

# Сюжеты из обучения нейронных сетей

МЕТОДЫ ВЫПУКЛОЙ ОПТИМИЗАЦИИ

НЕДЕЛЯ 14

Даня Меркулов

# **Оптимизация нейронных сетей: Sharpness-Aware Minimization, Mode Connectivity, Grokking, Double Descent.**

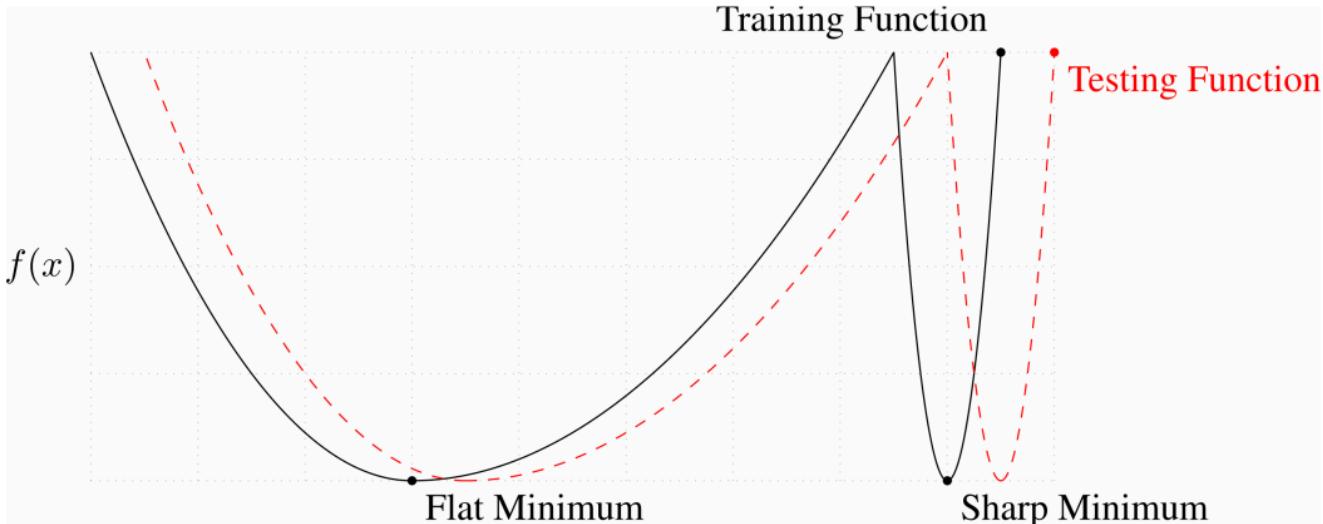
## **Семинар**

Оптимизация для всех! ЦУ

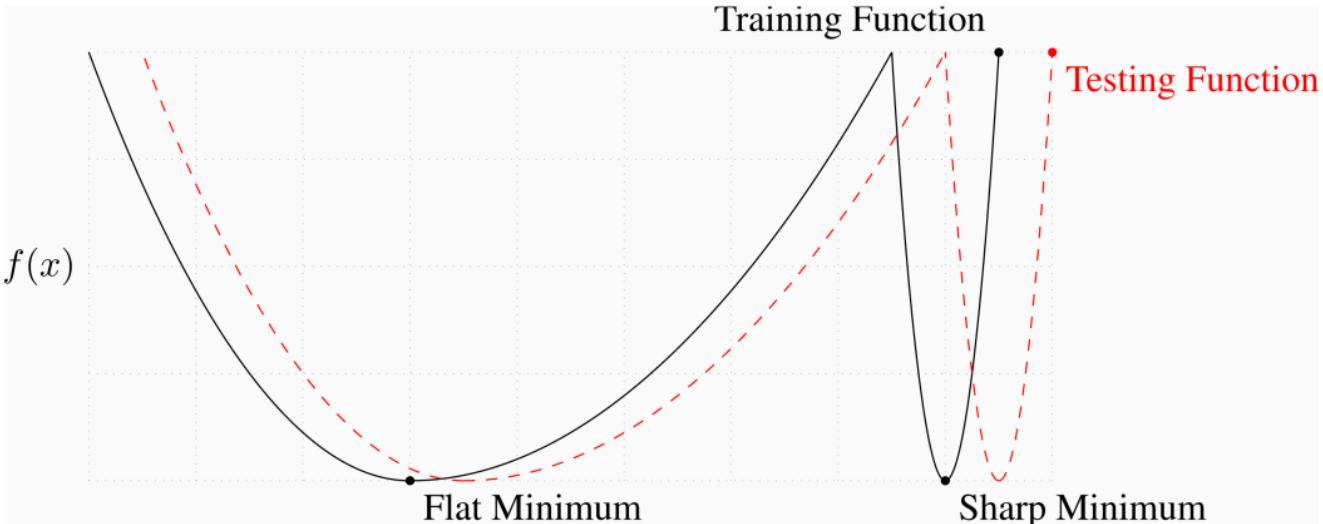


# SAM

# Плоский минимум vs Острый минимум



# Плоский минимум vs Острый минимум



Question

Что не так с острым минимумом?

# Sharpness-Aware Minimization<sup>1</sup>

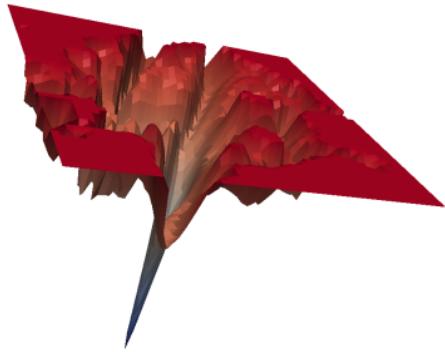


Рисунок 1. Острый минимум, к которому сошлась ResNet, обученная с помощью SGD.

---

<sup>1</sup>Foret, Pierre, et al. "Sharpness-aware minimization for efficiently improving generalization." (2020)

# Sharpness-Aware Minimization<sup>1</sup>

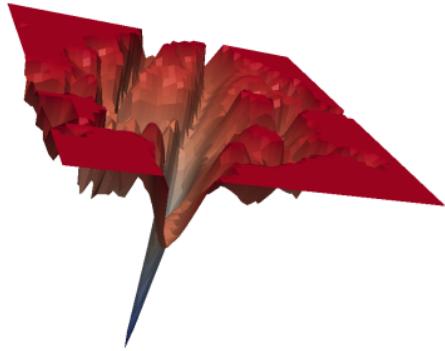


Рисунок 1. Острый минимум, к которому сошлась ResNet, обученная с помощью SGD.

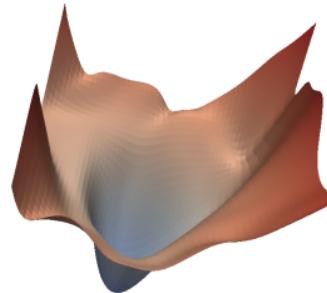


Рисунок 2. Широкий минимум, к которому сошлась та же ResNet, обученная с помощью SAM.

---

<sup>1</sup>Foret, Pierre, et al. "Sharpness-aware minimization for efficiently improving generalization." (2020)

# Sharpness-Aware Minimization<sup>1</sup>

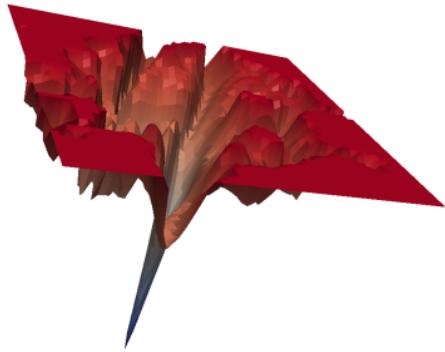


Рисунок 1. Острый минимум, к которому сошлась ResNet, обученная с помощью SGD.

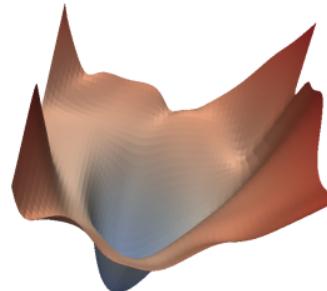


Рисунок 2. Широкий минимум, к которому сошлась та же ResNet, обученная с помощью SAM.

