_1) g_j^{(k)}$$
$$v_j^{(k)} = \beta_2 v_j^{(k-1)} + (1-\beta_2) \left(g_j^{(k)}\right)^2$$

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

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

Замечания:

- Корректирует смещение моментов к нулю на старте.

Adam [10] [11]

Комбинирует элементы AdaGrad и RMSProp. Экспоненциально затухающее среднее градиентов и квадратов градиентов:

EMA:
$$m_j^{(k)} = \beta_1 m_j^{(k-1)} + (1-\beta_1) g_j^{(k)}$$
$$v_j^{(k)} = \beta_2 v_j^{(k-1)} + (1-\beta_2) \left(g_j^{(k)}\right)^2$$

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

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

Замечания:

- Корректирует смещение моментов к нулю на старте.
- Одна из самых цитируемых работ в области ML.

Adam [10] [11]

Комбинирует элементы AdaGrad и RMSProp. Экспоненциально затухающее среднее градиентов и квадратов градиентов:

EMA:
$$m_j^{(k)} = \beta_1 m_j^{(k-1)} + (1-\beta_1) g_j^{(k)}$$
$$v_j^{(k)} = \beta_2 v_j^{(k-1)} + (1-\beta_2) \left(g_j^{(k)}\right)^2$$

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

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

Замечания:

- Корректирует смещение моментов к нулю на старте.
- Одна из самых цитируемых работ в области ML.
- Не сходится для некоторых простых задач (даже выпуклых).

Adam [10] [11]

Комбинирует элементы AdaGrad и RMSProp. Экспоненциально затухающее среднее градиентов и квадратов градиентов:

EMA:
$$m_j^{(k)} = \beta_1 m_j^{(k-1)} + (1-\beta_1) g_j^{(k)}$$
$$v_j^{(k)} = \beta_2 v_j^{(k-1)} + (1-\beta_2) \left(g_j^{(k)}\right)^2$$

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

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

Замечания:

- Корректирует смещение моментов к нулю на старте.
- Одна из самых цитируемых работ в области ML.
- Не сходится для некоторых простых задач (даже выпуклых).
- Гораздо лучше работает для языковых моделей, чем для задач компьютерного зрения — открытый вопрос «почему».

[10] Kingma, Ba (2014). Adam: A Method for Stochastic Optimization.
[11] Reddi, Kale, Kumar (2018). On the Convergence of Adam and Beyond.

AdamW [12]

Решает проблему ℓ_2-регуляризации в адаптивных оптимизаторах. Стандартная ℓ_2-регуляризация добавляет $\lambda\|x\|^2$ к целевой функции, порождая градиентный член λx. В Adam этот член делится на $(\sqrt{\hat{v}_j} + \varepsilon)$ — то есть сила регуляризации оказывается связана с величинами градиентов, что нежелательно.

AdamW **разделяет** weight decay и адаптацию градиентов:

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

Замечания:

- Член weight decay $\lambda x_j^{(k-1)}$ добавляется *после* адаптивного градиентного шага и не масштабируется на $\sqrt{\hat{v}_j}$.

AdamW [12]

Решает проблему ℓ_2-регуляризации в адаптивных оптимизаторах. Стандартная ℓ_2-регуляризация добавляет $\lambda\|x\|^2$ к целевой функции, порождая градиентный член λx. В Adam этот член делится на $(\sqrt{\hat{v}_j} + \varepsilon)$ — то есть сила регуляризации оказывается связана с величинами градиентов, что нежелательно.

AdamW **разделяет** weight decay и адаптацию градиентов:

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

Замечания:

- Член weight decay $\lambda x_j^{(k-1)}$ добавляется *после* адаптивного градиентного шага и не масштабируется на $\sqrt{\hat{v}_j}$.
- Широко используется при обучении трансформеров и больших моделей; выбор по умолчанию в HuggingFace Trainer.

