### Redes Neuronales

### Matias Vera - Juan Zuloaga

Centro de Simulación Computacional para Aplicaciones Tecnológicas

CSC Matias Vera Redes Neuronales 1 / 32

### Agenda

1 Redes Neuronales como aproximador universal

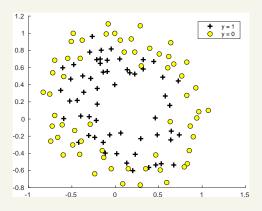
2 Deep World

3 ¿Cómo entrenar una deep net?

CSC Matias Vera Redes Neuronales 2 / 32

### Las soluciones lineales pueden ser insuficientes

¿Como reducir el riesgo empírico?



CSC Matias Vera Redes Neuronales 3 / 32

## Aproximación Universal

#### **Teorema**

Sea  $\mathcal{A} \subset \mathbb{R}^m$  un conjunto cerrado y acotado y sea  $g: \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ . Para cada función continua  $f: \mathcal{A} \to \mathbb{R}$  y  $\epsilon > 0$  existe un  $n \in \mathbb{N}$  y  $\{\mathbf{w}_i, b_i, \alpha_i\}_{i=1}^n$  con  $\mathbf{w}_i \in \mathbb{R}^m$  y  $b_i, \alpha_i \in \mathbb{R}$  para todo  $i = 1, \cdots, n$  tales que

$$\left| f(\mathbf{x}) - \sum_{i=1}^{n} \alpha_{i} g(\mathbf{w}_{i}^{\mathsf{T}} \mathbf{x} + b_{i}) \right| < \epsilon \qquad \forall \ \mathbf{x} \in \mathcal{A}$$

si y solo si g no es un polinomio.

Necesito funciones no lineales!

Leshno and Schocken 1993: "Multilayer feedforward networks with a nonpolynomial activation function can approximate any function".

CSC Matias Vera Redes Neuronales 4 / 32

### Aproximación Universal

#### **Teorema**

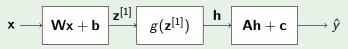
Sea  $\mathcal{A} \subset \mathbb{R}^m$  un conjunto cerrado y acotado y sea  $g : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ . Para cada función continua  $f : \mathcal{A} \to \mathbb{R}$  y  $\epsilon > 0$  existe un  $n \in \mathbb{N}$  y  $\{\mathbf{w}_i, b_i, \alpha_i\}_{i=1}^n$  con  $\mathbf{w}_i \in \mathbb{R}^m$  y  $b_i, \alpha_i \in \mathbb{R}$  para todo  $i = 1, \dots, n$  tales que

$$\left| f(\mathbf{x}) - \sum_{i=1}^{n} \alpha_i g(\mathbf{w}_i^\mathsf{T} \mathbf{x} + b_i) \right| < \epsilon \qquad \forall \ \mathbf{x} \in \mathcal{A}$$

si y solo si g no es un polinomio.

#### Necesito funciones no lineales!

### Regresión



Leshno and Schocken 1993: "Multilayer feedforward networks with a nonpolynomial activation function can approximate any function".

CSC Matias Vera Redes Neuronales 4 / 32

### Aproximación Universal

#### **Teorema**

Sea  $\mathcal{A} \subset \mathbb{R}^m$  un conjunto cerrado y acotado y sea  $g : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ . Para cada función continua  $f : \mathcal{A} \to \mathbb{R}$  y  $\epsilon > 0$  existe un  $n \in \mathbb{N}$  y  $\{\mathbf{w}_i, b_i, \alpha_i\}_{i=1}^n$  con  $\mathbf{w}_i \in \mathbb{R}^m$  y  $b_i, \alpha_i \in \mathbb{R}$  para todo  $i = 1, \dots, n$  tales que

$$\left| f(\mathbf{x}) - \sum_{i=1}^{n} \alpha_{i} g(\mathbf{w}_{i}^{T} \mathbf{x} + b_{i}) \right| < \epsilon \qquad \forall \ \mathbf{x} \in \mathcal{A}$$

si y solo si g no es un polinomio.

#### Necesito funciones no lineales!

#### Clasificación



Leshno and Schocken 1993: "Multilayer feedforward networks with a nonpolynomial activation function can approximate any function".

