Verwendete Python Bibliotheken:

- Vorraussetzung: Pip Paketmanager
- Paketinstallationen können durch Ausführen des Notebook-Code-Blocks durchgeführt werden

In [ ]:
```
! pip install pylatex==1.4.1                                                    #
! pip install ipykernel=6.17.1                                                  #
! pip install ipython==8.7.0                                                    #
! pip install jupyter_client==7.4.7                                             #
! pip install jupyter_core==5.1.0                                               #
! pip install latexcodec2.0.1                                                   #
! pip install matplotlib-inline==0.1.6                                          #
! pip install plotly==5.11.0                                                    #
! pip install Sphinx (                                                          #
!   applehelp==1.0.2,
!   bibtex==2.5.0,
!   devhelp==1.0.2,
!   htmlhelp==2.0.0,
!   jsmath==1.0.2,
!   qthelp==1.0.3,
!   serializinghtml==1.1.5
! )
! pip install numpy==1.22.0                                                      #
```

Verwendete VSCode Extensions

In [ ]:
```
# IntelliCode                    v.1.2.29                by Microsoft
# Jupyter                        v2022.11.1003412109     by Microsoft
# Jupyter Cell Tags              v0.1.6                  by Microsoft
# Jupyter Keymap                 v1.0.0                  by Microsoft
# Jupyter Notebook Renderers     v1.0.12                 by Microsoft
# Jupyter slide Show             v0.1.5                  by Microsoft
# Pylance                        v2022.12.20             by Microsoft
# Python                         v2022.20.0              by Microsoft
```

Stochastische Optimierung: ADAM

Inhaltsverzeichnis

- Optimierer und ihre Verwendungszwecke
  - Definition der Verlustfunktion
  - Definition Modell
  - Wie können Modelle optimiert werden?
- Adam Optimierer
- Beispiele
- Einsatzbereich
- Limitierungen
- Alternativen und Abgrenzung
- Fazit
- Quellen

- Eingesetzte Quellen
- Weiterführende Quellen

Abkürzungsverzeichnis

Abkürzung	Bedeutung
p	Wahrscheinlichkeit
CSAM	Child Sexual Abuse Material
MQA	Mittlere Quadratische Abweichung
SGD	Stochatische Gradientenabstieg

Formelgrößen und Einheiten

Abkürzung	Einheit	Bezeichnung
α		Schrittgröße
β		Gewichtung neuer Werte gegenüber alter Werte
β_1		Mittelwert
β_2		zentrierte Varianz
f		Funktion mit dem Parameter θ
m_0		Mittelwert des Gradienten
v_0		unzentrierte Varianz des Gradienten
δ		Gradient
t	Zeiteinheit (beliebige Größe)	Zeit
ϵ		Konstante

Optimierer und ihre Verwendungszwecke

Bevor die Funktionsweise von Optimierern im Detail erläutert wird, werden zwei mit Optimierern zusammenhänge Begriffe, Verlustfunktion und Machine Learning Modell, definiert.

Definition der Verlustfunktion

Die Verlustfunktion ordnet in einem Entscheidungsraum (Ω, Σ) Bereichsschätzungen und Punktschätzungen den Schaden zu, der durch eine vom wahren Parameter abweichende Entscheidung verursacht wird. Die Verlustfunktion wird innerhalb eines statistischen Models $(X, \mathcal{A}, (P_\vartheta)_{\vartheta \in \Theta})$ verwendet und ist wie folgt aufgebaut: $L : \Theta \times \Omega \to [0, +\infty]$. Dabei gilt, das die Funktion $L(\vartheta, \cdot)\Sigma - \mathcal{B}([0, +\infty])$ für jedes fixierte

$\vartheta \in \Theta$ messbar ist. Mehr Informationen zur Verlustfunktionen können Rüschendorf, 2014 entnommen werden.

Verlustfunktionen können auf einzelne Anwendungsfälle angepasst werden. Die folgene Beispielverlustfunktion berechnet die Differenz zwischen vorhergesagten Werten und den tatsächlichen Werten ($Vorhersage - Realwert = Differenz$). Je höher die Differenz, desto höher ist der verursachte Schaden einer Bereichs- oder Punktschätzung. Wenn zum Beispiel der geschätzte Wert für die monatlichen Wohnungskosten in Stuttgart 1500 beträgt, jedoch in der Realität die Kosten bei 1000 liegen, dann gibt die Verlustfunktionen eine Differenz von 500 aus. Wenn die Vorhersage unter dem Realwert liegt, generiert die Verlustfunktion ebenfalls eine Differenz Datarobot, 2018.

| Vorhersage | Realwerte | Differenz | |----------|---------- -|----------| | 1500 | 1000 | 500 | | 1000 | 1000 | 0 | | 750 | 1000 | -250 |

Die Verlustfunktion könnte dahingehend angepasst werden, dass positive Abweichungen ($Vorhersage > Realwert$) einen höheren Schaden verursachen, als negative Abweichungen ($Vorhersage < Realwert$). Um den Gesamtverlust innerhalb eines Datensatzes zu berechnen, kann die quadratische Abweichung ($(Vorhersage - Realwert)^2 = Quadratfehler$) zwischen allen Vorhersagen und Realwerten berechnet werden. Alle Quadratfehler werden summiert und deren Mittlere quadratische Abweichung (MQA) wird berechnet Datarobot, 2018.

$$\text{MQA} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(Vorhersage_i - Realwert_i)^2$$

Eine andere Möglichkeit den Verlust der Verlustfunktion zu berechnen ist die Likelihood Funktion. Die Likelihood Funktion erhält als Eingabe die vorhergesagte Wahrscheinlichkeit (p) des Eintretens eines Events und multipliziert die Eingabewerte miteinander. Wenn zum Beispiel folgende Vorhersagen ($[0.2, 0.35, 0.1, 0.87]$) in Kombination mit folgenden Wahrheitswerten ($[1, 0, 0, 1]$) getroffen wurden, berechnet sich der Wert der Likelihood Funktion wie folgt:

$$0.2 * (1 - 0.35) * (1 - 0.1) * 0.87 = 0.102$$

Für alle falschen Werte wird die Wahrscheinlichkeit über $1 - p$ berechnet Datarobot, 2018.