[12] Loshchilov, Hutter (2017). Decoupled Weight Decay Regularization.

Adam не сходится: постановка [13]

Рассмотрим **простейшую** возможную задачу — выпуклую, гладкую, сильно выпуклую, с единственным глобальным минимумом в нуле:

$$L(w) = w^2, \qquad \nabla L(w) = 2w, \qquad w \in \mathbb{R}.$$

Обновление Adam (одномерный случай, без коррекции смещения и для упрощения $\varepsilon = 0$):

$$\begin{aligned} g_t &= 2w_{t-1}, \\ m_t &= \beta_1 m_{t-1} + (1-\beta_1) g_t, \\ v_t &= \beta_2 v_{t-1} + (1-\beta_2) g_t^2, \\ w_t &= w_{t-1} - \eta \frac{m_t}{\sqrt{v_t}}. \end{aligned}$$

[13] Reddi et al. (2018). On the Convergence of Adam and Beyond.

Adam не сходится: постановка [13]

Рассмотрим **простейшую** возможную задачу — выпуклую, гладкую, сильно выпуклую, с единственным глобальным минимумом в нуле:

$$\boxed{L(w) = w^2,} \qquad \nabla L(w) = 2w, \qquad w \in \mathbb{R}.$$

Обновление Adam (одномерный случай, без коррекции смещения и для упрощения $\varepsilon = 0$):

$$\begin{aligned} g_t &= 2w_{t-1}, \\ m_t &= \beta_1 m_{t-1} + (1-\beta_1) g_t, \\ v_t &= \beta_2 v_{t-1} + (1-\beta_2) g_t^2, \\ w_t &= w_{t-1} - \eta \frac{m_t}{\sqrt{v_t}}. \end{aligned}$$

Чего мы **ждём** от любого приличного метода: $w_t \to 0$ и шаг $|w_t - w_{t-1}| \to 0$ по мере приближения к оптимуму. У GD с шагом $\eta < 1/2$ это так: $w_t = (1-2\eta) w_{t-1}$, экспоненциальная сходимость.

Покажем, что у Adam **этого не происходит**.

[13] Reddi et al. (2018). On the Convergence of Adam and Beyond.

Adam не сходится: анализ масштаба при малых $|w|$

Предположим, что итерации находятся в окрестности нуля и величина $|w_t|$ ведёт себя как масштаб $|w| \to 0$.
Что происходит с m_t и v_t?

Adam не сходится: анализ масштаба при малых $|w|$

Предположим, что итерации находятся в окрестности нуля и величина $|w_t|$ ведёт себя как масштаб $|w| \to 0$. Что происходит с m_t и v_t?

m_t **— линеен по** w**.** Это сумма (взвешенная) прошлых градиентов $g_\tau = 2w_{\tau-1}$, каждый из которых линеен по w:

$$m_t \;=\; (1-\beta_1)\sum_{\tau\le t}\beta_1^{t-\tau}\,2w_{\tau-1} \;\propto\; w.$$

Adam не сходится: анализ масштаба при малых $|w|$

Предположим, что итерации находятся в окрестности нуля и величина $|w_t|$ ведёт себя как масштаб $|w| \to 0$. Что происходит с m_t и v_t?

m_t — **линеен по** w**.** Это сумма (взвешенная) прошлых градиентов $g_\tau = 2w_{\tau-1}$, каждый из которых линеен по w:

$$m_t \;=\; (1-\beta_1)\sum_{\tau\le t}\beta_1^{t-\tau}\,2w_{\tau-1} \;\propto\; w.$$

v_t — **квадратичен по** w**.** Сумма прошлых $g_\tau^2 = 4w_{\tau-1}^2$, каждый член квадратичен:

$$v_t \;=\; (1-\beta_2)\sum_{\tau\le t}\beta_2^{t-\tau}\,4w_{\tau-1}^2 \;\propto\; w^2.$$