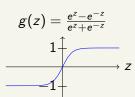
CSC Matias Vera Redes Neuronales 4 / 32

# Funciones de Activación g

$$g(z) = \frac{1}{1 + e^{-z}}$$

$$1 \xrightarrow{} \qquad \qquad z$$

Sigmoide



Tangente hiperbólica

$$g(z) = \max\{z, 0\}$$

$$1 \xrightarrow{\downarrow}$$

$$-1 +$$

$$ReLU$$

$$g(z) = \begin{cases} z & z \ge 0 \\ \alpha(e^z - 1) & z < 0 \end{cases}$$

$$1 \xrightarrow{1} \qquad z$$

$$-1 \xrightarrow{} \qquad \alpha - \text{ELU}$$

CSC Matias Vera Redes Neuronales 5 / 32

# Agenda

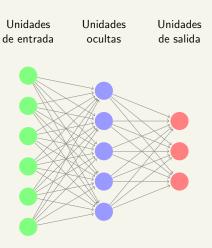
1 Redes Neuronales como aproximador universal

2 Deep World

¿Cómo entrenar una deep net?

CSC Matias Vera Redes Neuronales 6 / 32

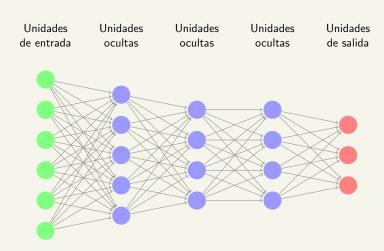
## Deep Learning



Red neuronal básica

CSC Matias Vera Redes Neuronales 7 / 32

# Deep Learning



**Deep Learning Architecture** 

CSC Matias Vera Redes Neuronales 7/32

### ¿Por que muchos layers?

Los teoremas de aproximación universal nos hablan de la existencia de parámetros, no como elegirlos ni cuantas unidades ocultas usar. Algunas ventajas del deep-world:

- Las redes profundas suelen ser más eficientes en la etapa del entrenamiento y tienen mejores propiedades de generalización.
- La cantidad de unidades ocultas necesarias para aproximar suele decaer exponencialmente con la profundidad de la red.
- En algunos casos se puede demostrar que la cantidad de unidades ocultas necesarias crece exponencialmente con la dimensión de la entrada (otra vez la maldición).

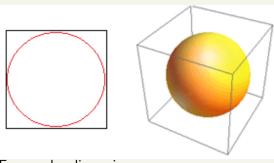
CSC Matias Vera Redes Neuronales 8 / 32

### Características del Deep-world

- Big Data (A partir de 30K o 40K muestras)
- Alta dimensionalidad de la entrada (mayor a 10)
- Cantidad de parámetros a entrenar mayor (o al menos comparable) que la cantidad de muestras.
- Suficientes hiperparámetros para considerar hacer un barrido en grilla una mala opción.

CSC Matias Vera Redes Neuronales 9/32

### La maldición de la dimensionalidad



- 2d:  $\frac{\pi r^2}{(2r)^2} \approx 78.5\%$
- 3d:  $\frac{\frac{4}{3}\pi r^3}{(2r)^3} \approx 52.3\%$
- 10d:  $\frac{r_{0}^{10}\pi^{5}}{(2r)^{10}}\approx 0.25\%$

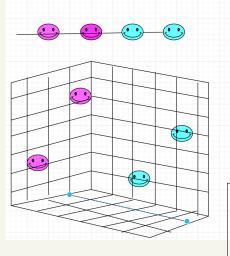
#### En grandes dimensiones:

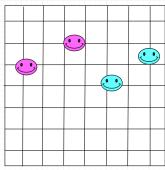
- Los puntos están muy lejos.
- Las estructuras son muy sparce.
- La distancia euclidea no es buena métrica.
- La "necesidad" de muestras crece exponencialmente con la dimensión.
- La cantidad de mínimos locales crece exponencialmente con la dimensión.

CSC Matias Vera Redes Neuronales 10 / 32

### La maldición de la dimensionalidad

La maldición también aplica a los hiperparámetros



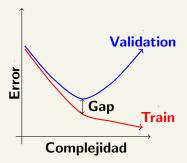


La necesidad de pruebas crece exponencialmente con la cantidad de hiperparámetros!