Definition Modell

Ein Machine Learning Modell ist definiert als Datei, die bestimmte Muster erkennt QuinnRadich et al., 2022. Die Musterkennung des Modells wird durch Training mit Daten verbessert. Durch das Training entsteht ein Vorhersagemodell, welches mit einer hohen Wahrscheinlichkeit Vorhersagen anhand von Eingabedaten treffen kann Murdoch et al, 2019, S. 2.

Wie können Modelle optimiert werden?

Mit Hilfe der Verlustfunktion können Modelle anhand ihrer Gewichte optimiert werden. Dieser Prozess kann manuell durchgeführt werden. Dabei werden die Gewichte so angepasst, dass die Verlustfunktion minimiert wird. Ein Optimierer automatisiert diesen Prozess. Er setzt die Ausgabe der Verlustfunktion und die Eingabe

der Gewichte in Relation und optimiert die Gewichte so, dass die Verlustfunktion minimiert wird Datarobot, 2018.

Ein beispielhafter Optimierer ist der Gradientenabstieg. Der Gradientenabstieg optimiert Modelle in zwei Schritten Datarobot, 2018:

1. Berechne für jedes Gewicht welchen Einfluss kleine Änderungen auf die Verlustfunktion haben. Dieser Einfluss auf die Verlustfunktion wird Gradient genannt. Ein Gradient ist ein Spaltenvektor, der die partiellen Ableitungen von f nach den Spaltenvektoren (also den Gewichten) enthält Studyflix, o. J.
2. Modifiziere die Gewichte anhand der Gradienten, sodass die Verlustfunktion kleiner wird.

Die Schritte eins und zwei werden so lange wiederholt, bis die Verlustfunktionen einen festgelegten minmalen Wert erreicht hat. Die Geschwindigkeit mit dem der Gradientenabstieg operiert, kann über die Lernrate (alternativ auch Schrittgröße genannt) angepasst werden. Die Lernrate bestimmt die Größe der Änderungen, die der Gradientenabstieg an den Gewichten vornimmt. Diese wird in Kommazahlen angegeben und hat meistens Werte von 0.0001 bis 0.001. Die Gradienten werden mit der Lernrate multipliziert. Eine zu kleine Lernrate kann dazu führen, das der Gradientenabstieg Probleme mit lokalen Minima hat. In diesem Fall geht der Optimierer davon aus, dass er den minimalsten Punkt erreicht hat, jedoch handelt es sich bei dem Punkt nur um ein lokales Minimum Datarobot, 2018.

Ein weiteres Problem für Optimierer kann Overfitting darstellen. Beim Overfitting wird das Model zu sehr auf die Daten mit denen es trainiert wurde angepasst. Dadurch kann das Modell mit den Trainingsdaten nahezu perfekt arbeiten, hat jedoch Probleme mit realen Daten. Overfitting tritt auf, wenn einzelne Gewichte einen zu hohen Einfluss auf das Model haben und dadurch das Ergebnis zu stark modifizieren. Optimierer können Overfitting durch das Hinzufügen von einem zusätzlichen Strafparameter zur Verlustfunktion vermeiden. Der Strafparameter bestraft Optimierer, wenn sie zu große Werte für Gewichte nehmen, auch wenn dadurch die Verlustfunktion kleiner wird. Dadurch verändern Optimierer mehrere Gewichte in kleinen Schritten, anstatt einzelne Gewichte in großen Schritten Datarobot, 2018.

Im Folgenden wird ein komplexerer Optimierer, der Adam Optimierer, beschrieben.

Adam Optimierer

Der Adam Optimierer ist ein Algorithmus für stochastische, gradientenbasierte Optimierung erster Ordnung von stochastischen Zielfunktionen Diederik et al., 2017. 2014 wurde dieser auf der ICLR Konferenz für Deep-Learning-Forscher von Jimmy Ba und Diederik Kingma vorgestellt Diederik et al., 2017. Dieser zeichnet sich durch folgende Punkte aus:

- einfache Implementierung
- rechnerische Effizienz
- geringer Speicherbedarf
- invariant zu diagonalen Neuskalierungen der Steigungen
- gut geeignet für Probleme in Bezug auf Daten oder Parameter

Dieser Optimierer ist weit verbreitet und wird beim Training von neuronalen Netzen eingesetzt Introduction to Optimizers, Adam.

Mit diesem Optimierer, beziehungsweise dieser Methode, können individuelle adaptive Lernraten für unterschiedliche Parameter aus Schätzungen der ersten und zweiten Momente der Gradienten berechnet

werden. Abgeleitet ist der Name Adam von 'adaptive moment estimation'. Diese Methode soll die Vorteile der beiden Methodiken AdaGrad Duchi et al., 2011 sowie RMSProp Tielemann & Hinton, 2012 kombinieren.

So gehören zu den Vorteilen von ADAM, dass

- die Größenordnungen der Parameteraktualisierungen invariant gegenüber der Skalierung der Gradienten sind,
- die Schrittweiten näherungsweise durch den Hyperparameter der Schrittweite begrenzt sind,
- kein stationäres Ziel erforderlich ist,
- Adam mit spärlichen Gradienten arbeiten kann und
- Adam eine Form von Schrittgrößen-Annealing durchführt.