Adam не сходится: анализ масштаба при малых $|w|$

Предположим, что итерации находятся в окрестности нуля и величина $|w_t|$ ведёт себя как масштаб $|w| \to 0$. Что происходит с m_t и v_t?

m_t — **линеен по** w**.** Это сумма (взвешенная) прошлых градиентов $g_\tau = 2w_{\tau-1}$, каждый из которых линеен по w:

$$m_t \;=\; (1-\beta_1)\sum_{\tau\le t}\beta_1^{t-\tau}\,2w_{\tau-1} \;\propto\; w.$$

v_t — **квадратичен по** w**.** Сумма прошлых $g_\tau^2 = 4w_{\tau-1}^2$, каждый член квадратичен:

$$v_t \;=\; (1-\beta_2)\sum_{\tau\le t}\beta_2^{t-\tau}\,4w_{\tau-1}^2 \;\propto\; w^2.$$

Следовательно:

$$\boxed{\sqrt{v_t} \;\propto\; |w| \quad\Longrightarrow\quad \frac{m_t}{\sqrt{v_t}} \;\approx\; \operatorname{sign}(w) \;=\; \pm 1}$$

Это отношение **не зависит** от $|w|$: какой бы маленькой ни стала итерация, нормированный градиент остаётся порядка единицы.

Adam не сходится: предельный цикл

Из предыдущего шага: шаг Adam в окрестности нуля имеет постоянную **по модулю** длину

$$|w_t - w_{t-1}| \;=\; \eta \left| \frac{m_t}{\sqrt{v_t}} \right| \;\approx\; \eta,$$

независимо от того, насколько w близко к оптимуму.

Adam не сходится: предельный цикл

Из предыдущего шага: шаг Adam в окрестности нуля имеет постоянную **по модулю** длину

$$|w_t - w_{t-1}| \;=\; \eta \left| \frac{m_t}{\sqrt{v_t}} \right| \;\approx\; \eta,$$

независимо от того, насколько w близко к оптимуму.

Что это означает. Если $|w_{t-1}| < \eta/2$, то шаг $\pm\eta$ «перепрыгивает» через ноль и оказывается с противоположной стороны на расстоянии $\approx \eta/2$. На следующем шаге — обратно.

Adam не сходится: предельный цикл

Из предыдущего шага: шаг Adam в окрестности нуля имеет постоянную **по модулю** длину

$$|w_t - w_{t-1}| \;=\; \eta \left| \frac{m_t}{\sqrt{v_t}} \right| \;\approx\; \eta,$$

независимо от того, насколько w близко к оптимуму.

Что это означает. Если $|w_{t-1}| < \eta/2$, то шаг $\pm\eta$ «перепрыгивает» через ноль и оказывается с противоположной стороны на расстоянии $\approx \eta/2$. На следующем шаге — обратно.

Получаем **предельный цикл**:

$$w_t \;\in\; \{-\eta/2,\; +\eta/2\}, \qquad t \to \infty.$$

Метод **не сходится** ни к точке, ни даже к нулю по среднему.

Adam не сходится: предельный цикл

Из предыдущего шага: шаг Adam в окрестности нуля имеет постоянную **по модулю** длину

$$|w_t - w_{t-1}| \;=\; \eta \left| \frac{m_t}{\sqrt{v_t}} \right| \;\approx\; \eta,$$

независимо от того, насколько w близко к оптимуму.

Что это означает. Если $|w_{t-1}| < \eta/2$, то шаг $\pm\eta$ «перепрыгивает» через ноль и оказывается с противоположной стороны на расстоянии $\approx \eta/2$. На следующем шаге — обратно.

Получаем **предельный цикл**:

$$w_t \;\in\; \{-\eta/2,\; +\eta/2\}, \qquad t \to \infty.$$

Метод **не сходится** ни к точке, ни даже к нулю по среднему.