CSC Matias Vera Redes Neuronales 11 / 32

# Compromiso Sesgo/Varianza

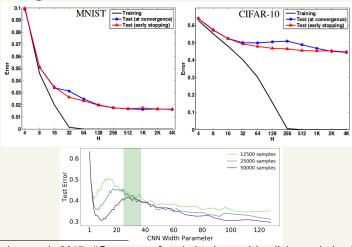
#### Aprendizaje Clásico



CSC Matias Vera Redes Neuronales 12 / 32

# Compromiso Sesgo/Varianza

#### **Deep Learning**



Neyshabur et al. 2017: "Geometry of optimization and implicit regularization in deep learning".

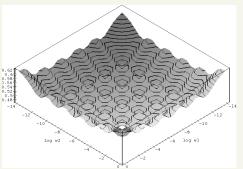
Nakkiran et al. 2019: "Deep Double Descent: Where bigger models and more data hurt".

CSC Matias Vera Redes Neuronales 12 / 32

### La sobreparametrización

Otros impactos de la sobreparametrización:

- Muchos saddle points.
- La cantidad de mínimos locales es exponencial con la dimensión.
- Incluso los mínimos globales no son todos iguales para la generalización.



Auer et al. 1995: "Exponentially many local minima for single neurons".

CSC Matias Vera Redes Neuronales 13 / 32

## Agenda

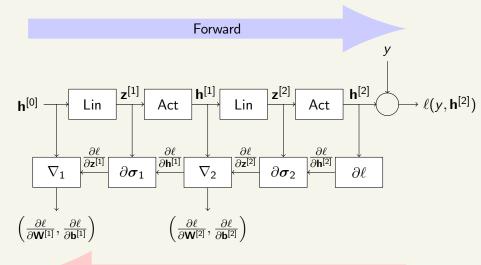
Redes Neuronales como aproximador universal

2 Deep World

3 ¿Cómo entrenar una deep net?

CSC Matias Vera Redes Neuronales 14/3

## Forward-Backward Propagation



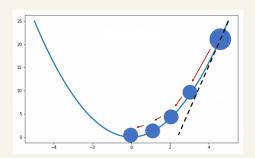
#### Backward

CSC Matias Vera Redes Neuronales 15 / 32

### Gradiente Descendente

$$\frac{\partial J(\theta)}{\partial \theta} = \frac{1}{n_{\text{tr}}} \sum_{i=1}^{n_{\text{tr}}} \frac{\partial \ell(y_i, \mathbf{h}_i^{[L]})}{\partial \theta} = \mathbf{0}$$

$$\theta_{t+1} = \theta_t - \alpha \frac{\partial J(\theta_t)}{\partial \theta}$$



Si tengo muchos datos y muchos parámetros es muy pesado

CSC Matias Vera Redes Neuronales 16 / 32

### Gradiente Descendente Estocástico

Pero computar  $n_{tr}$  gradientes en cada iteración es pesado, entonces surge la versión estocástica:

$$W_{t+1} = W_t - \alpha \left. \frac{\partial L(X_t, Y_t; w)}{\partial w} \right|_{w = W_t}$$

donde en cada paso se sortea una nueva variable aleatoria (es decir muestras distintas) introduciendo una aleatoriedad al problema. Algunas características son:

- El cómputo es mucho mas liviano que la versión clásica.
- La aleatoriedad me hace converger en una "bola de ruido" (problema de sesgo).
- Mejora la capacidad de generalización agregando ruido al proceso de aprendizaje.

CSC Matias Vera Redes Neuronales 17 / 32

### Supuestos

- Los pares  $\{(X_i,Y_i)\}_{i\in\mathbb{N}}\sim (X,Y)$  son i.i.d. e independientes de  $W_0$ .
- Los gradientes están acotados como:

$$\mathbb{E}\left[\left\|\frac{\partial L(X,Y;w)}{\partial w}\right\|^2\right] \leq M \qquad \forall \ w \in \Theta$$

• La magnitud  $\mathcal{L}(w) = \mathbb{E}[L(X,Y;w)]$  es fuertemente convexa. Es decir que existe  $\mu > 0$  tal que

$$\mathcal{L}(w_1) \ge \mathcal{L}(w_2) + \langle \nabla \mathcal{L}(w_1); w_1 - w_2 \rangle + \frac{\mu}{2} ||w_1 - w_2||^2$$

para todo  $w_1$  y  $w_2$ .