Der Algorithmus ist wie folgt aufgebaut:
Nutzer müssen eine Schrittweite α definieren. Darüber hinaus müssen β_1 ud β_2 bestimmt werden. Diese bestimmen die Gewichtung neuer Werte gegenüber älteren Werten (Momentum Optimizerin Deep Learning, 2021, Exponentially Weighted Moving Average (2:53)). Darüber hinaus definieren Nutzer eine Funktion mit dem Parameter θ, sowie den initialen Parameter Vektor θ_0.

Beim Durchführen von Adam werden folgende Schritte durchgeführt:

- m_0 = Mittelwert des Gradienten wird inititalisiert
- v_0 = Unzentrierte Varianz des Gradienten wird initialisiert
- t = Der erste Zeitpunkt wird initialisiert

Der folgende Codeblock wird solange wiederholt, bis θ_t konvergiert:

- t <- $t+1$ = Erhöhe den Zeitpunkt um eins
- g_t <- $\nabla_0\ f_t\left(\theta_{t-1}\right)$ = Erhalte alle Gradienten (∇) an der Stelle des aktuellen Zeitpunktes
- m_t <- $\beta_1 * m_{t-1} + (1-\beta_1) * g_t$ = Aktualisiere die Schätzung der Mittelwerte des Gradienten
- v_t <- $\beta_2 * m_{t-1} + (1-\beta_2) * g_t^2$ = Aktualisiere die Schätzung der unzentrerten Varianz des Gradienten
- $\hat{m}_t$ <- $m_t/(1-\beta_1^t)$ = Berechne die fehlerkorrigierte Schätzung der Mittelwerte des Gradienten
- $\hat{v}_t$ <- $v_t/(1-\beta_2^t)$ = Berechne die fehlerkorrigierte Schätzung der unzentrierten Varianz des Gradienten

Sobald θ_t konvergiert, werden die berechneten Parameter ausgegeben.

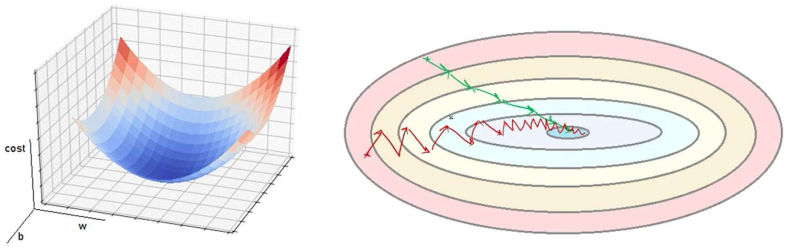
Der Adam Optimierer ist eine Kombination des Momentum Optimierers sowie des RMSprop Optimierers. Momentum und RMSprop bestehen aus aus vier mathematischen Formeln. RMSprop und Momentum basieren auf dem Gradientenabstieg. Dieser wurde im Kapitel "Wie können Modelle optimiert werden?" erklärt.

Momentum (Momentor Optimizer in Deep Learning, 2021):

1. $V_{dW} = \beta * V_{dW_{prev}} + (1-\beta) * dW$
2. $V_{dB} = \beta * V_{dB_{prev}} + (1-\beta) * dB$
3. $W = W - \alpha * V_{dW}$
4. $B = B - \alpha * V_{dB}$

Die Vorgabe ist, dass zwei Gewichts-Parameter (weight-parameter) eingesetzt werden, um das lokale Minimum zu erreichen. Da zwei Gewichts-Parameter vorliegen, bewegt man sich im dreidimensionalen Raum.

In [1]:
```
from IPython.display import display, Image
display(Image(filename="Adam_opt.png", height=400, width=400))
```



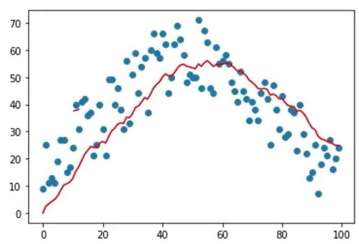
Das Ziel dieses Algorithmus (dargestellt in rot) ist es, die horizontale Bewegung zu verstärken und gleichzeitig die vertikale Bewegung zu reduzieren, um auf diesem Weg das lokale Minimum zu finden. Dazu wird folgende Formel verwendet, die eine allgemeinere Form der Formeln 1. und 2. darstellt:
$V_t = \beta * V_{t-1} + (1-\beta) * \theta_t$.
Mit jedem Datenpunkt wird das (Durchschnitts-)Gewicht neu berechnet. Dabei muss bei jeder Neuberechnung von V abhängig von der Zeit immer das Gewicht des vorherigen Datenpunktes bzw. Schrittes mit berücksichtigt werden. β wird dabei zwischen Null und Eins gewählt ($0 < \beta < 1$).

Diese Formel kann für die horizontale Bewegung, wie auch für die vertikale Bewegung eingesetzt werden, sollte aber anhand der Variablenbezeichnungen leicht angepasst werden. Die Formeln 3. und 4. stellen die eigentliche Bewegung dar, die abhängig von der jeweiligen Gewichtung aus 1. oder 2. ist.

Visualisiert kann dies folgendermaßen dargestellt werden (dabei zeigt die rote Linie das Durchschnittsgewicht an jeder Stelle der Punkte an).