Sharpness-Aware Minimization (SAM) — это процедура, целью которой является улучшение обобщающей способности модели путем одновременной минимизации значения функции потерь и **остроты (sharpness) функции потерь**.

<sup>1</sup>Foret, Pierre, et al. "Sharpness-aware minimization for efficiently improving generalization." (2020)

# Постановка задачи обучения

Обучающая выборка, полученная *i.i.d.* из распределения  $D$ :

$$S = \{(x_i, y_i)\}_{i=1}^n,$$

где  $x_i$  — вектор признаков, а  $y_i$  — метка.

# Постановка задачи обучения

Обучающая выборка, полученная *i.i.d.* из распределения  $D$ :

$$S = \{(x_i, y_i)\}_{i=1}^n,$$

где  $x_i$  — вектор признаков, а  $y_i$  — метка.

Функция потерь на обучающей выборке:

$$L_S = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n l(w, x_i, y_i),$$

где  $l$  — функция потерь для одного объекта,  $w$  — параметры.

# Постановка задачи обучения

Обучающая выборка, полученная *i.i.d.* из распределения  $D$ :

$$S = \{(x_i, y_i)\}_{i=1}^n,$$

где  $x_i$  — вектор признаков, а  $y_i$  — метка.

Функция потерь на обучающей выборке:

$$L_S = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n l(w, x_i, y_i),$$

где  $l$  — функция потерь для одного объекта,  $w$  — параметры.

Функция потерь на генеральной совокупности (population loss):

$$L_D = \mathbb{E}_{(x,y)}[l(w, x, y)]$$

# Что такое sharpness (острота)?

## Theorem

Для любого  $\rho > 0$ , с высокой вероятностью по обучающей выборке  $S$ , сгенерированной из распределения  $D$ ,

$$L_D(w) \leq \max_{\|\epsilon\|_2 \leq \rho} L_S(w + \epsilon) + h(\|w\|_2^2 / \rho^2),$$

где  $h : \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}_+$  — строго возрастающая функция (при некоторых технических условиях на  $L_D(w)$ ).

# Что такое sharpness (острота)?

## Theorem

Для любого  $\rho > 0$ , с высокой вероятностью по обучающей выборке  $S$ , сгенерированной из распределения  $D$ ,

$$L_D(w) \leq \max_{\|\epsilon\|_2 \leq \rho} L_S(w + \epsilon) + h(\|w\|_2^2 / \rho^2),$$

где  $h : \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}_+$  — строго возрастающая функция (при некоторых технических условиях на  $L_D(w)$ ).

Добавляя и вычитая  $L_S(w)$ :

$$\left[ \max_{\|\epsilon\|_2 \leq \rho} L_S(w + \epsilon) - L_S(w) \right] + L_S(w) + h(\|w\|_2^2 / \rho^2)$$

Слагаемое в квадратных скобках отражает **остроту (sharpness)**  $L_S$  в точке  $w$ , измеряя, как быстро может возрасти ошибка обучения при переходе от  $w$  к близкому значению параметров.

# Sharpness-Aware Minimization

Функция  $h$  заменяется на более простую константу  $\lambda$ . Авторы предлагают выбирать значения параметров, решая следующую задачу Sharpness-Aware Minimization (SAM):

$$\min_w L_S^{SAM}(w) + \lambda \|w\|_2^2 \quad \text{где} \quad L_S^{SAM}(w) \triangleq \max_{\|\epsilon\|_p \leq \rho} L_S(w + \epsilon),$$

с гиперпараметром  $\rho \geq 0$  и  $p$  из  $[1, \infty]$  (небольшое обобщение, хотя  $p = 2$  эмпирически является лучшим выбором).

# Как минимизировать $L_S^{SAM}$ ?

Для минимизации  $L_S^{SAM}$  используется эффективная аппроксимация его градиента. Первым шагом рассматривается разложение Тейлора первого порядка для  $L_S(w + \epsilon)$ :

$$\epsilon^*(w) \triangleq \arg \max_{\|\epsilon\|_p \leq \rho} \{L_S(w + \epsilon)\} \approx \arg \max_{\|\epsilon\|_p \leq \rho} \{L_S(w) + \epsilon^T \nabla_w L_S(w)\} = \arg \max_{\|\epsilon\|_p \leq \rho} \{\epsilon^T \nabla_w L_S(w)\}.$$

# Как минимизировать $L_S^{SAM}$ ?

Для минимизации  $L_S^{SAM}$  используется эффективная аппроксимация его градиента. Первым шагом рассматривается разложение Тейлора первого порядка для  $L_S(w + \epsilon)$ :

$$\epsilon^*(w) \triangleq \underset{\|\epsilon\|_p \leq \rho}{\arg \max} \{L_S(w + \epsilon)\} \approx \underset{\|\epsilon\|_p \leq \rho}{\arg \max} \{L_S(w) + \epsilon^T \nabla_w L_S(w)\} = \underset{\|\epsilon\|_p \leq \rho}{\arg \max} \{\epsilon^T \nabla_w L_S(w)\}.$$

Последнее выражение — это просто argmax скалярного произведения векторов  $\epsilon$  и  $\nabla_w L_S(w)$ , и хорошо известно, какой аргумент его максимизирует:

$$\hat{\epsilon}(w) = \rho \operatorname{sign}(\nabla_w L_S(w)) |\nabla_w L_S(w)|^{q-1} / \left( \|\nabla_w L_S(w)\|_q^q \right)^{1/p},$$

где  $1/p + 1/q = 1$ .

# Как минимизировать $L_S^{SAM}$ ?

Для минимизации  $L_S^{SAM}$  используется эффективная аппроксимация его градиента. Первым шагом рассматривается разложение Тейлора первого порядка для  $L_S(w + \epsilon)$ :

$$\epsilon^*(w) \triangleq \underset{\|\epsilon\|_p \leq \rho}{\arg \max} \{L_S(w + \epsilon)\} \approx \underset{\|\epsilon\|_p \leq \rho}{\arg \max} \{L_S(w) + \epsilon^T \nabla_w L_S(w)\} = \underset{\|\epsilon\|_p \leq \rho}{\arg \max} \{\epsilon^T \nabla_w L_S(w)\}.$$

Последнее выражение — это просто argmax скалярного произведения векторов  $\epsilon$  и  $\nabla_w L_S(w)$ , и хорошо известно, какой аргумент его максимизирует:

$$\hat{\epsilon}(w) = \rho \operatorname{sign}(\nabla_w L_S(w)) |\nabla_w L_S(w)|^{q-1} / \left( \|\nabla_w L_S(w)\|_q^q \right)^{1/p},$$

где  $1/p + 1/q = 1$ .

Таким образом

$$\begin{aligned} \nabla_w L_S^{SAM}(w) &\approx \nabla_w L_S(w + \hat{\epsilon}(w)) = \frac{d(w + \hat{\epsilon}(w))}{dw} \nabla_w L_S(w) \Big|_{w+\hat{\epsilon}(w)} \\ &= \nabla_w L_S(w) \Big|_{w+\hat{\epsilon}(w)} + \frac{d\hat{\epsilon}(w)}{dw} \nabla_w L_S(w) \Big|_{w+\hat{\epsilon}(w)} \end{aligned}$$

# Sharpness-Aware Minimization

Современные фреймворки могут легко вычислить предыдущее приближение. Однако для ускорения вычислений члены второго порядка можно отбросить, получая:

$$\nabla_w L_S^{SAM}(w) \approx \nabla_w L_S(w) \Big|_{w + \hat{\epsilon}(w)}$$

# Sharpness-Aware Minimization

Современные фреймворки могут легко вычислить предыдущее приближение. Однако для ускорения вычислений члены второго порядка можно отбросить, получая:

$$\nabla_w L_S^{SAM}(w) \approx \nabla_w L_S(w)|_{w+\hat{\epsilon}(w)}$$

**Input:** Training set  $\mathcal{S} \triangleq \cup_{i=1}^n \{(\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i)\}$ , Loss function  
 $l : \mathcal{W} \times \mathcal{X} \times \mathcal{Y} \rightarrow \mathbb{R}_+$ , Batch size  $b$ , Step size  $\eta > 0$ ,  
Neighborhood size  $\rho > 0$ .