CSC Matias Vera Redes Neuronales 18 / 32

G. Turinici: "The convergence of the Stochastic Gradient Descent (SGD): a self-contained proof", 2021.

### Solución óptima

La condición de convexidad (fuerte) asegura que existe un único  $w^*$  tal que  $\mathcal{L}(w^*) \leq \mathcal{L}(w)$  para todo  $w \in \Theta$ .

CSC Matias Vera Redes Neuronales 19 / 32

### Solución óptima

La condición de convexidad (fuerte) asegura que existe un único  $w^*$  tal que  $\mathcal{L}(w^*) \leq \mathcal{L}(w)$  para todo  $w \in \Theta$ .

$$\mathbb{E}\left[\|W_{t+1} - w^*\|^2\right] = \mathbb{E}\left[\left\|W_t - w^* - \alpha \frac{\partial L(X_t, Y_t; w)}{\partial w}\right|_{w = W_t}\right\|^2\right]$$

$$= \mathbb{E}\left[\|W_t - w^*\|^2\right] + \alpha^2 \mathbb{E}\left[\left\|\frac{\partial L(X_t, Y_t; w)}{\partial w}\right|_{w = W_t}\right\|^2\right]$$

$$-2\alpha \mathbb{E}\left[\left\langle\frac{\partial L(X_t, Y_t; w)}{\partial w}\right|_{w = W_t}; W_t - w^*\right\}\right]$$

CSC Matias Vera Redes Neuronales 19 / 32

### Solución óptima

La condición de convexidad (fuerte) asegura que existe un único  $w^*$  tal que  $\mathcal{L}(w^*) \leq \mathcal{L}(w)$  para todo  $w \in \Theta$ .

$$\mathbb{E}\left[\|W_{t+1} - w^*\|^2\right] = \mathbb{E}\left[\left\|W_t - w^* - \alpha \frac{\partial L(X_t, Y_t; w)}{\partial w}\right|_{w = W_t}\right\|^2\right]$$

$$= \mathbb{E}\left[\|W_t - w^*\|^2\right] + \alpha^2 \mathbb{E}\left[\left\|\frac{\partial L(X_t, Y_t; w)}{\partial w}\right|_{w = W_t}\right\|^2\right]$$

$$-2\alpha \mathbb{E}\left[\left\langle\frac{\partial L(X_t, Y_t; w)}{\partial w}\right|_{w = W_t}; W_t - w^*\right\}\right]$$

### Independencia

Como  $W_t = f(W_0, \{(X_k, Y_k)_{k=1}^{t-1}\})$ , es independiente del par  $(X_t, Y_t)$ .

CSC Matias Vera Redes Neuronales 19 / 32

$$\mathbb{E}\left[\left\|\frac{\partial L(X_t,Y_t;w)}{\partial w}\right|_{w=W_t}\right\|^2\left\|W_t=w\right\|=\mathbb{E}\left[\left\|\frac{\partial L(X,Y;w)}{\partial w}\right\|^2\right]\leq M$$

CSC Matias Vera Redes Neuronales 20 / 32

$$\mathbb{E}\left[\left\|\frac{\partial L(X_t,Y_t;w)}{\partial w}\right|_{w=W_t}\right\|^2\left\|W_t=w\right\|=\mathbb{E}\left[\left\|\frac{\partial L(X,Y;w)}{\partial w}\right\|^2\right]\leq M$$

$$\mathbb{E}\left[\left\langle \frac{\partial L(X_t, Y_t; w)}{\partial w} \Big|_{w=W_t}; W_t - w^* \right\rangle \middle| W_t = w\right]$$

$$= \mathbb{E}\left[\left\langle \frac{\partial L(X_t, Y_t; w)}{\partial w}; w - w^* \right\rangle\right]$$