In [2]:
```
from IPython.display import display, Image
display(Image(filename="Adam_v.png", height=400, width=400))
```

$V_0 = 0$
$V_1 = \beta * V_0 + (1-\beta) * \theta_1$
$V_2 = \beta * V_1 + (1-\beta) * \theta_2$
$V_3 = \beta * V_2 + (1-\beta) * \theta_3$
$V_4 = \beta * V_3 + (1-\beta) * \theta_4$
$V_5 = \beta * V_4 + (1-\beta) * \theta_5$
$V_6 = \beta * V_5 + (1-\beta) * \theta_6$
$V_7 = \beta * V_6 + (1-\beta) * \theta_7$
$V_8 = \beta * V_7 + (1-\beta) * \theta_8$
$V_9 = \beta * V_8 + (1-\beta) * \theta_9$



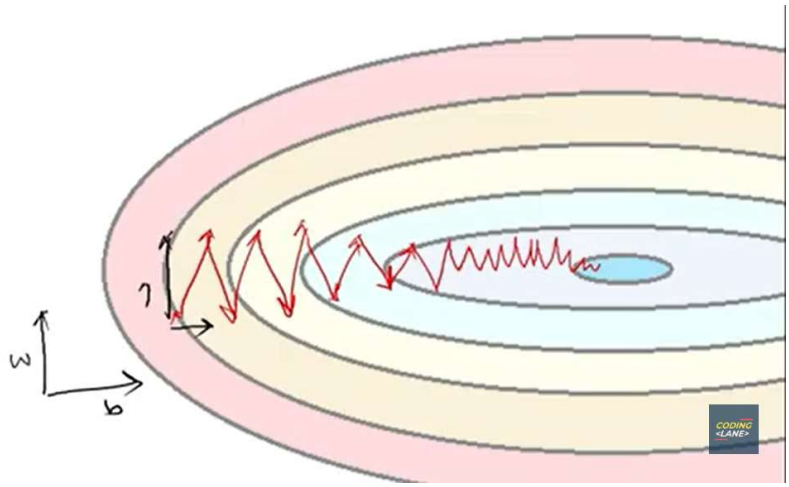
RMSprop (RMSprop Optimizer Explained in Detail, 2021):

1. $S_{dW} = \beta * S_{dW_{prev}} + (1-\beta) * (dW)^2$
2. $S_{dB} = \beta * S_{dB_{prev}} + (1-\beta) * (dB)^2$
3. $W = W - \alpha * (\frac{dW}{\sqrt{S_{dW}+\epsilon}})$
4. $B = B - \alpha * (\frac{dB}{\sqrt{S_{dB}+\epsilon}})$

RMSprop verfolgt das gleiche Ziel, nur mit einer geringfügig abgewandelten Methodik. Bei 5. und 6. wird der dW und dB Wert quadiert. Zur Unterscheidung wird der berechnete Faktor mit S abgekürzt und nicht wie bei Momentum mit V. Wächst somit der Faktor, z.B. S_{dW} so wird die vertikale Bewegung reduziert. Das gilt invertiert auch für die horizontale Bewegung. Umso kleiner der Faktor, desto größer ist die horizontale Bewegung. Damit kann auch schneller das lokale Minimum erreicht werden. Grund dafür ist, dass der Faktor

für die Bewegungsberechnung im Nenner steht und somit für einen kleinen Wert sorgt. Aus diesem Optimierungsvorgehen ergibt sich auch die Bezeichnung von RMSprop - Root Mean Square propagation.

In [3]:
```
from IPython.display import display, Image
display(Image(filename="RMSprop_wb.png", height=400, width=400))
```



Werden diese beiden Optimierer in der Folge kombiniert, so ergibt sich für die horizontale Bewegung folgende Gleichung:

$$W = W - \alpha * (\frac{V_{dW}}{\sqrt{S_{dW} + \epsilon}})$$

Für die vertikale Bewegung ergibt sich diese Gleichung:

$$B = B - \alpha * (\frac{V_{dB}}{\sqrt{S_{dB} + \epsilon}})$$

Beispiel

Im Folgenden wird eine Beispielimplementierung in Python beschrieben. Die Implementierung basiert auf einem Beispiel von Enoch Kan, 2020. Das Beispiel verwendet die Biblliotheken numpy und math.

Um den Adam Algorithmus zu initialisieren müssen einige Variablen definiert werden:

- alpha (α) = Schrittgröße
- beta1 (β_1) und beta2 (β_2) = Gewichtung neuerer Werte gegenüber älteren Werten. beta1 fasst den Mittelwert und beta2 die unzentrierte Varianz zusammen. Bei der unzentrierten Varianz handelt es sich um den reinen Varianzwert ohne Abzug des Mittelwerts.
- epsilon (ϵ) = Konstante, damit beim Updaten von nicht durch null geteilt wird.

In jeder Iteration des Algorithmus werden folgende Schritte durchgeführt: Im Ersten Schritt werden die Gewichte und der Bias von β_1 und β_2 berechnet. Dazu werden m_t (der Mittelwert) und v_t (die Varianz) über die Formeln
$m_t = \beta_t * m_{t-1} + (1 - \beta_1) * g_t$ und $v_t = \beta_t * v_{t-1} + (1 - \beta_2) * g_t^2$ berechnet.

Die gleitenden Mittelwerte werden über die Parameter β_1 und β_2 und den Gradienten g_t berechnet. Dieser Schritt wird Bias Correction genannt und wird über folgende Formeln $\hat{m}_t = \frac{m_t}{1-\beta_1^t}$ und $\hat{v}_t = \frac{v_t}{1-\beta_2^t}$ durchgeführt. Die Gewichte und der Bias werden mit Hilfe der Schrittgröße α aktuallisiert.

In [4]:
```
# dw = Weights of the previous timestep
# db = biases of the previous timestep
# m = mean
# v = uncentered variance
# m_dw = mean of the Weights of the previous timestep
# m_db = mean of the biases of the previous timestep
# v_dw = uncentered variance of the Weights of the previous timestep
# v_db = uncentered variance of the biases of the previous timestep
import numpy as np
class AdamOptim():
    # inititalze the adam parameters
    def __init__(self, alpha=0.01, beta1=0.9, beta2=0.999, epsilon=1e-8):
        self.m_dw, self.v_dw = 0, 0
        self.m_db, self.v_db = 0, 0
        self.beta1 = beta1
        self.beta2 = beta2
        self.epsilon = epsilon
        self.alpha = alpha
    def update(self, t, w, b, dw, db):
        ## dw, db are from current minibatch
        ## momentum beta 1
        # weights
        self.m_dw = self.beta1*self.m_dw + (1-self.beta1)*dw
        # biases
        self.m_db = self.beta1*self.m_db + (1-self.beta1)*db

        ## rms beta 2
        # weights
        # update biased second raw moment estimate
        self.v_dw = self.beta2*self.v_dw + (1-self.beta2)*(dw**2)
        # biases
        self.v_db = self.beta2*self.v_db + (1-self.beta2)*(db)

        ## bias correction
        m_dw_corr = self.m_dw/(1-self.beta1**t)
        m_db_corr = self.m_db/(1-self.beta1**t)
        v_dw_corr = self.v_dw/(1-self.beta2**t)
        v_db_corr = self.v_db/(1-self.beta2**t)

        ## update weights and biases
        w = w - self.alpha*(m_dw_corr/(np.sqrt(abs(v_dw_corr))+self.epsilon))
        b = b - self.alpha*(m_db_corr/(np.sqrt(abs(v_db_corr))+self.epsilon))
        return w, b
```

