# Optimizers

## 一、Optimizer

神经网络作为一个优化问题，优化函数的选择成为了训练过程的关键。但是对于现代的网络框架来说，反向传播封装成一个黑盒，造成我们只需要几行代码就可以完成整个反向传播的过程。这给初学者带来了极大的方便，但是对于想进一步深入理解神经网络的人来说，就造成了很大的困扰。本文就是想将反向传播中最重要的一环优化器剥离出来，希望能够对各位深入理解神经网络带来帮助。

梯度下降中参数更新的基本方法：

$$\theta = \theta - \eta \cdot \nabla J(\theta; x)$$

其中 `θ` 为网络参数, `η` 为学习率。

### 1. In Tensorflow

Tensorflow支持目前所有常见的优化器，例如SGD、 Momentum、 Adagrad、 AdaDelta、 RMSProp, Adam。

再详细介绍各个优化器之前，首先看一下他们的基类Optimizer。

这些优化器包含一个 `minimize()` 方法，该方法用来优化目标函数，函数原型如下:

```
minimize(
    loss,
    global_step=None,
    var_list=None,
    gate_gradients=GATE_OP,
    aggregation_method=None,
    colocate_gradients_with_ops=False,
    name=None,
    grad_loss=None
)
```

第一个参数 `loss` 为不同人物定义的目标函数，第二个参数 `global_step` 用于更新全局的迭代次数，第三个参数 `var_list` 是graph中所有的可以训练的参数。

优化过程一般包括三个步骤：

1. Compute process. 计算 `var_list` 中的参数梯度。 一般使用 `compute_gradients()` 。

> `compute_gradients(loss, var_list)`，一般输入这两个参数，计算对应参数的梯度，返回值是 `(gradient, variable)` 对。

2. Pre process. 对梯度值进行一定的预处理，例如 `clip` 等。

> 有些时候可能会由于一些地方的梯度过大，造成在更新梯度的时候出现 `NaN` 的情况，为了使训练尽可能的稳定，所以需要 `tf.clip_by_xxx()`

3. Apply process. 将不同的梯度值更新到对应的参数。一般使用 `apply_gradients()` 。

> `apply_gradients(grad_and_vars, global_step)`，使用第一步或者第二部处理之后的(grads, vars)进行更新，并且更新global_step。

正常情况下，Dr.Sure不会直接使用 `minimize()` ，因为它缺少步骤2中对梯度的一些精细操作。另外可以通过调整 `var_list` 中变量的数量、种类，达到精确控制某个变量更新规则的目的。同事通过将 `var` 划分到不同的list，也可以对不同的变量使用不同的 `learning rate` 或者不同的 `optimizer` 。

### 2. Challenge

1. 学习率的选择，学习率是控制参数更新的一个最重要的参数之一，太小的学习率更新速度慢而且容易陷入局部最小，太大的学习率容易在学习过程中产生抖动。
2. 如何调整学习率，一般来说我们会在训练的过程中动态调整学习率，也就是通过一个schedule，但是这个调整计划是我们预先设定好的，并不能根据不同的数据集动态去调整。
3. 学习率被统一应用在了所有的参数上，即所有参数使用相同的学习率。但是这明显不是最优的选择，对于一些出现频率很小的参数，可能我们需要用更大的学习率，反之亦然。

## 二、Momentum、NAG

### 1. Momentum

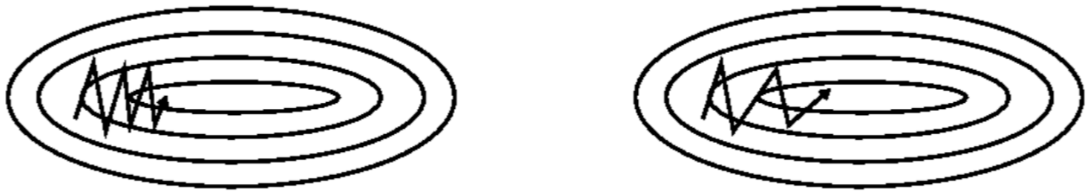
Momentum是在原始的GradientDescent更新方法上的改进，其核心思想就是把 `动量` 的概念引入到参数更新的过程中。

`动量` 一词来源于牛顿第一定律：任何物体都要保持匀速直线运动或静止状态，直到外力迫使它改变运动状态为止。“惯性”，即物体总是倾向于保持器原有的运动状态。对于参数更新也不例外，即本次更新会受到上次参数更新的梯度方向的影响。其计算公式如下：

$$v_t = \gamma v_{t-1} + \eta \nabla_\theta J(\theta)$$

$$\theta = \theta - v_t$$

动量的引入就是为了加速参数更新的速度，同时为了平抑某次不一致的参数更新方向。如下图：



(a) SGD without momentum (b) SGD with momentum

### 2. Nesterov accelerated gradient(NAG)

从上面的 `vt` 计算的公式中可以看到，在计算当前步骤的梯度时仍然使用的是当前的参数，优化函数本身已经通过引入 `动量` 来加速整个参数更新的过程了，参数也可以“Look forward”?