$$= \left\langle \nabla \mathcal{L}(w); w - w^* \right\rangle$$

$$\geq \mathcal{L}(w) - \mathcal{L}(w^*) + \frac{\mu}{2} ||w - w^*||^2$$

$$\geq \frac{\mu}{2} ||w - w^*||^2$$

CSC Matias Vera Redes Neuronales 20 / 32

$$\mathbb{E} \left[ \|W_{t+1} - w^*\|^2 \right] \le \mathbb{E} \left[ \|W_t - w^*\|^2 \right] + \alpha^2 M - \alpha \mu \mathbb{E} \left[ \|W_t - w^*\|^2 \right]$$

$$= (1 - \alpha \mu) \mathbb{E} \left[ \|W_t - w^*\|^2 \right] + \alpha^2 M$$

CSC Matias Vera Redes Neuronales 21 / 32

$$\mathbb{E} \left[ \|W_{t+1} - w^*\|^2 \right] \le \mathbb{E} \left[ \|W_t - w^*\|^2 \right] + \alpha^2 M - \alpha \mu \mathbb{E} \left[ \|W_t - w^*\|^2 \right]$$

$$= (1 - \alpha \mu) \mathbb{E} \left[ \|W_t - w^*\|^2 \right] + \alpha^2 M$$

Bola de ruido

$$\limsup_{t \to \infty} \mathbb{E}\left[\|W_t - w^*\|^2\right] \le \frac{\alpha M}{\mu}$$

Tradeoff entre bola de ruido y velocidad de convergencia!

CSC Matias Vera Redes Neuronales 21 / 32

# Gradiente Descendente Estocástico por minibatch

¿No habrá nada intermedio?

$$W_{t+1} = W_t - \alpha \left. \frac{1}{B} \sum_{i=1}^{B} \frac{\partial L\left(X_t^{(i)}, Y_t^{(i)}, w\right)}{\partial w} \right|_{W_t = w}$$

donde en cada paso se sortean B una nuevas variables aleatorias i.i.d. El "batchsize" B nos permite explotar el tradeoff según nuestra conveniencia. Del análisis de la bola de ruido, lo único que cambia es M:

$$\mathbb{E}\left[\left\|\frac{\partial L(X_t, Y_t; w)}{\partial w}\right|_{w=W_t}\right\|^2\right] \leq \frac{M}{B}$$

Obteniendo una bola de ruido de la forma:

$$\limsup_{t \to \infty} \mathbb{E}\left[\|\theta_t - \theta^*\|^2\right] \leq \frac{\alpha M}{B\mu}$$

CSC Matias Vera Redes Neuronales 22 / 32

### Sobre el batchsize

- Batchs grandes proporcionan una estimación más precisa del gradiente, pero de forma mas pesada a nivel computacional.
- Las arquitecturas multicore poseen un mínimo valor del batchsize debajo del cual no hay reducción en el tiempo de procesamiento.
- Si todos las muestras del batch se procesan en paralelo, entonces la cantidad de memoria escala con el tamaño del batch, limitando superiormente el batchsize.
- Algunos tipos de hardware logran un mejor tiempo de ejecución con tamaños específicos de arrays. Especialmente las GPU suelen ser más rápidas con batchsize que sean potencias de 2.
- Los batchs pequeños ofrecen un efecto de regularización debido al ruido que se agrega al proceso de aprendizaje. La generalización suele ser mejor para un batchsize de 1. Pero batchs tan pequeños requieren bajos learning rates lo que puede demorar el proceso de aprendizaje.

Goodfellow, Bengio and Courville: "Deep Learning", chapter 8.

CSC Matias Vera Redes Neuronales 23 / 32

### Sobre el batchsize

### En la práctica...

Se utilizan datos distintos hasta que se acaban, realizando en principio  $n_{\rm tr}/B$  pasos del algoritmo. Como esto suele ser insuficiente, los datos se mezclan y se vuelven a usar (construyendo batches distintos). A cada pasada de todos los datos se lo llama epoch.