In [ ]:
```
def loss_function(m):
    return m**2-2*m+1
## take derivative
def grad_function(m):
    return 2*m-2
# check if the current weight is the same as the previous weight
def check_convergence(w0, w1):
    return (w0 == w1)

# inititialize Adam object
w_0 = 0
b_0 = 0
adam = AdamOptim()
t = 1
converged = False

while not converged:
    dw = grad_function(w_0)
    db = grad_function(b_0)
```

```
    w_0_old = w_0
    w_0, b_0 = adam.update(t,w=w_0, b=b_0, dw=dw, db=db)
    if check_convergence(w_0, w_0_old):
        print('converged after '+str(t)+' iterations')
        break
    else:
        print('iteration '+str(t)+': weight='+str(w_0))
        t+=1
```

Einsatzbereich

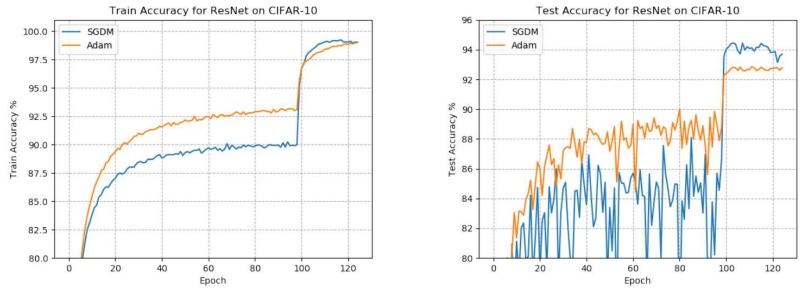
Der Adam Optimierer wurde entwickelt, um den Lernprozess neuronaler Netzwerke zu optimieren Bushaev, 2018. Adam kann zum Beispiel dafür verwendet werden, um Pixeländerungen an Bildern durchzuführen, ohne den Hashwert zu verändern. Struppek et al. Struppek et al., 2022, S. 6f konten zeigen, das mit Adam Hash Kollisionen forciert oder vermieden werden können. Dadurch ist es unter anderem möglich kleine Änderungen an den Pixeln von Bildern vorzunehmen, ohne den Hash-Wert zu ändern. Apple verwendet den Hash-Wert von Bildern um Kinderpornografie in Bildern von Nutzern der iCloud zu identifizieren. Mit Hilfe von Optimierern, wie Adam, können Bildinformationen manipuliert und Personen belastende Bilder untergeschoben werden, deren Hash-Wert mit einem Hash-Wert aus einer Child Sexual Abuse Material (CSAM) Datenbank übereinstimmt Struppek et al., 2022, S. 1.

Jais et al. Jais et al., 2019, S. 1 konnten zeigen, das Adam in tiefen und weiten neuronalen Netzwerken verwendet werden kann, um deren Leistung zu verbessern. Als Grundlage für das tiefe und weite neuronale Netzwerk wurden Daten zu Brustkrebs verwendet. Diese wurden korelliert, um Muster im Datensatz zu erkennen. Daraufhin wurde mit den Daten das tiefe und weite neuronale Netzwerk trainiert. Der Trainingsprozess wurde mit Adam optimiert Jais et al., 2019, S. 43f..

Limitierungen

Adam ist einer der Standard-Algorithmen, wenn es darum geht, adaptive Gradientenmethoden in Deep-Learning einzusetzen Tang et al., 2019, S. 1f. Jedoch zeigt sich, dass der Adam Optimierer und weitere adaptive Optimierungsmethoden im Vergleich mit dem stochastischen Gradientenabstieg (SGD) nicht so gut generalisieren. Als Generalisierung wird die Übertragung der aus den Trainingsdaten gefundenen Erkenntnisse auf Realdaten bezeichnet. Adam schneidet bei Trainingsdaten gut ab. Bei Testdaten liefert jedoch SGD bessere Ergebnisse. Der Leistungsunterschied zwischen SGD und Adam, die Generalisierungslücke genannt, liegt bei zwei ProzentTang et al., 2019, S. 1f.

In [6]:
```
from IPython.display import display, Image
display(Image(filename="Tang-et-al.png", height=400, width=400))
```



(a) train (b) test

Abbildung: Training der ResNet-34-Architektur auf dem CIFAR-10-Datensatz mit stochastischem Gradientenabstieg (SGD) und Adam. Adam hat eine schnellere anfängliche Konvergenzgeschwindigkeit, aber die endgültige Testgenauigkeit ist niedriger als die von SGD Tang et al., 2019, S. 1f.

Zum besseren Verständnis werden im Folgenden wichtige Aspekte von SGD und ADAM beschrieben. SGD berechnet nur auf einer kleinen Teilmenge einer zufälligen Auswahl von Datenbeispielen den Gradientenabstieg. Das hat zur Folge, dass die Lernrate niedriger ist, die "Leistung" entspricht allerdings der eines normalen Gradientenabstiegs. Im direkten Vergleich dazu berechnet ADAM die Lernrate für verschiedene Parameter aus Schätzungen des ersten und zweiten Momentums. Dabei werden die Vorteile von RMSprop und AdaGrad kombiniert, um adaptive Lernraten für verschiedene Parameter zu berechnen.