`Nesterov accelerated gradient(NAG)` 的优化方法就是因此而来。其 `vt` 的计算公式如下：

$$v_t = \gamma v_{t-1} + \eta \nabla_\theta J(\theta - \gamma v_{t-1})$$

### 3. [Momentum](#) In Tensorflow

```
__init__(
    learning_rate, # 学习率，根据任务自行设定。
    momentum, # 动量，一般设置成0.9或者其它更小的值。
    use_locking=False,
    name='Momentum',
    use_nesterov=False # 是不是使用Nesterov方法对其进行加速。
)
```

## 三、Adagrad、Adadelta、RMSProp

虽然 `Momentum` 以及 `NAG` 加速了参数训练的过程，但是它仍然存在一个弊端那就是**所有的参数均使用一个相同的学习率。**

### 1. Adagrad

`Adagrad` 根据不同的参数调整学习率。对于经常出现的梯度的参数，采用较小的学习率，不经常出现的梯度的参数，采用较大的学习率。因此该更新方法特别适合那些稀疏数据。

其更新公式如下：

$$\theta_{t+1,i} = \theta_{t,i} - \frac{\eta}{\sqrt{G_{t,i} + \epsilon}} \odot g_{t,i}$$

`Gt` 计算的是当前时刻，每一个参数梯度的平方。从公示中可以看出，在t时刻，每个参数都有一个 `Gt` 对

应于其历史的所有梯度平方之和，这就使得每一个参数在任意时刻的学习率并不是完全一样，而这个学习率完全依赖于其历史的参数。

这样的更新方法当然可以使得“少见”的参数梯度比较大，而“常见”的参数梯度比较小。但是这个参数更新的方法会造成一种极端的情况：随着迭代次数的增加，`G` 的积累值会越来越大，最后会使得学习率 `η` 趋向于0，造成无论怎样更新，参数都不会发生变化。

### 2. Adadelta

`Adadelta` 为了解决 `Adagrad` 训练过程中学习率调整为零的情况。其具体做法就是将原来的 `G` 由“所有”历史梯度的平方和修改成移动平方和。

类似于 `动量` 的求解方法，梯度平方和矩阵的求解方法如下：

$$E[g^2]_t = \gamma E[g^2]_{t-1} + (1-\gamma)g_t^2 = RMS[g]_t$$

文中作者发现，learning_rate也可以使用参数自身的移动平方和进行表示。

$$E[\Delta\theta^2]_t = \gamma E[\Delta\theta^2]_{t-1} + (1-\gamma)\Delta\theta^2 = RMS[\Delta\theta]_t$$

所以最后的更新公式为：

$$\theta_{t+1} = \theta_t - \frac{RMS[\Delta\theta]_{t-1}}{RMS[g]_t} g_t$$

### 3. RMSProp

`RMSProp` 是 `Adadelta` 的一种特殊情况：

$$E[g^2]_t = 0.9E[g^2]_{t-1} + 0.1g_t^2 = RMS[g]_t$$

$$\theta_{t+1} = \theta_t - \frac{\eta}{RMS[g]_t} g_t$$

### 4. Adagrad、 AdaDelta、 RMSProp in Tensorflow

```
__init__( ## Adagrad
    learning_rate,
    initial_accumulator_value=0.1,
    use_locking=False,
    name='Adagrad'
)
```

```
_init__( ## Adadelta
    learning_rate=0.001,
    rho=0.95,
    epsilon=1e-08,
    use_locking=False,
    name='Adadelta'
)
```

```
__init__( ## RMSProp
    learning_rate,
    decay=0.9, # γ, Discounting factor for the history/coming gradient
    momentum=0.0,
    epsilon=1e-10,
    use_locking=False,
    centered=False, # If True, gradients are normalized by the estimated variance
of the gradient; if False, by the uncentered second moment.
    name='RMSProp'
)
```

# 四、Adam

`Adam` 的核心思想结合了 `Adadelta` 的移动平均以及 `Momentu` 的经验衰减。

其动量的两个分量分别表示为：

$$m_t = \beta_1 m_{t-1} + (1 - \beta_1) g_t$$

$$v_t = \beta_2 v_{t-1} + (1 - \beta_2) g_t^2$$

`mt` 和 `vt` 在初始化的过程中被统一设置成0，这就造成了优化的初始阶段，是的他们的值非常小，尤其是当 `β` 趋近于1的过程中。

为了解决这个问题，作者使用下面对 `mt` 和 `vt` 进行估计：

$$\hat{m}_t = \frac{m_t}{1 - \beta_1^t}$$

$$\hat{v}_t = \frac{v_t}{1 - \beta_2^t}$$

因此最终的形式变成：

$$\theta_{t+1} = \theta_t - \frac{\eta}{\sqrt{\hat{v}_t} + \epsilon} \hat{m}_t$$

# 五、Visualization