Hiperparámetros de esta etapa:

- Batch size (B)
- Número de epochs (o condición de stop)

CSC Matias Vera Redes Neuronales 24 / 32

### Diferentes tipos de optimizadores

Variantes del gradiente descendente estocástico (SGD) implementadas en Keras:

- SGD with momentum
- Nesterov
- RMSProp
- Adagrad
- Adadelta
- Adam
- Adamax
- AMSGrad
- Nadam

CSC Matias Vera Redes Neuronales 25 / 32

# Momentum: Exponentially Weighted Averages

### Objetivo

Bajar la bola de ruido con alta velocidad de aprendizaje ( $\alpha$  grande) sin aumentar la carga computacional (batchsize moderado). Es decir, buscar reemplazos para  $\mathbf{g}_t = \frac{1}{B} \sum_{i=1}^B \frac{\partial L_i(\theta_{t-1})}{\partial \theta}$ .

**Momentum** (no le creas tanto):  $\mathbf{m}_t = \beta_1 \mathbf{m}_{t-1} + (1 - \beta_1) \mathbf{g}_t$  con  $\beta_1 \in [0, 1)$  (típico  $\beta_1 = 0.9$ ).

CSC Matias Vera Redes Neuronales 26 / 32

# Momentum: Exponentially Weighted Averages

### Objetivo

Bajar la bola de ruido con alta velocidad de aprendizaje ( $\alpha$  grande) sin aumentar la carga computacional (batchsize moderado). Es decir, buscar reemplazos para  $\mathbf{g}_t = \frac{1}{B} \sum_{i=1}^B \frac{\partial L_i(\theta_{t-1})}{\partial \theta}$ .

**Momentum** (no le creas tanto):  $\mathbf{m}_t = \beta_1 \mathbf{m}_{t-1} + (1 - \beta_1) \mathbf{g}_t$  con  $\beta_1 \in [0,1)$  (típico  $\beta_1 = 0.9$ ).

$$\mathbf{m}_5 = (1 - \beta_1)\mathbf{g}_5 + (1 - \beta_1)\beta_1\mathbf{g}_4 + (1 - \beta_1)\beta_1^2\mathbf{g}_3 + (1 - \beta_1)\beta_1^3\mathbf{g}_2 + (1 - \beta_1)\beta_1^4\mathbf{g}_1$$

CSC Matias Vera Redes Neuronales 26 / 32

# Momentum: Exponentially Weighted Averages

### Objetivo

Bajar la bola de ruido con alta velocidad de aprendizaje ( $\alpha$  grande) sin aumentar la carga computacional (batchsize moderado). Es decir, buscar reemplazos para  $\mathbf{g}_t = \frac{1}{B} \sum_{i=1}^B \frac{\partial L_i(\theta_{t-1})}{\partial \theta}$ .

**Momentum** (no le creas tanto):  $\mathbf{m}_t = \beta_1 \mathbf{m}_{t-1} + (1 - \beta_1) \mathbf{g}_t$  con  $\beta_1 \in [0, 1)$  (típico  $\beta_1 = 0.9$ ).

$$\mathbf{m}_5 = (1 - \beta_1)\mathbf{g}_5 + (1 - \beta_1)\beta_1\mathbf{g}_4 + (1 - \beta_1)\beta_1^2\mathbf{g}_3 + (1 - \beta_1)\beta_1^3\mathbf{g}_2 + (1 - \beta_1)\beta_1^4\mathbf{g}_1$$

$$\mathbf{m}_t = (1 - \beta_1) \sum_{k=0}^{t-1} \beta_1^k \mathbf{g}_{t-k}$$

Respuesta:  $\theta_t = \theta_{t-1} - \alpha \mathbf{m}_t$ .

**Learning rate efectivo:** Fue atenuado  $\alpha_{ef} = \alpha(1 - \beta_1)$ .

$$\theta_t = \theta_{t-1} - \alpha \beta_1 \mathbf{m}_{t-1} - \alpha (1 - \beta_1) \mathbf{g}_t$$

CSC Matias Vera Redes Neuronales 26 / 32

#### **Bias Correction**

Momentum subestima mucho los gradientes en las primeras iteraciones:

$$\mathbf{m}_1 = (1 - \beta_1)\mathbf{g}_1 = 0.1\mathbf{g}_1$$
  
 $\mathbf{m}_2 = (1 - \beta_1)\mathbf{g}_2 + (1 - \beta_1)\beta_1\mathbf{g}_1 = 0.1\mathbf{g}_2 + 0.09\mathbf{g}_1$ 