Сравнение с SGD. Для $L(w) = w^2$ обновление SGD:

$$w_t = w_{t-1} - \eta \cdot 2w_{t-1} = (1 - 2\eta)w_{t-1}.$$

Шаг **пропорционален** w, обнуляется в пределе $\Rightarrow$ сходимость.

Adam не сходится: предельный цикл

Из предыдущего шага: шаг Adam в окрестности нуля имеет постоянную **по модулю** длину

$$|w_t - w_{t-1}| \;=\; \eta \left| \frac{m_t}{\sqrt{v_t}} \right| \;\approx\; \eta,$$

независимо от того, насколько w близко к оптимуму.

Что это означает. Если $|w_{t-1}| < \eta/2$, то шаг $\pm\eta$ «перепрыгивает» через ноль и оказывается с противоположной стороны на расстоянии $\approx \eta/2$. На следующем шаге — обратно.

Получаем **предельный цикл**:

$$w_t \;\in\; \{-\eta/2,\; +\eta/2\}, \qquad t \to \infty.$$

Метод **не сходится** ни к точке, ни даже к нулю по среднему.

Сравнение с SGD. Для $L(w) = w^2$ обновление SGD:

$$w_t = w_{t-1} - \eta \cdot 2w_{t-1} = (1 - 2\eta) w_{t-1}.$$

Шаг **пропорционален** w, обнуляется в пределе $\Rightarrow$ сходимость.

Мораль. Адаптивная нормировка $\frac{m_t}{\sqrt{v_t}}$ убивает информацию о масштабе — даже на самой простой выпуклой задаче.

Adam не сходится: иллюстрация

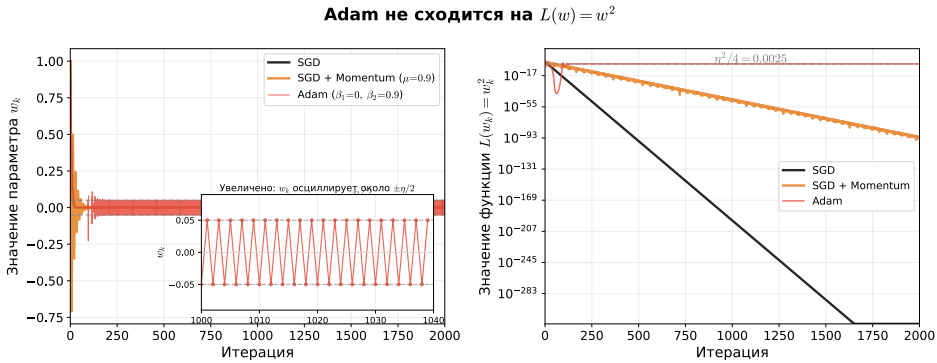
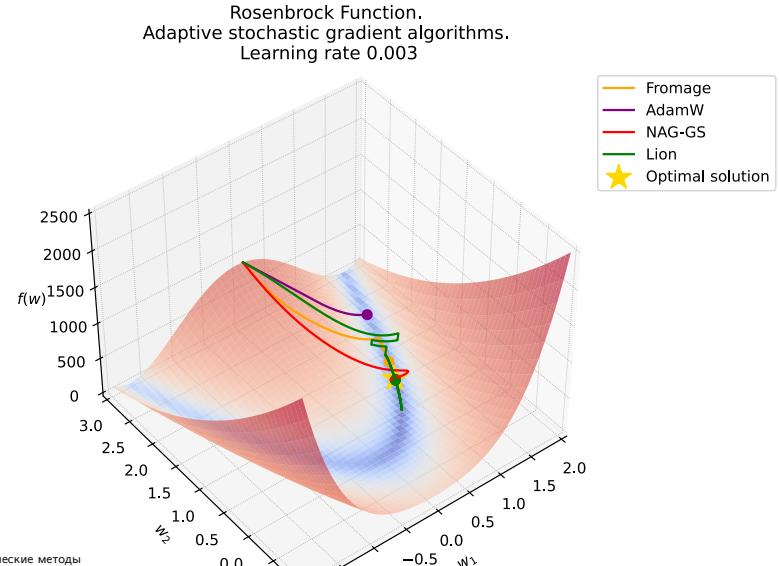


Figure 2: Adam (с разными η) на $L(w) = w^2$. Виден переход от линейного убывания к предельному циклу амплитуды $\sim \eta/2$.