Kaur et al. (Kaur, 2022, Kaur, 2022, Poster, 2020-NIPS-SGD-poster) haben folgende Problembereiche bei Adam identifiziert, die für die schlechte Generalisierungsfähigkeit verantwortlich sind:

- **Ungleiche Skalierung der Gradienten**
  Das kann zur Folge haben, dass für adaptive Gradientenmethoden eine schlechte Generalisierungsleistung zustande kommt. SGD skaliert glechmäßiger und etwaige Trainingsfehler können besser verallgemeinert werden.
- **Exponentiell gleitender Durchschnitt**
  In Adam wird ein sogenannter exponentiell gleitender Durchschnitt eingesetzt, der die Lernrate nicht monoton sinken lassen kann. Die Folge daraus ist eine suboptimale Lösung und eine schlechte Generalisierungsleistung.
- **Unter Umständen zu geringe Lernrate**
  Wenn Adam mit einer zu niedrigen Lernrate konfiguriert wird, kommt es zu keiner effektiven Konvergenz. Dadurch findet Adam nicht den richtigen Pfand, wodurch der Optimierer zu einem supotimalen Punkt konvergiert.
- **Unter Umständen stark steigende Lernrate**
  Um zu konvergieren erhöht Adam manchmal die Lernrate. Tritt dieser Fall ein, so wirkt sich das negativ auf die Leistung des Algorithmus aus.

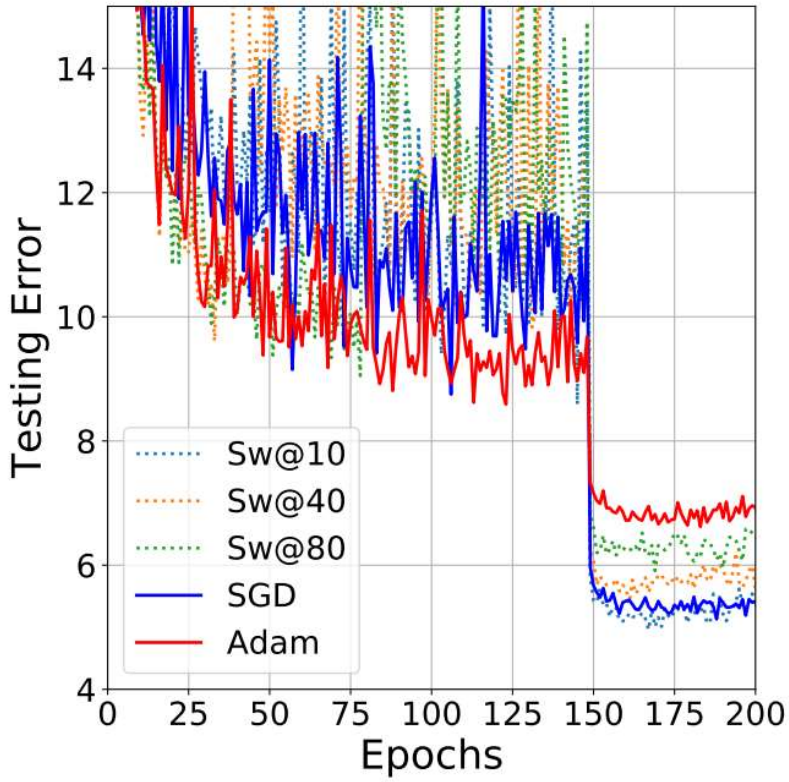
Allerdings können die Grenzen von ADAM durch Einsatz der Strategie SWATS überwunden werden. Nitish Shirish Keskar und Richard Socher haben untersucht, wie die Generalisierungsleistung durch den Wechsel von ADAM zu SGD verbessert werden kann Bushaev, 2018, Problems with Adam. Im dazugehörigen Paper wird die SWATS Strategie vorgestellt, was so viel bedeutet wie "**Sw** from **A**dam **t**o **S**GD". Das heißt, dass nur zu SGD gewechselt wird, wenn eine Bedingung eintritt Keskar et al., 2020, S. 2ff. Die Bedingung ist folgendermaßen aufgebaut:

$$\left| \frac{\lambda_k}{1-\beta_2^k} - \gamma_k \right| < \epsilon,$$

Dabei wird der verzerrungskorrigierte exponentieller Mittelwert mit dem aktuellen Wert γ_k verglichen. Die Bias-Korrektur ist notwendig, um während dem Training zu verhindern, dass die Null-Initialisierung einen Einfluss hat. Wenn diese Bedingung erfüllt ist, wird die Lernrate von SGD mit $\Lambda := \frac{\lambda_k}{(1-\beta_2^k)}$ gewählt Keskar et al., 2020, S. 4f.

In nachfolgendem Diagramm ist zu sehen, wie sich der Switch zu SGD je nach fortgeschrittener Epoche auswirkt.

In [7]:
```
from IPython.display import display, Image
display(Image(filename="Epochs.png", height=400, width=400))
```



Dabei wird vermehrt darauf hingewiesen, dass der Switch zum richtigen Zeitpunkt erfolgen muss. Wenn zu spät zu SGD gewechselt wird, erhält man ähnlich wie bei ADAM eine Generalisierungslücke. Ein früher Wechsel führt zu einer mit SGD vergleichbaren Testgenauigkeit Keskar et al., 2020, S. 3f.