**Output:** Model trained with SAM

Initialize weights  $\mathbf{w}_0$ ,  $t = 0$ ;

**while** *not converged* **do**

    Sample batch  $\mathcal{B} = \{(\mathbf{x}_1, \mathbf{y}_1), \dots, (\mathbf{x}_b, \mathbf{y}_b)\}$ ;

    Compute gradient  $\nabla_w L_{\mathcal{B}}(\mathbf{w})$  of the batch's training loss;

    Compute  $\hat{\epsilon}(\mathbf{w})$  per equation 2;

    Compute gradient approximation for the SAM objective

        (equation 3):  $\mathbf{g} = \nabla_w L_{\mathcal{B}}(\mathbf{w})|_{w+\hat{\epsilon}(\mathbf{w})}$ ;

    Update weights:  $\mathbf{w}_{t+1} = \mathbf{w}_t - \eta \mathbf{g}$ ;

$t = t + 1$ ;

**end**

**return**  $\mathbf{w}_t$

**Algorithm 1:** SAM algorithm

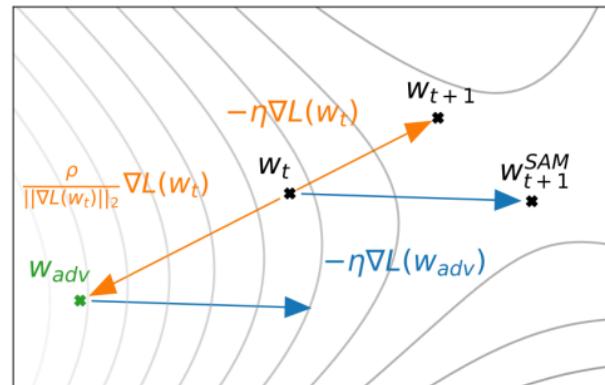


Figure 2: Schematic of the SAM parameter update.

# Результаты SAM

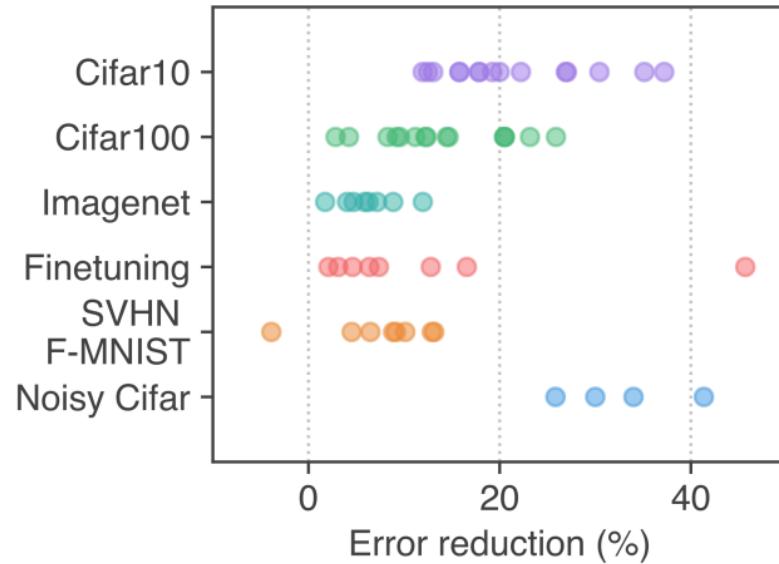


Рисунок 4. Снижение частоты ошибок, полученное при переходе на SAM. Каждая точка соответствует отдельному набору данных / модели / аугментации данных.



# **Связность мод (Mode Connectivity)**

# Связность мод (Mode Connectivity)<sup>2</sup>

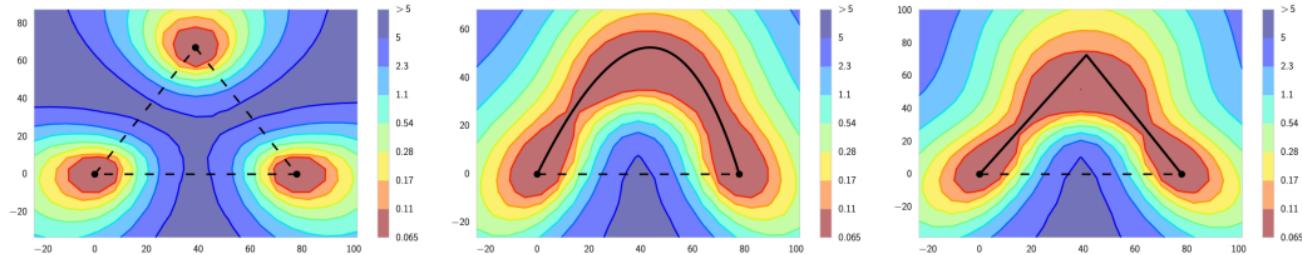


Рисунок 5. Поверхность функции потерь (кросс-энтропия с  $l_2$ -регуляризацией) для ResNet-164 на CIFAR-100 как функция весов сети в двумерном подпространстве. На каждом графике горизонтальная ось фиксирована и проходит через оптимумы двух независимо обученных сетей. Вертикальная ось меняется между графиками при смене плоскостей (определенных в основном тексте). Слева: Три оптимума для независимо обученных сетей. В центре и справа: Квадратичная кривая Безье и ломаная с одним изгибом, соединяющие два нижних оптимума с левого графика вдоль пути с почти постоянной функцией потерь. Заметьте, что на каждом графике прямой линейный путь между модами привел бы к высоким потерям.

<sup>2</sup>Garipov, T., Izmailov, P., Podoprikhin, D., Vetrov, D. P., Wilson, A. G. (2018). Loss surfaces, mode connectivity, and fast ensembling of dnns. Advances in neural information processing systems, 31.

# Процедура поиска кривой

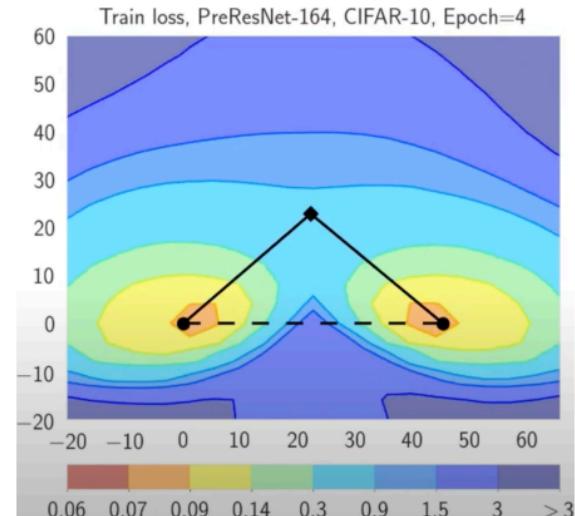
- Веса предобученных сетей:

$$\widehat{w}_1, \widehat{w}_2 \in \mathbb{R}^{|\text{net}|}$$

$$\phi_\theta(0) = \widehat{w}_1, \quad \phi_\theta(1) = \widehat{w}_2$$

$$\mathcal{L}(w)$$

$$\underset{\theta}{\text{minimize}} \quad \ell(\theta) = \int_0^1 \mathcal{L}(\phi_\theta(t)) dt = \mathbb{E}_{t \sim U(0,1)} \mathcal{L}(\phi_\theta(t))$$



# Процедура поиска кривой

- Веса предобученных сетей:

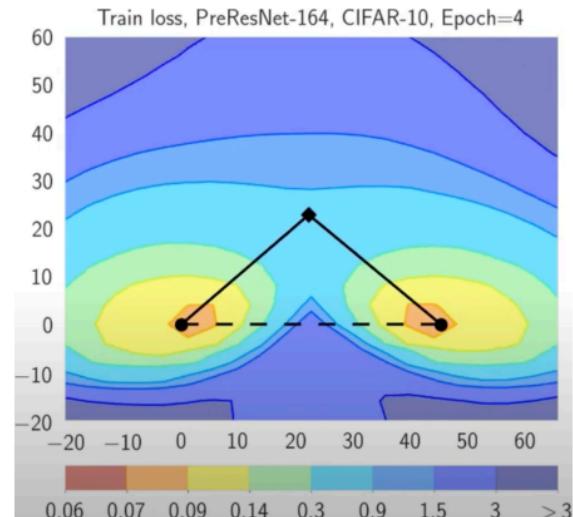
$$\widehat{w}_1, \widehat{w}_2 \in \mathbb{R}^{|\text{net}|}$$