Много оптимизаторов — как сравнивать?



AlgoPerf benchmark [14]

- **AlgoPerf** — стандартизированный бенчмарк для сравнения алгоритмов обучения нейросетей по двум регламентам:

AlgoPerf benchmark [14]

- **AlgoPerf** — стандартизированный бенчмарк для сравнения алгоритмов обучения нейросетей по двум регламентам:
  - **External Tuning** — подбор гиперпараметров с ограниченными ресурсами (5 попыток);

AlgoPerf benchmark [14]

- **AlgoPerf** — стандартизированный бенчмарк для сравнения алгоритмов обучения нейросетей по двум регламентам:
  - **External Tuning** — подбор гиперпараметров с ограниченными ресурсами (5 попыток);
  - **Self-Tuning** — автоматическая настройка на одной машине ($3\times$ бюджет).

AlgoPerf benchmark [14]

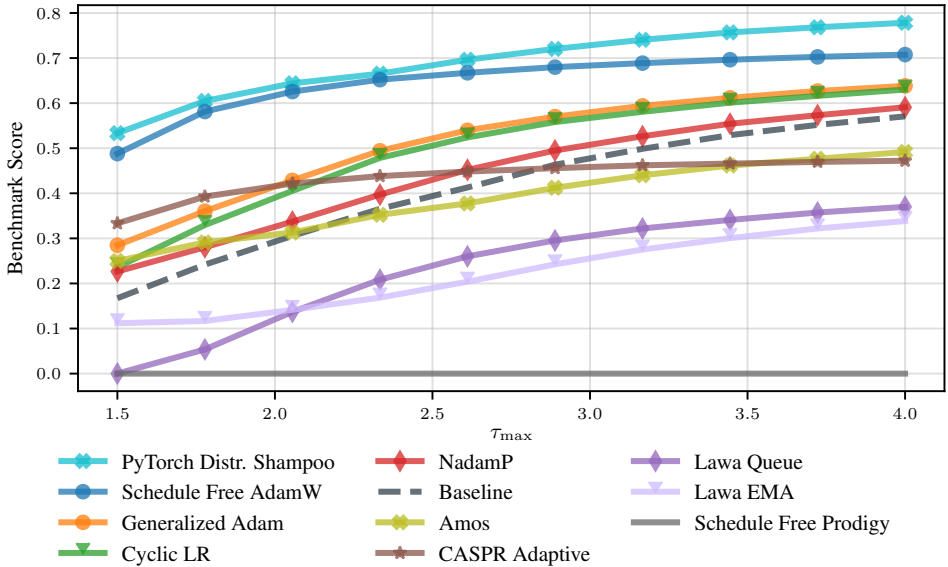
- **AlgoPerf** — стандартизированный бенчмарк для сравнения алгоритмов обучения нейросетей по двум регламентам:
  - **External Tuning** — подбор гиперпараметров с ограниченными ресурсами (5 попыток);
  - **Self-Tuning** — автоматическая настройка на одной машине ($3\times$ бюджет).
- **Оценка** агрегируется через профили производительности; финальный балл — нормализованная площадь под профилем (1.0 = быстрейший на всех задачах).

AlgoPerf benchmark [14]

- **AlgoPerf** — стандартизированный бенчмарк для сравнения алгоритмов обучения нейросетей по двум регламентам:
  - **External Tuning** — подбор гиперпараметров с ограниченными ресурсами (5 попыток);
  - **Self-Tuning** — автоматическая настройка на одной машине ($3\times$ бюджет).
- **Оценка** агрегируется через профили производительности; финальный балл — нормализованная площадь под профилем (1.0 = быстрейший на всех задачах).
- **Стоимость** оценки: $\sim 49\,240$ часов работы на 8 NVIDIA V100 GPU.