Alternativen & Abgrenzung

Im folgenden Abschnitt wird Adam von anderen Optimierungsmethoden abgegrenzt. Es werden folgende Optimierungsmethoden besprochen:

- RMSProp - Tielemann & Hinton, 2012
- AdaGrad - Duchi et al., 2011
- vSGD - Schaul et al., 2012
- AdaDelta - Zeiler, 2012
- natürliche Newton-Methode - Roux & Fitzgibbon, 2010
- SFO - Sohl-Dicksein et al., 2014
- NGD - Amari, 1998

vSGD, AdaDelta und die natürliche Newton-Methode schätzen die Krümmung aus Informationen erster Ordnung und setzen anhand dieser Informationen die Schrittweite. Der SFO (Sum-of-Functions Optimierer) ist ein quasi-Newton-Verfahren, das auch Minibatches aufbaut. Im Gegensatz zum Adam Optimierer hat der SFO einen linearen Speicherbedarf in der Anzahl der Minibatch-Partitionen eines Datensatzen. SFO ist deswegen auf speicherbeschränkten Systemen, wie zum Beispiel einer GPU, meist nicht ausführbar.

Bei RMSProp (Root Mean Square Propagation) handelt es sich um einen Optimierer, der eng mit dem Adam Optimierer verwandt ist. Es kann auch vorkommen, dass eine Version mit Momentum eingesetzt wird Graves, 2013. Wird RMSProp mit Momentum eingesetzt, so werden die Parameteraktualisierungen anhand

eines Momentums auf dem neu skalierten Gradienten generiert. Beim Adam Optimierer werden die Aktualisierungen anhand eines Durchschnitts des ersten und zweiten Momentums des Gradienten geschätzt. Bei RMSProb wird der Bias nicht korrigiert. Eine Biaskorrektur wäre jedoch notwendig, wenn ein Wert von β_2 nahe dem Wert eins (1) ist. In diesem Fall kann eine Nichtkorrektur des Bias zu sehr großen Schrittweiten führen, woraus sich eine Divergenz entwickeln kann Diederik et al., 2017, S. 5,8 [siehe 6.4]. RMSProp und Adadelta zeilen sich den gleichen Update-Vektor:

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

$$\theta_{t+1} = \theta_t - \frac{\eta}{\sqrt{E[g^2]_t + \varepsilon}} g_t$$

Der AdaGrad Algorithmus passt die Lernrate an die Parameter an und führt kleine Aktualisierungen für Parameter durch, die mit häufig auftretenden Features verbunden sind. Größere Aktualisierungen werden für Parameter durchgeführt, die mit seltenen Features verbunden sind Ruder, 2016; Dean et al., 2012.

Fazit

Der Adam Optimierer kombiniert die positiven Eigenschaften von AdaGrad und RMSProb. Also die effiziente Verarbeitung von "Sparse Gradients" von AdaGrad und die gute Performance in nicht stationären Umgebungen von RMSProb. Adam hat unter Verwendung der Standardparameter eine gute Performance und Geschwindigkeit und kann mit "Sparse Gradients" umgehen. Leider ist die Generalisierungsfähigkeit von Adam geringer als das Standardverfahren SGD. Das liegt primär an der, im Vergleich zu SGD, ungleichen Skalierung der Gradienten. Außerdem leidet die Leistung von Adam sehr stark an zu gering gewählten Lernraten, wodurch Adam zu supoptimalen Punkten konvergiert. Diese Nachteile können durch eine Kombination aus Adam und SGD umgangen werden. Die SWATS Strategie verwendet Adam am Anfang für Optimierungen und wechselt später zu SGD für eine bessere Leistung des trainierten Modells auf Realdaten.

Der Adam Optimierer ist ein guter Standard Optimierer, welcher in vielen Situationen angewandt werden kann. Jedoch sollten Nutzern die Limitierungen von Adam bekannt sein, um bestmögliche Ergebnisse zu erzielen. Im Zweifelsfall bietet sich eine Kombination mit SGD (SWATS Strategie) oder ein alleiniges Verwenden von SGD für die beste Leistung des trainierten Modells an.

Quellen

Eingesetzte Quellen

1.

Title:	Mathematische Statistik
Authors:	Ludger Rüschendorf
Date:	2014
Source:	https://link.springer.com/book/10.1007/978-3-642-41997-3
Zuletzt aufgerufen am:	13. Dezember 2022

1.

Title:	Introduction to Loss Functions
Authors:	DataRobot
Date:	30. April 2018
Source:	https://www.datarobot.com/blog/introduction-to-loss-functions/
Zuletzt aufgerufen am:	13. Dezember 2022

1.

Title:	Was ist ein Machine Learning-Modell?
Authors:	QuinnRadich, v-alje, eliotcowley
Date:	2. Dezember 2022
Source:	https://learn.microsoft.com/de-de/windows/ai/windows-ml/what-is-a-machine-learning-model
Zuletzt aufgerufen am:	13. Dezember 2022

1.

Title:	Interpretable machine learning: definitions, methods, and applications
Authors:	James W. Murdoch, Chandan Singh, Karl Kumbier, Reza Abbasi-Asl, Bin Yu
Date:	14. Januar 2019
Source:	https://arxiv.org/pdf/1901.04592.pdf?fbclid=IwAR2frcHrhLc4iaH5-TmKKq263NVvAKHtG4uQoiVNDeLAG3QFzdje-yzZjiQ
Zuletzt aufgerufen am:	13. Dezember 2022

1.

Title:	Gradienten berechnen
Authors:	studyflix
Date:	-- keine Angabe --
Source:	https://studyflix.de/mathematik/gradient-berechnen-1350
Zuletzt aufgerufen am:	13. Dezember 2022

1.

Title:	Introduction to Optimizers
Authors:	DataRobot
Date:	7. Mai 2018
Source:	https://www.datarobot.com/blog/introduction-to-optimizers/
Zuletzt aufgerufen am:	13. Dezember 2022

1.