CSC Matias Vera Redes Neuronales 27 / 32

### **Bias Correction**

Momentum subestima mucho los gradientes en las primeras iteraciones:

$$egin{aligned} \mathbf{m}_1 &= (1 - eta_1)\mathbf{g}_1 = 0.1\mathbf{g}_1 \ \mathbf{m}_2 &= (1 - eta_1)\mathbf{g}_2 + (1 - eta_1)eta_1\mathbf{g}_1 = 0.1\mathbf{g}_2 + 0.09\mathbf{g}_1 \end{aligned}$$

Solución: Verifiquemos que sea una combinación convexa de gradientes.

$$\hat{\mathbf{m}}_{t} = \frac{(1 - \beta_{1}) \sum_{k=0}^{t-1} \beta_{1}^{k} \mathbf{g}_{t-k}}{(1 - \beta_{1}) \sum_{k=0}^{t-1} \beta_{1}^{k}} = \frac{\mathbf{m}_{t}}{1 - \beta_{1}^{t}}$$

Respuesta:  $\theta_t = \theta_{t-1} - \alpha \hat{\mathbf{m}}_t$ .

**Learning rate efectivo:** Atenuación paulatina  $\alpha_{\text{ef}} = \alpha \frac{1-\beta_1}{1-\beta_1^{\dagger}}$ .

CSC Matias Vera Redes Neuronales 27 / 32

## Nesterov's accelerated gradient

Classical momentum:  $\theta_t = \theta_{t-1} - \alpha \beta_1 \mathbf{m}_{t-1} - \alpha (1 - \beta_1) \frac{\partial L(\theta_{t-1})}{\partial \theta}$ 

CSC Matias Vera Redes Neuronales 28 / 32

Sutskever et al. 2013: "On the importance of initialization and momentum in deep learning".

## Nesterov's accelerated gradient

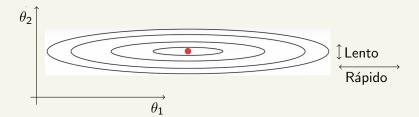
Classical momentum: 
$$\theta_t = \theta_{t-1} - \alpha \beta_1 \mathbf{m}_{t-1} - \alpha (1 - \beta_1) \frac{\partial L(\theta_{t-1})}{\partial \theta}$$
  
Nesterov momentum:  $\theta_t = \theta_{t-1} - \alpha \beta_1 \mathbf{m}_{t-1} - \alpha (1 - \beta_1) \frac{\partial L(\theta_{t-1} - \alpha \beta_1 \mathbf{m}_{t-1})}{\partial \theta}$ 

La idea del gradiente es que me diga cuanto y hacia donde me tengo que mover para acercarme al mínimo. Nesterov usa toda la información que tengo actualmente antes de elegir cuanto y hacia donde moverse.

CSC Matias Vera Redes Neuronales 28 / 32

Sutskever et al. 2013: "On the importance of initialization and momentum in deep learning".

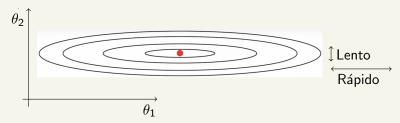
# Adaptive Gradient (Adagrad)



CSC Matias Vera Redes Neuronales 29 / 3

Duchi et al. 2011: "Adaptive subgradient methods for online learning and stochastic optimization".

# Adaptive Gradient (Adagrad)



**Solución:** Usar la historia del gradiente para escalarlo. Se define un parámetro que evite errores numéricos  $\epsilon \sim 10^{-8}$ .

Respuesta: 
$$\theta_t = \theta_{t-1} - \alpha \frac{\mathbf{g}_t}{\sqrt{\sum_{\tau=1}^t \mathbf{g}_\tau^2} + \epsilon}$$
.

Learning rate efectivo: Se adapta a cada componente

$$\alpha_{\text{ef}} = \frac{\alpha}{\sqrt{\sum_{\tau=1}^t \mathbf{g}_\tau^2} + \epsilon}.$$

CSC Matias Vera Redes Neuronales 29 / 32

Duchi et al. 2011: "Adaptive subgradient methods for online learning and stochastic optimization".