- Определим параметрическую кривую:  $\phi_\theta(\cdot) : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}^{|\text{net}|}$

$$\phi_\theta(0) = \widehat{w}_1, \quad \phi_\theta(1) = \widehat{w}_2$$

$$\mathcal{L}(w)$$

$$\underset{\theta}{\text{minimize}} \quad \ell(\theta) = \int_0^1 \mathcal{L}(\phi_\theta(t)) dt = \mathbb{E}_{t \sim U(0,1)} \mathcal{L}(\phi_\theta(t))$$



# Процедура поиска кривой

- Веса предобученных сетей:

$$\widehat{w}_1, \widehat{w}_2 \in \mathbb{R}^{|\text{net}|}$$

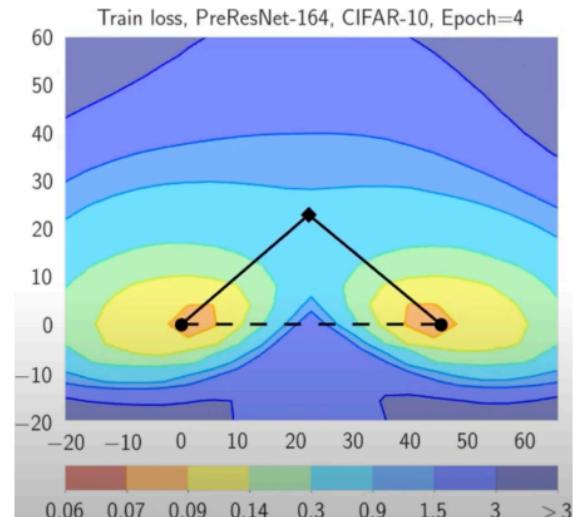
- Определим параметрическую кривую:  $\phi_\theta(\cdot) : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}^{|\text{net}|}$

$$\phi_\theta(0) = \widehat{w}_1, \quad \phi_\theta(1) = \widehat{w}_2$$

- Функция потерь DNN:

$$\mathcal{L}(w)$$

$$\underset{\theta}{\text{minimize}} \quad \ell(\theta) = \int_0^1 \mathcal{L}(\phi_\theta(t)) dt = \mathbb{E}_{t \sim U(0,1)} \mathcal{L}(\phi_\theta(t))$$



# Процедура поиска кривой

- Веса предобученных сетей:

$$\widehat{w}_1, \widehat{w}_2 \in \mathbb{R}^{|\text{net}|}$$

- Определим параметрическую кривую:  $\phi_\theta(\cdot) : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}^{|\text{net}|}$

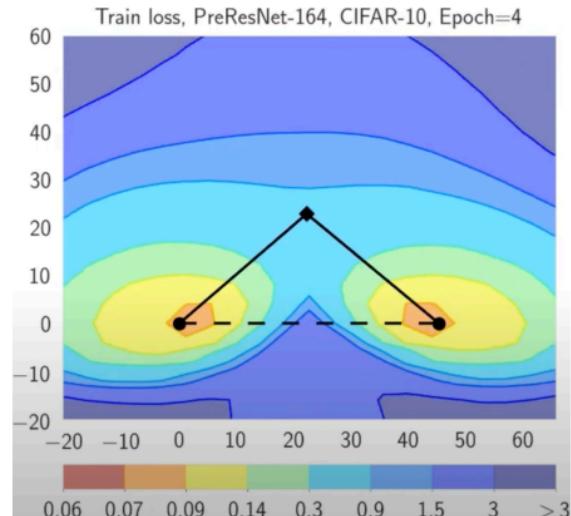
$$\phi_\theta(0) = \widehat{w}_1, \quad \phi_\theta(1) = \widehat{w}_2$$

- Функция потерь DNN:

$$\mathcal{L}(w)$$

- Минимизируем усредненную функцию потерь по  $\theta$ :

$$\underset{\theta}{\text{minimize}} \quad \ell(\theta) = \int_0^1 \mathcal{L}(\phi_\theta(t)) dt = \mathbb{E}_{t \sim U(0,1)} \mathcal{L}(\phi_\theta(t))$$



# Процедура поиска кривой

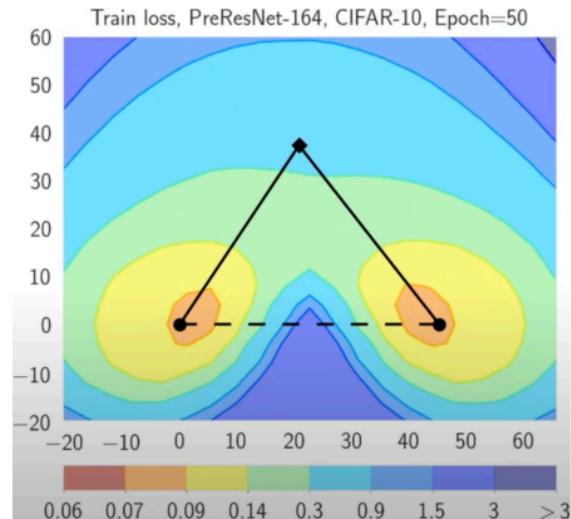
- Веса предобученных сетей:

$$\widehat{w}_1, \widehat{w}_2 \in \mathbb{R}^{|net|}$$

$$\phi_\theta(0) = \widehat{w}_1, \quad \phi_\theta(1) = \widehat{w}_2$$

$$\mathcal{L}(w)$$

$$\underset{\theta}{\text{minimize}} \quad \ell(\theta) = \int_0^1 \mathcal{L}(\phi_\theta(t)) dt = \mathbb{E}_{t \sim U(0,1)} \mathcal{L}(\phi_\theta(t))$$



# Процедура поиска кривой

- Веса предобученных сетей:

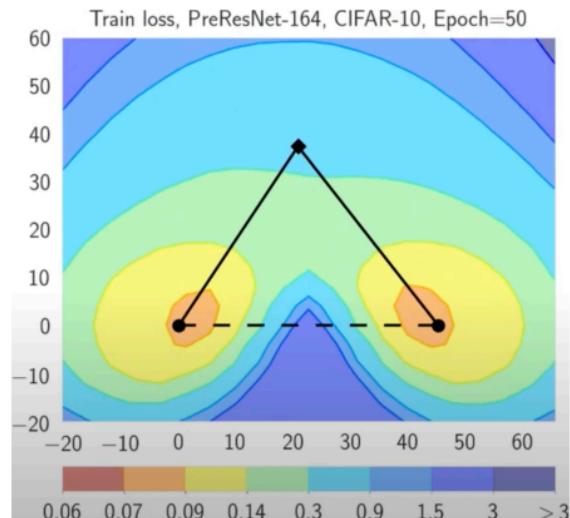
$$\widehat{w}_1, \widehat{w}_2 \in \mathbb{R}^{|\text{net}|}$$

- Определим параметрическую кривую:  $\phi_\theta(\cdot) : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}^{|\text{net}|}$

$$\phi_\theta(0) = \widehat{w}_1, \quad \phi_\theta(1) = \widehat{w}_2$$

$$\mathcal{L}(w)$$

$$\underset{\theta}{\text{minimize}} \quad \ell(\theta) = \int_0^1 \mathcal{L}(\phi_\theta(t)) dt = \mathbb{E}_{t \sim U(0,1)} \mathcal{L}(\phi_\theta(t))$$