[14] Dahl et al. (2023). Benchmarking Neural Network Training Algorithms.

AlgoPerf benchmark: результаты



Итоги лекции

- **VR-методы** (SAG, SVRG, SAGA) достигают **линейной** сходимости при цене итерации $O(1)$ для выпуклой задачи минимизации конечной суммы:

Итоги лекции

- **VR-методы** (SAG, SVRG, SAGA) достигают **линейной** сходимости при цене итерации $O(1)$ для выпуклой задачи минимизации конечной суммы:
  - SAG — смещённый, минимальная дисперсия, $O(np)$ памяти;

Итоги лекции

- **VR-методы** (SAG, SVRG, SAGA) достигают **линейной** сходимости при цене итерации $O(1)$ для выпуклой задачи минимизации конечной суммы:
  - SAG — смещённый, минимальная дисперсия, $O(np)$ памяти;
  - SVRG — несмещённый, $O(p)$ памяти, двойное вычисление градиента и полный проход раз в эпоху;

Итоги лекции

- **VR-методы** (SAG, SVRG, SAGA) достигают **линейной** сходимости при цене итерации $O(1)$ для выпуклой задачи минимизации конечной суммы:
  - SAG — смещённый, минимальная дисперсия, $O(np)$ памяти;
  - SVRG — несмещённый, $O(p)$ памяти, двойное вычисление градиента и полный проход раз в эпоху;
  - SAGA — несмещённый, $O(np)$ памяти, простой анализ, расширяется на композитные задачи.

Итоги лекции

- **VR-методы** (SAG, SVRG, SAGA) достигают **линейной** сходимости при цене итерации $O(1)$ для выпуклой задачи минимизации конечной суммы:
  - SAG — смещённый, минимальная дисперсия, $O(np)$ памяти;
  - SVRG — несмещённый, $O(p)$ памяти, двойное вычисление градиента и полный проход раз в эпоху;
  - SAGA — несмещённый, $O(np)$ памяти, простой анализ, расширяется на композитные задачи.
- **Ускоренные VR-методы** (Katyusha, Catalyst) закрывают зазор между верхними и нижними оценками и оптимальны для выпуклой конечной суммы.

Итоги лекции

- **VR-методы** (SAG, SVRG, SAGA) достигают **линейной** сходимости при цене итерации $O(1)$ для выпуклой задачи минимизации конечной суммы:
  - SAG — смещённый, минимальная дисперсия, $O(np)$ памяти;
  - SVRG — несмещённый, $O(p)$ памяти, двойное вычисление градиента и полный проход раз в эпоху;
  - SAGA — несмещённый, $O(np)$ памяти, простой анализ, расширяется на композитные задачи.
- **Ускоренные VR-методы** (Katyusha, Catalyst) закрывают зазор между верхними и нижними оценками и оптимальны для выпуклой конечной суммы.
- На практике VR-методы плохо переносятся на современное глубокое обучение из-за нарушения предположений (аугментации, dropout, невыпуклость).

Итоги лекции

- **VR-методы** (SAG, SVRG, SAGA) достигают **линейной** сходимости при цене итерации $O(1)$ для выпуклой задачи минимизации конечной суммы:
  - SAG — смещённый, минимальная дисперсия, $O(np)$ памяти;
  - SVRG — несмещённый, $O(p)$ памяти, двойное вычисление градиента и полный проход раз в эпоху;
  - SAGA — несмещённый, $O(np)$ памяти, простой анализ, расширяется на композитные задачи.
- **Ускоренные VR-методы** (Katyusha, Catalyst) закрывают зазор между верхними и нижними оценками и оптимальны для выпуклой конечной суммы.
- На практике VR-методы плохо переносятся на современное глубокое обучение из-за нарушения предположений (аугментации, dropout, невыпуклость).
- **Адаптивные методы** (AdaGrad, RMSProp, Adadelta, Adam, AdamW) задают **свой** эффективный шаг каждой координате через статистики градиентов.