# Root Mean Square Propagation

### RMSProp

Exponentially weighted averages para los cuadrados:  $\mathbf{v}_t = \beta_2 \mathbf{v}_{t-1} + (1 - \beta_2) \mathbf{g}_t^2$ .

Respuesta:  $\theta_t = \theta_{t-1} - \alpha \frac{\mathbf{g}_t}{\sqrt{\mathbf{v}_t + \epsilon}}$ .

Learning rate efectivo:  $\alpha_{ef} = \frac{\alpha}{\sqrt{V_e + \epsilon}}$ .

### RMSProp with bias correction

Misma idea:  $\hat{\mathbf{v}}_t = \frac{\mathbf{v}_t}{1-\beta_2^t}$ .

Respuesta:  $\theta_t = \theta_{t-1} - \alpha \frac{\mathbf{g}_t}{\sqrt{\hat{\mathbf{v}}_t} + \epsilon}$ . Learning rate efectivo:  $\alpha_{\text{ef}} = \frac{\alpha}{\sqrt{\hat{\mathbf{v}}_t} + \epsilon}$ .

#### **ADAM**

Combinar RMSProp con momentum (ambos con bias correction).

Respuesta:  $\theta_t = \theta_{t-1} - \alpha \frac{\mathbf{m}_t}{\sqrt{\hat{\mathbf{v}}_t} + \epsilon}$ .

Learning rate efectivo:  $\alpha_{\text{ef}} = \alpha \frac{1-\beta_1}{(1-\beta_1!)(\sqrt{\hat{\mathbf{v}_{i-}}}+\epsilon)}$ .

Kingma-Lei Ba 2015: "ADAM: A method for stochastic optimization".

Matias Vera Redes Neuronales 30 / 32

### Variantes de ADAM

#### **ADAMAX**

Misma idea de RMSProp pero con norma infinito:  $\mathbf{u}_t = \max\{\beta_2 \mathbf{u}_{t-1}, |\mathbf{g}_t|\}.$ 

Respuesta:  $\theta_t = \theta_{t-1} - \alpha \frac{\hat{\mathbf{m}}_t}{\mathbf{u}_t}$ .

Learning rate efectivo:  $\alpha_{\text{ef}} = \alpha \frac{1-\beta_1}{(1-\beta_1^t)\mathbf{u}_t}$ .

#### **AMSGrad**

Variante sobre los  $v_t$  que corrige algunos problemas de convergencia propios de RMSProp.

#### **NADAM**

Si ADAM es RMSProp con momentum, NADAM es RMSProp con Nesterov momentum.

Kingma-Lei Ba 2015: "ADAM: A method for stochastic optimization".

Reddi et al. 2018: "On the convergence of ADAM and beyond".

Dozat 2016: "Incorporating Nesterov Momentum into ADAM".

CSC Matias Vera Redes Neuronales 31 / 32

### Adadelta

Deja que el learning rate se elija solo!

$$\mathbf{s}_{t} = \beta_{2}\mathbf{s}_{t-1} + (1 - \beta_{2})\mathbf{g}_{t}^{2}$$
$$\Delta_{t} = \beta_{2}\Delta_{t-1} + (1 - \beta_{2})\theta_{t}^{2}$$
$$\theta_{t} = \theta_{t-1} - \alpha_{0}\sqrt{\frac{\Delta_{t-1} + \epsilon}{\mathbf{s}_{t} + \epsilon}}\mathbf{g}_{t}$$

Learning rate efectivo:  $\alpha_{\rm ef} = \alpha_0 \sqrt{\frac{\Delta_{t-1} + \epsilon}{{\bf s}_t + \epsilon}}.$ 

#### Remark

 $\alpha_0$  NO ES el learning-rate! Se suele setear en  $\alpha_0=1$  (mientras que los  $\alpha$  suelen ser bastante más chicos). De hecho tanto en el artículo original como en algunas implementaciones no está este hiperparámetro.

Zeiler 2012: "ADADELTA: An adaptive learning rate method".

CSC Matias Vera Redes Neuronales 32 / 32