# Процедура поиска кривой

- Веса предобученных сетей:

$$\widehat{w}_1, \widehat{w}_2 \in \mathbb{R}^{|\text{net}|}$$

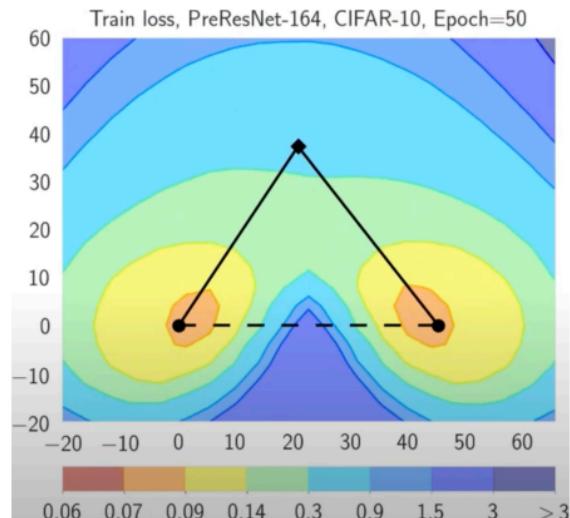
- Определим параметрическую кривую:  $\phi_\theta(\cdot) : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}^{|\text{net}|}$

$$\phi_\theta(0) = \widehat{w}_1, \quad \phi_\theta(1) = \widehat{w}_2$$

- Функция потерь DNN:

$$\mathcal{L}(w)$$

$$\underset{\theta}{\text{minimize}} \quad \ell(\theta) = \int_0^1 \mathcal{L}(\phi_\theta(t)) dt = \mathbb{E}_{t \sim U(0,1)} \mathcal{L}(\phi_\theta(t))$$



# Процедура поиска кривой

- Веса предобученных сетей:

$$\widehat{w}_1, \widehat{w}_2 \in \mathbb{R}^{|\text{net}|}$$

- Определим параметрическую кривую:  $\phi_\theta(\cdot) : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}^{|\text{net}|}$

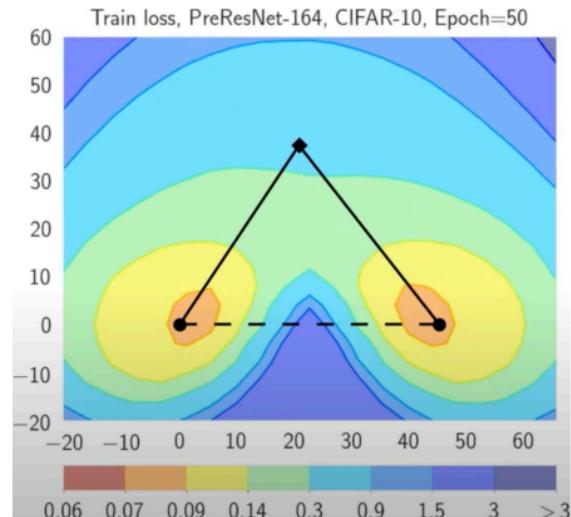
$$\phi_\theta(0) = \widehat{w}_1, \quad \phi_\theta(1) = \widehat{w}_2$$

- Функция потерь DNN:

$$\mathcal{L}(w)$$

- Минимизируем усредненную функцию потерь по  $\theta$ :

$$\underset{\theta}{\text{minimize}} \quad \ell(\theta) = \int_0^1 \mathcal{L}(\phi_\theta(t)) dt = \mathbb{E}_{t \sim U(0,1)} \mathcal{L}(\phi_\theta(t))$$



# Процедура поиска кривой

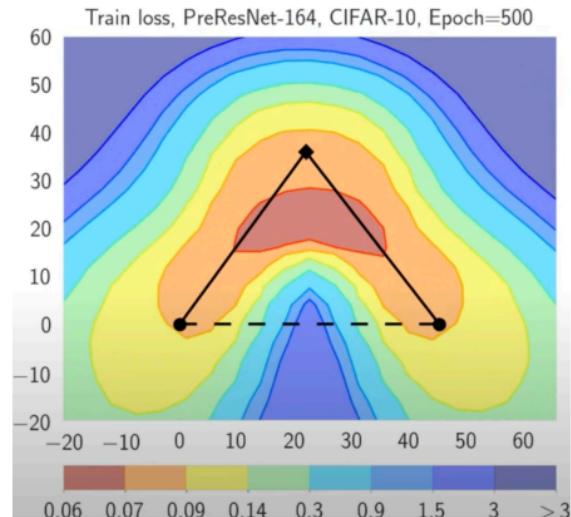
- Веса предобученных сетей:

$$\widehat{w}_1, \widehat{w}_2 \in \mathbb{R}^{|net|}$$

$$\phi_\theta(0) = \widehat{w}_1, \quad \phi_\theta(1) = \widehat{w}_2$$

$$\mathcal{L}(w)$$

$$\underset{\theta}{\text{minimize}} \quad \ell(\theta) = \int_0^1 \mathcal{L}(\phi_\theta(t)) dt = \mathbb{E}_{t \sim U(0,1)} \mathcal{L}(\phi_\theta(t))$$



# Процедура поиска кривой

- Веса предобученных сетей:

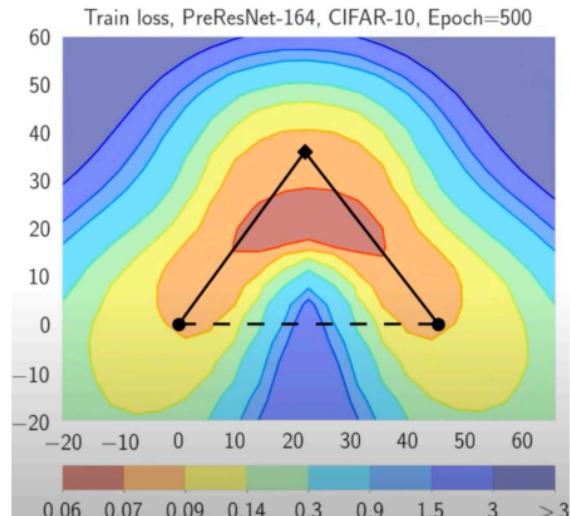
$$\widehat{w}_1, \widehat{w}_2 \in \mathbb{R}^{|\text{net}|}$$

- Определим параметрическую кривую:  $\phi_\theta(\cdot) : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}^{|\text{net}|}$

$$\phi_\theta(0) = \widehat{w}_1, \quad \phi_\theta(1) = \widehat{w}_2$$

$$\mathcal{L}(w)$$

$$\underset{\theta}{\text{minimize}} \quad \ell(\theta) = \int_0^1 \mathcal{L}(\phi_\theta(t)) dt = \mathbb{E}_{t \sim U(0,1)} \mathcal{L}(\phi_\theta(t))$$



# Процедура поиска кривой

- Веса предобученных сетей:

$$\widehat{w}_1, \widehat{w}_2 \in \mathbb{R}^{|\text{net}|}$$

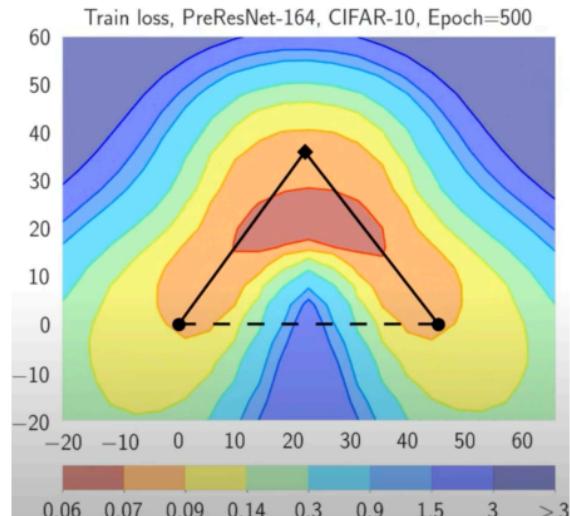
- Определим параметрическую кривую:  $\phi_\theta(\cdot) : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}^{|\text{net}|}$

$$\phi_\theta(0) = \widehat{w}_1, \quad \phi_\theta(1) = \widehat{w}_2$$

- Функция потерь DNN:

$$\mathcal{L}(w)$$

$$\underset{\theta}{\text{minimize}} \quad \ell(\theta) = \int_0^1 \mathcal{L}(\phi_\theta(t)) dt = \mathbb{E}_{t \sim U(0,1)} \mathcal{L}(\phi_\theta(t))$$