Итоги лекции

- **VR-методы** (SAG, SVRG, SAGA) достигают **линейной** сходимости при цене итерации $O(1)$ для выпуклой задачи минимизации конечной суммы:
  - SAG — смещённый, минимальная дисперсия, $O(np)$ памяти;
  - SVRG — несмещённый, $O(p)$ памяти, двойное вычисление градиента и полный проход раз в эпоху;
  - SAGA — несмещённый, $O(np)$ памяти, простой анализ, расширяется на композитные задачи.
- **Ускоренные VR-методы** (Katyusha, Catalyst) закрывают зазор между верхними и нижними оценками и оптимальны для выпуклой конечной суммы.
- На практике VR-методы плохо переносятся на современное глубокое обучение из-за нарушения предположений (аугментации, dropout, невыпуклость).
- **Адаптивные методы** (AdaGrad, RMSProp, Adadelta, Adam, AdamW) задают **свой** эффективный шаг каждой координате через статистики градиентов.
- Adam — де-факто стандарт для обучения LLM, но не сходится даже на простейших выпуклых примерах. AdamW — улучшение, корректно учитывающее регуляризацию.

Итоги лекции

- **VR-методы** (SAG, SVRG, SAGA) достигают **линейной** сходимости при цене итерации $O(1)$ для выпуклой задачи минимизации конечной суммы:
  - SAG — смещённый, минимальная дисперсия, $O(np)$ памяти;
  - SVRG — несмещённый, $O(p)$ памяти, двойное вычисление градиента и полный проход раз в эпоху;
  - SAGA — несмещённый, $O(np)$ памяти, простой анализ, расширяется на композитные задачи.
- **Ускоренные VR-методы** (Katyusha, Catalyst) закрывают зазор между верхними и нижними оценками и оптимальны для выпуклой конечной суммы.
- На практике VR-методы плохо переносятся на современное глубокое обучение из-за нарушения предположений (аугментации, dropout, невыпуклость).
- **Адаптивные методы** (AdaGrad, RMSProp, Adadelta, Adam, AdamW) задают **свой** эффективный шаг каждой координате через статистики градиентов.
- Adam — де-факто стандарт для обучения LLM, но не сходится даже на простейших выпуклых примерах. AdamW — улучшение, корректно учитывающее регуляризацию.

Итоги лекции

- **VR-методы** (SAG, SVRG, SAGA) достигают **линейной** сходимости при цене итерации $O(1)$ для выпуклой задачи минимизации конечной суммы:
  - SAG — смещённый, минимальная дисперсия, $O(np)$ памяти;
  - SVRG — несмещённый, $O(p)$ памяти, двойное вычисление градиента и полный проход раз в эпоху;
  - SAGA — несмещённый, $O(np)$ памяти, простой анализ, расширяется на композитные задачи.
- **Ускоренные VR-методы** (Katyusha, Catalyst) закрывают зазор между верхними и нижними оценками и оптимальны для выпуклой конечной суммы.
- На практике VR-методы плохо переносятся на современное глубокое обучение из-за нарушения предположений (аугментации, dropout, невыпуклость).
- **Адаптивные методы** (AdaGrad, RMSProp, Adadelta, Adam, AdamW) задают **свой** эффективный шаг каждой координате через статистики градиентов.
- Adam — де-факто стандарт для обучения LLM, но не сходится даже на простейших выпуклых примерах. AdamW — улучшение, корректно учитывающее регуляризацию.

Дальше: оптимизация для **матричных** параметров — спектральная норма, ортогонализация градиента, Muon и Neon.