Title:	Step 1: Understand how Adam works
Authors:	Enoch Kan
Date:	6. November 2020

Source:	https://towardsdatascience.com/how-to-implement-an-adam-optimizer-from-scratch-76e7b217f1cc
	https://miro.medium.com/max/390/0*F9hIO3J8_i2F0p3y.webp
Zuletzt aufgerufen am:	13. Dezember 2022

1.

Title:	Adam: A Method for Stochastic Optimization
Authors:	Diederik P. Kingma, Jimmy Ba
Date:	30. Januar 2017
Source:	https://arxiv.org/abs/1412.6980
Zuletzt aufgerufen am:	13. Dezember 2022

1.

Title:	Adaptive Subgradient Methods for Online Learning and Stochastic Optimization
Authors:	John Duchi, Elad Hazan, Yoram Singer
Date:	11 Juli 2011
Source:	https://dl.acm.org/doi/pdf/10.5555/1953048.2021068
Zuletzt aufgerufen am:	13. Dezember 2022

1.

Title:	Momentum Optimizer in Deep Learning | Explained in Detail
Authors:	Coding Lane
Date:	21. August 2021
Source:	https://youtu.be/Vce8w1sy0e8
Zuletzt aufgerufen am:	13. Dezember 2022

1.

Title:	RMSprop Optimizer Explained in Detail | Deep Learning
Authors:	Coding Lane
Date:	27. August 2021
Source:	https://youtu.be/ajl_HTyaCu8
Zuletzt aufgerufen am:	13. Dezember 2022

1.

Titel:	An overview of gradient descent optimization algorithms
Autor:	Sebastian Ruder
Datum:	19 January 2016
Source:	https://ruder.io/optimizing-gradient-descent/index.html#adagrad
Zuletzt aufgerufen am:	13. Dezember 2022

1.

Title:	Generating Sequences With Recurrent Neural Networks
Authors:	Alex Graves
Date:	5. Juni 2014
Source:	https://arxiv.org/abs/1308.0850
Zuletzt aufgerufen am:	13. Dezember 2022

1.

Title:	Adam — latest trends in deep learning optimization.
Authors:	Vitaly Bushaev
Date:	22. October 2018
Source:	https://towardsdatascience.com/adam-latest-trends-in-deep-learning-optimization-6be9a291375c
Zuletzt aufgerufen am:	14. Dezember 2022

1.

Title:	Improving Generalization Performance by Switching from Adam to SGD
Authors:	Nitish Shirish Keskar, Richard Socher
Date:	20. Dezember 2020
Source:	https://arxiv.org/abs/1712.07628
Zuletzt aufgerufen am:	14. Dezember 2022

1.

Title:	Learning to Break Deep Perceptual Hashing: The Use Case NeuralHash
Authors:	Lukas Struppek, Dominik Hintersdorf, Daniel Neider, Kristian Kersting
Date:	9. Juni 2022
Source:	https://arxiv.org/pdf/2111.06628.pdf
Zuletzt aufgerufen am:	14. Dezember 2022

1.

Title:	Adam Optimization Algorithm for Wide and Deep Neural Network
Authors:	Imran Khan Mohd Jais, Amelia Ritahani Ismail, Syed Qamrun Nisa
Date:	23. Juni 2019
Source:	http://journal2.um.ac.id/index.php/keds/article/view/6775/0
Zuletzt aufgerufen am:	14. Dezember 2022

1.

Title:	Overview of mini-batch gradient descent
Authors:	Geoffrey Hinton, Nitish Srivastava, Kevin Swersky
Date:	2012
Source:	https://www.cs.toronto.edu/~tijmen/csc321/slides/lecture_slides_lec6.pdf
Zuletzt aufgerufen am:	14. Dezember 2022

1.

Title:	A Bounded Scheduling Method for Adaptive Gradient Methods
Authors:	Mingxing Tang, Zhen Huang, Yuan Yuan, Changjian Wang, Yuxing Peng
Date:	1. September 2019
Source:	https://www.mdpi.com/2076-3417/9/17/3569
Zuletzt aufgerufen am:	16. Dezember 2022

1.

Title:	Why Should adam Optimizer Not be the Default Learning Algorithm?
Authors:	Harjot Kaur
Date:	20. August 2022
Source:	https://pub.towardsai.net/why-adam-optimizer-should-not-be-the-default-learning-algorithm-a2b8d019eaa0
Zuletzt aufgerufen am:	16. Dezember 2022

1.

Title:	Towards Theoretically Understanding Why SGD Generalizes Better Than ADAM in Deep Learning
Authors:	Pan Zhou, Jiashi Feng, Chao Ma, Caiming Xiong, Steven HOI, Weinan E
Date:	29. November 2021
Source:	https://panzhous.github.io/assets/pdf/2020-NIPS-SGD-poster.pdf; (https://panzhous.github.io/#2020)
Zuletzt aufgerufen am:	16. Dezember 2022

1.

Title:	Large Scale Distributed Deep Networks
Authors:	Jeffrey Dean, Greg S. Corrado, Rajat Monga, Kai Chen, Matthieu Devin, Quoc V. Le, Mark Z. Mao, Marc'Aurelio Ranzato, Andrew Senior, Paul Tucker, Ke Yang, Andrew Y. Ng
Date:	2012
Source:	https://proceedings.neurips.cc/paper/2012/file/6aca97005c68f1206823815f66102863-Paper.pdf; (https://proceedings.neurips.cc/papers/search?q=large+scale+distributed+deep+networks)
Zuletzt aufgerufen am:	18. Dezember 2022

Weiterführende Quellen

- Neural Networks for Machine Learning - Overview of mini-batch gradient descent
- Adaptive Subgradient Methods for Online Learning and Stochastic Optimization
- No More Pesky Learning Rates
- ADADELTA: An Adaptive Learning Rate Method

- A fast natural Newton method
- Proceedings of the 31st International Conference on International Conference on Machine Learning - Volume 32
- Natural Gradient Works Efficiently in Learning