# Процедура поиска кривой

- Веса предобученных сетей:

$$\widehat{w}_1, \widehat{w}_2 \in \mathbb{R}^{|\text{net}|}$$

- Определим параметрическую кривую:  $\phi_\theta(\cdot) : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}^{|\text{net}|}$

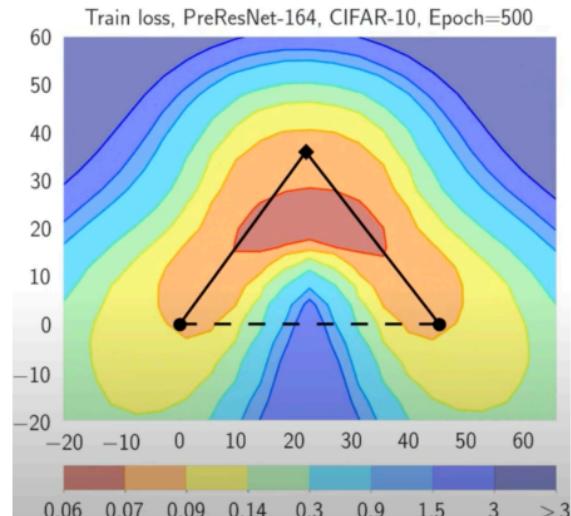
$$\phi_\theta(0) = \widehat{w}_1, \quad \phi_\theta(1) = \widehat{w}_2$$

- Функция потерь DNN:

$$\mathcal{L}(w)$$

- Минимизируем усредненную функцию потерь по  $\theta$ :

$$\underset{\theta}{\text{minimize}} \quad \ell(\theta) = \int_0^1 \mathcal{L}(\phi_\theta(t)) dt = \mathbb{E}_{t \sim U(0,1)} \mathcal{L}(\phi_\theta(t))$$





# Гроккинг (Grokking)

# Гроккинг (Grokking)<sup>3</sup>

- После достижения нулевой ошибки на обучении веса продолжают изменяться в манере, напоминающей случайное блуждание

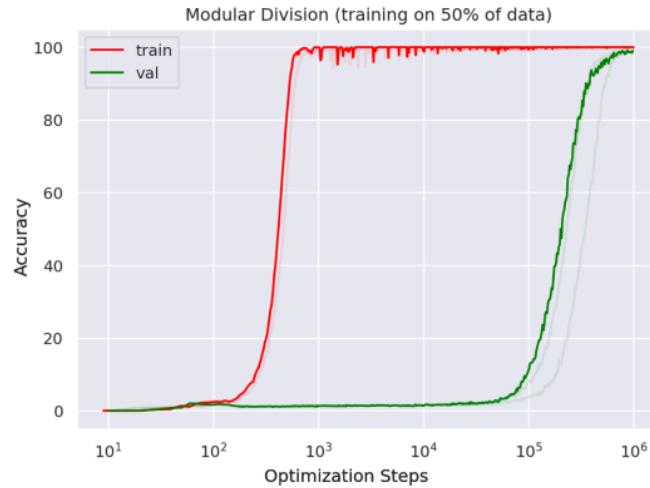


Рисунок 6. Гроккинг: Яркий пример обобщения, наступающего намного позже переобучения на алгоритмическом наборе данных.

# Гроккинг (Grokking)<sup>3</sup>

- После достижения нулевой ошибки на обучении веса продолжают изменяться в манере, напоминающей случайное блуждание
- Возможно, они медленно дрейфуют к более широкому минимуму

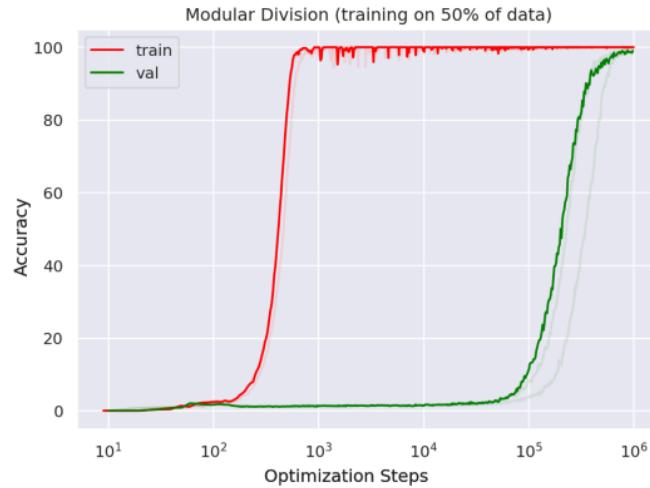


Рисунок 6. Гроккинг: Яркий пример обобщения, наступающего намного позже переобучения на алгоритмическом наборе данных.

# Гроккинг (Grokking)<sup>3</sup>

- После достижения нулевой ошибки на обучении веса продолжают изменяться в манере, напоминающей случайное блуждание
- Возможно, они медленно дрейфуют к более широкому минимуму
- Недавно открытый эффект гроккинга подтверждает эту гипотезу

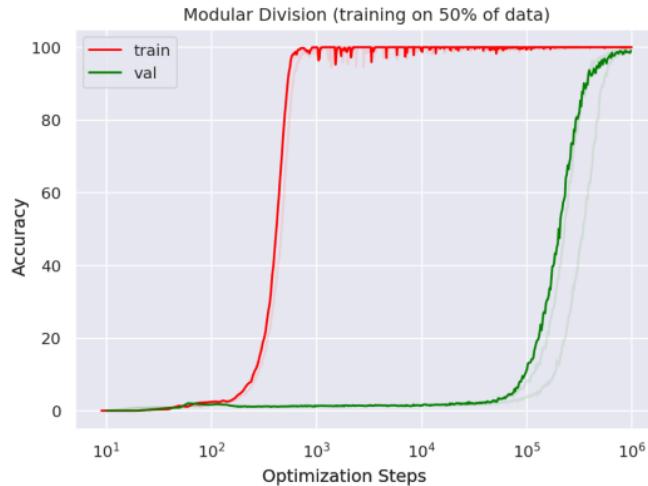
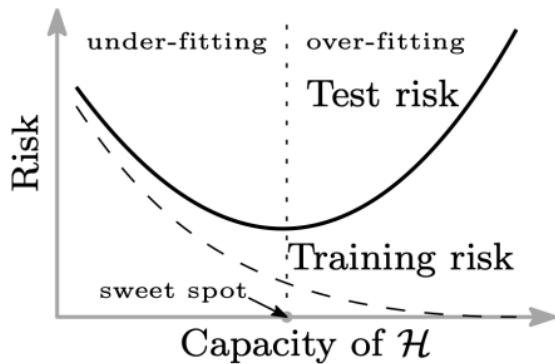


Рисунок 6. Гроккинг: Яркий пример обобщения, наступающего намного позже переобучения на алгоритмическом наборе данных.

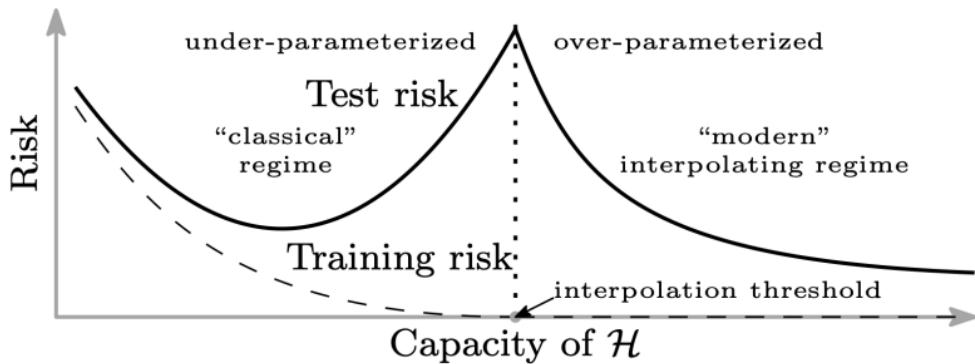
<sup>3</sup>Power, Alethea, et al. "Grokking: Generalization beyond overfitting on small algorithmic datasets." (2022).

# **Двойной спуск (Double Descent)**

# Двойной спуск (Double Descent)<sup>4</sup>



(a)



(b)

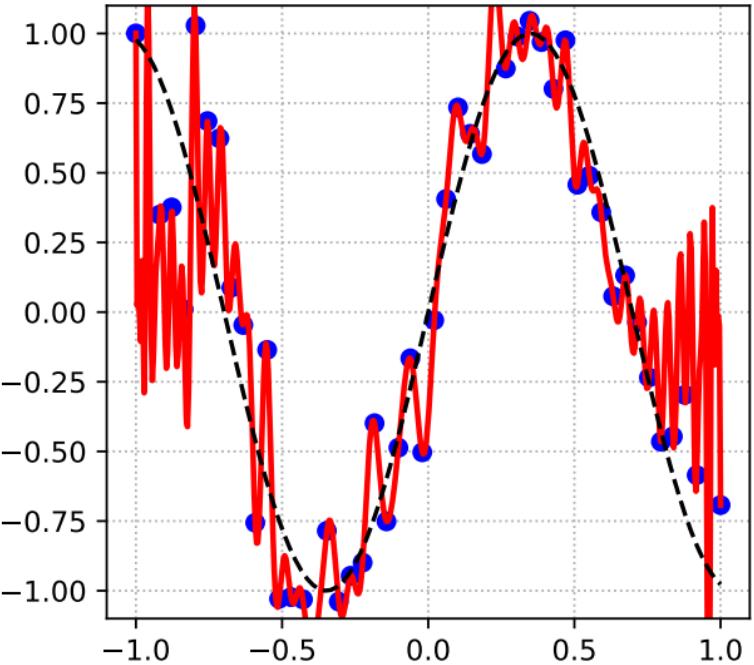
Рисунок 7. Кривые риска обучения (пунктирная линия) и тестового риска (сплошная линия). (а) Классическая U-образная кривая риска, возникающая из компромисса смещения и дисперсии (bias-variance trade-off). (б) Кривая риска двойного спуска, которая объединяет U-образную кривую риска (т.е. «классический» режим) с наблюдаемым поведением на моделях высокой размерности (т.е. «современный» интерполяционный режим), разделенных порогом интерполяции. Предикторы справа от порога интерполяции имеют нулевой риск обучения.

<sup>4</sup>Belkin, Mikhail, et al. "Reconciling modern machine-learning practice and the classical bias–variance trade-off." (2019)

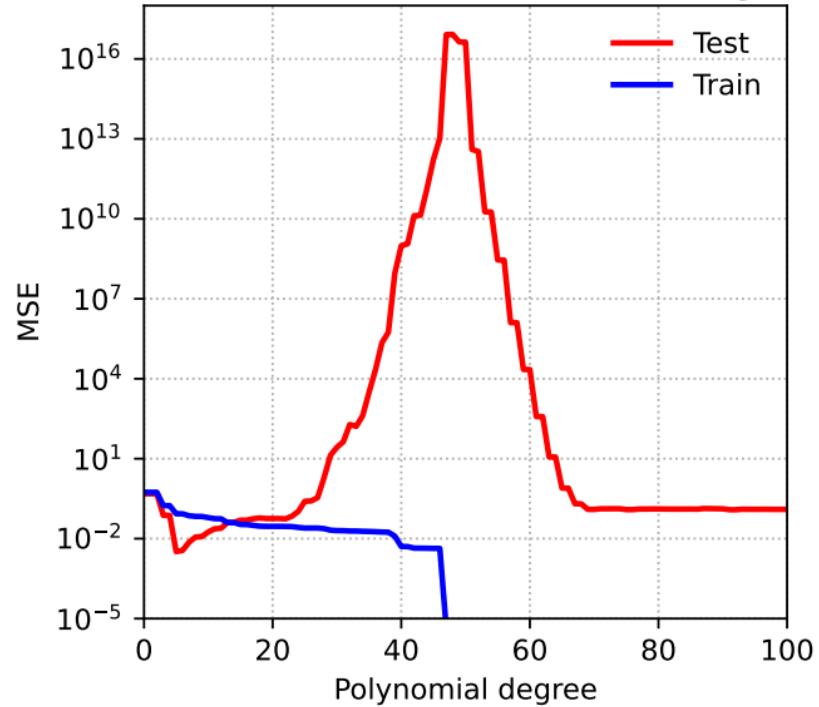
# Двойной спуск (Double Descent)



Polynomial Fitting



@fminxyz





# **Shampoo и Muon**

# Shampoo<sup>5</sup>



Расшифровывается как **Stochastic Hessian-Approximation Matrix Preconditioning for Optimization Of** deep networks. Это метод, вдохновленный оптимизацией второго порядка, разработанный для глубокого обучения больших моделей.

**Основная идея:** Аппроксимирует полноматричный предобуславливатель AdaGrad, используя эффективные матричные структуры, в частности произведения Кронекера.

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

Упрощенная концепция:

1. Вычислить градиент  $G_k$ .

---

<sup>5</sup>Gupta, V., Koren, T. and Singer, Y., 2018, July. Shampoo: Preconditioned stochastic tensor optimization. In International Conference on Machine Learning (pp. 1842-1850). PMLR.

# Shampoo<sup>5</sup>



Расшифровывается как **Stochastic Hessian-Approximation Matrix Preconditioning for Optimization Of** deep networks. Это метод, вдохновленный оптимизацией второго порядка, разработанный для глубокого обучения больших моделей.

**Основная идея:** Аппроксимирует полноматричный предобуславливатель AdaGrad, используя эффективные матричные структуры, в частности произведения Кронекера.

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

Упрощенная концепция:

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

---

<sup>5</sup>Gupta, V., Koren, T. and Singer, Y., 2018, July. Shampoo: Preconditioned stochastic tensor optimization. In International Conference on Machine Learning (pp. 1842-1850). PMLR.

# Shampoo<sup>5</sup>



Расшифровывается как **Stochastic Hessian-Approximation Matrix Preconditioning for Optimization Of** deep networks. Это метод, вдохновленный оптимизацией второго порядка, разработанный для глубокого обучения больших моделей.

**Основная идея:** Аппроксимирует полноматричный предобуславливатель AdaGrad, используя эффективные матричные структуры, в частности произведения Кронекера.

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

Упрощенная концепция:

1. Вычислить градиент  $G_k$ .
2. Обновить статистики  $L_k = \beta L_{k-1} + (1 - \beta) G_k G_k^T$  и  $R_k = \beta R_{k-1} + (1 - \beta) G_k^T G_k$ .
3. Вычислить предобуславливатели  $P_L = L_k^{-1/4}$  и  $P_R = R_k^{-1/4}$ . (Обратный матричный корень)

---

<sup>5</sup>Gupta, V., Koren, T. and Singer, Y., 2018, July. Shampoo: Preconditioned stochastic tensor optimization. In International Conference on Machine Learning (pp. 1842-1850). PMLR.

# Shampoo<sup>5</sup>



Расшифровывается как **Stochastic Hessian-Approximation Matrix Preconditioning for Optimization Of** deep networks. Это метод, вдохновленный оптимизацией второго порядка, разработанный для глубокого обучения больших моделей.

**Основная идея:** Аппроксимирует полноматричный предобуславливатель AdaGrad, используя эффективные матричные структуры, в частности произведения Кронекера.

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

Упрощенная концепция:

1. Вычислить градиент  $G_k$ .
2. Обновить статистики  $L_k = \beta L_{k-1} + (1 - \beta) G_k G_k^T$  и  $R_k = \beta R_{k-1} + (1 - \beta) G_k^T G_k$ .
3. Вычислить предобуславливатели  $P_L = L_k^{-1/4}$  и  $P_R = R_k^{-1/4}$ . (Обратный матричный корень)
4. Обновить:  $W_{k+1} = W_k - \alpha P_L G_k P_R$ .

---

<sup>5</sup>Gupta, V., Koren, T. and Singer, Y., 2018, July. Shampoo: Preconditioned stochastic tensor optimization. In International Conference on Machine Learning (pp. 1842-1850). PMLR.

# Shampoo<sup>5</sup>



Расшифровывается как **Stochastic Hessian-Approximation Matrix Preconditioning for Optimization Of** deep networks. Это метод, вдохновленный оптимизацией второго порядка, разработанный для глубокого обучения больших моделей.

**Основная идея:** Аппроксимирует полноматричный предобуславливатель AdaGrad, используя эффективные матричные структуры, в частности произведения Кронекера.

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

Упрощенная концепция:

1. Вычислить градиент  $G_k$ .
2. Обновить статистики  $L_k = \beta L_{k-1} + (1 - \beta) G_k G_k^T$  и  $R_k = \beta R_{k-1} + (1 - \beta) G_k^T G_k$ .
3. Вычислить предобуславливатели  $P_L = L_k^{-1/4}$  и  $P_R = R_k^{-1/4}$ . (Обратный матричный корень)
4. Обновить:  $W_{k+1} = W_k - \alpha P_L G_k P_R$ .

---

<sup>5</sup>Gupta, V., Koren, T. and Singer, Y., 2018, July. Shampoo: Preconditioned stochastic tensor optimization. In International Conference on Machine Learning (pp. 1842-1850). PMLR.

# Shampoo<sup>5</sup>



Расшифровывается как **Stochastic Hessian-Approximation Matrix Preconditioning for Optimization Of** deep networks. Это метод, вдохновленный оптимизацией второго порядка, разработанный для глубокого обучения больших моделей.

**Основная идея:** Аппроксимирует полноматричный предобуславливатель AdaGrad, используя эффективные матричные структуры, в частности произведения Кронекера.

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

Упрощенная концепция:

1. Вычислить градиент  $G_k$ .
2. Обновить статистики  $L_k = \beta L_{k-1} + (1 - \beta) G_k G_k^T$  и  $R_k = \beta R_{k-1} + (1 - \beta) G_k^T G_k$ .
3. Вычислить предобуславливатели  $P_L = L_k^{-1/4}$  и  $P_R = R_k^{-1/4}$ . (Обратный матричный корень)
4. Обновить:  $W_{k+1} = W_k - \alpha P_L G_k P_R$ .

**Заметки:**

- Нацелен на более эффективный учет информации о кривизне, чем методы первого порядка.

---

<sup>5</sup>Gupta, V., Koren, T. and Singer, Y., 2018, July. Shampoo: Preconditioned stochastic tensor optimization. In International Conference on Machine Learning (pp. 1842-1850). PMLR.

# Shampoo<sup>5</sup>



Расшифровывается как **Stochastic Hessian-Approximation Matrix Preconditioning for Optimization Of** deep networks. Это метод, вдохновленный оптимизацией второго порядка, разработанный для глубокого обучения больших моделей.

**Основная идея:** Аппроксимирует полноматричный предобуславливатель AdaGrad, используя эффективные матричные структуры, в частности произведения Кронекера.

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

Упрощенная концепция:

1. Вычислить градиент  $G_k$ .
2. Обновить статистики  $L_k = \beta L_{k-1} + (1 - \beta) G_k G_k^T$  и  $R_k = \beta R_{k-1} + (1 - \beta) G_k^T G_k$ .
3. Вычислить предобуславливатели  $P_L = L_k^{-1/4}$  и  $P_R = R_k^{-1/4}$ . (Обратный матричный корень)
4. Обновить:  $W_{k+1} = W_k - \alpha P_L G_k P_R$ .

**Заметки:**

- Нацелен на более эффективный учет информации о кривизне, чем методы первого порядка.
- Вычислительно дороже, чем Adam, но может сходиться быстрее или к лучшим решениям с точки зрения количества шагов.

---

<sup>5</sup>Gupta, V., Koren, T. and Singer, Y., 2018, July. Shampoo: Preconditioned stochastic tensor optimization. In International Conference on Machine Learning (pp. 1842-1850). PMLR.

# Shampoo<sup>5</sup>



Расшифровывается как **Stochastic Hessian-Approximation Matrix Preconditioning for Optimization Of** deep networks. Это метод, вдохновленный оптимизацией второго порядка, разработанный для глубокого обучения больших моделей.

**Основная идея:** Аппроксимирует полноматричный предобуславливатель AdaGrad, используя эффективные матричные структуры, в частности произведения Кронекера.

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

Упрощенная концепция:

1. Вычислить градиент  $G_k$ .
2. Обновить статистики  $L_k = \beta L_{k-1} + (1 - \beta) G_k G_k^T$  и  $R_k = \beta R_{k-1} + (1 - \beta) G_k^T G_k$ .
3. Вычислить предобуславливатели  $P_L = L_k^{-1/4}$  и  $P_R = R_k^{-1/4}$ . (Обратный матричный корень)
4. Обновить:  $W_{k+1} = W_k - \alpha P_L G_k P_R$ .

**Заметки:**

- Нацелен на более эффективный учет информации о кривизне, чем методы первого порядка.
- Вычислительно дороже, чем Adam, но может сходиться быстрее или к лучшим решениям с точки зрения количества шагов.
- Требует тщательной реализации для эффективности (например, эффективное вычисление обратных матричных корней, работа с большими матрицами).

---

<sup>5</sup>Gupta, V., Koren, T. and Singer, Y., 2018, July. Shampoo: Preconditioned stochastic tensor optimization. In International Conference on Machine Learning (pp. 1842-1850). PMLR.

# Shampoo<sup>5</sup>



Расшифровывается как **Stochastic Hessian-Approximation Matrix Preconditioning for Optimization Of** deep networks. Это метод, вдохновленный оптимизацией второго порядка, разработанный для глубокого обучения больших моделей.

**Основная идея:** Аппроксимирует полноматричный предобуславливатель AdaGrad, используя эффективные матричные структуры, в частности произведения Кронекера.

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

Упрощенная концепция:

1. Вычислить градиент  $G_k$ .
2. Обновить статистики  $L_k = \beta L_{k-1} + (1 - \beta) G_k G_k^T$  и  $R_k = \beta R_{k-1} + (1 - \beta) G_k^T G_k$ .
3. Вычислить предобуславливатели  $P_L = L_k^{-1/4}$  и  $P_R = R_k^{-1/4}$ . (Обратный матричный корень)
4. Обновить:  $W_{k+1} = W_k - \alpha P_L G_k P_R$ .

**Заметки:**

- Нацелен на более эффективный учет информации о кривизне, чем методы первого порядка.
- Вычислительно дороже, чем Adam, но может сходиться быстрее или к лучшим решениям с точки зрения количества шагов.
- Требует тщательной реализации для эффективности (например, эффективное вычисление обратных матричных корней, работа с большими матрицами).
- Существуют варианты для различных форм тензоров (например, сверточных слоев).

---

<sup>5</sup>Gupta, V., Koren, T. and Singer, Y., 2018, July. Shampoo: Preconditioned stochastic tensor optimization. In International Conference on Machine Learning (pp. 1842-1850). PMLR.

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

---

<sup>6</sup>K. Jordan blogpost "Muon: An optimizer for hidden layers in neural networks". 2024.

<sup>7</sup>J. Bernstein blogpost "Deriving Muon". 2025.

<sup>8</sup>Kovalev, D. (2025). Understanding Gradient Orthogonalization for Deep Learning via Non-Euclidean Trust-Region Optimization. arXiv preprint arXiv:2503.12645.



# Сравнение Muon с AdamW на LogReg

💡 Простое сравнение Muon и AdamW на небольшой задаче LogReg

# Дополнительные материалы

# Дополнительные материалы

-  Д. Ветров "Удивительные свойства ландшафта функции потерь в перепараметризованных моделях"

# Дополнительные материалы

-  Д. Ветров "Удивительные свойства ландшафта функции потерь в перепараметризованных моделях"
-  В. Голощапов "О чем не гроккинг"

# Дополнительные материалы

-  Д. Ветров "Удивительные свойства ландшафта функции потерь в перепараметризованных моделях"
-  В. Голощапов "О чём не говорят в книгах о машинном обучении"
-  Д. Ковалев "Understanding Gradient Orthogonalization for Deep Learning via Non-Euclidean Trust-Region Optimization" (Теория за Muon)