1 优化算法

1.1 梯度下降

1.1.1 批梯度下降

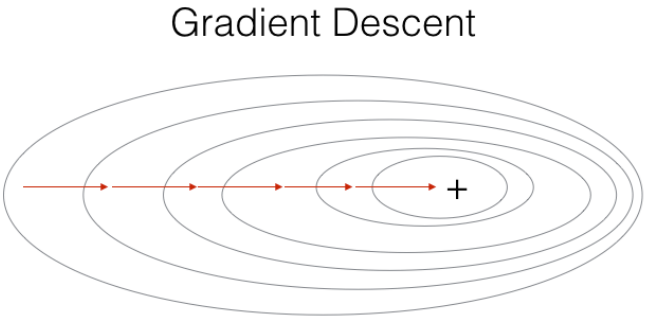
batch 梯度下降法（批梯度下降法，我们之前一直使用的梯度下降法）是最常用的梯度下降形式，即同时处理整个训练集。其在更新参数时使用所有的样本来进行更新。具体过程如下：

$$
\begin{aligned}
X &= [x^{(1)}, x^{(2)}, \dots, x^{(m)}] \\
z^{[1]} &= w^{[1]}X + b^{[1]} \\
a^{[1]} &= g^{[1]}(z^{[1]}) \\
&\cdots \quad \cdots \\
z^{[l]} &= w^{[l]}a^{[l-1]} + b^{[l]} \\
a^{[l]} &= g^{[l]}(z^{[l]})
\end{aligned} \tag{1}
$$

$$
J(\theta) = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}\mathcal{L}(\hat{y}^{(i)}, y^{(i)}) + \frac{\lambda}{2m}\sum_{l=1}^{L}||w^{[l]}||_F^2
$$

$$
\theta_j := \theta_j - \alpha\frac{\partial J(\theta)}{\partial \theta_j}
$$

示意图如下：



- 优点：最小化所有训练样本的损失函数，得到全局最优解；易于并行实现
- 缺点：当样本数目很多时，训练过程会很慢

对整个训练集进行梯度下降法的时候，我们必须处理整个训练数据集，然后才能进行一步梯度下降，即每一步梯度下降法需要对整个训练集进行一次处理，如果训练数据集很大的时候，处理速度就会比较慢。

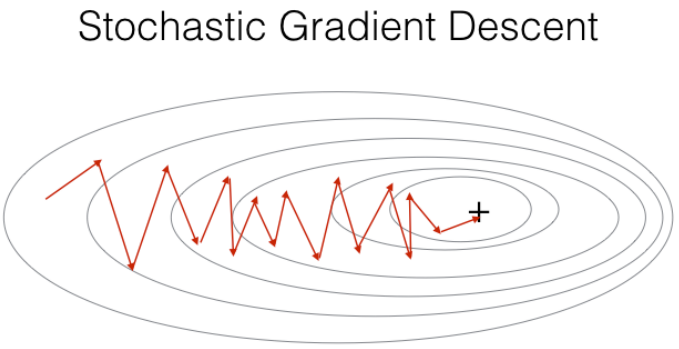
但是如果每次处理训练数据的一部分即进行梯度下降法，则我们的算法速度会执行的更快。而处理的这些一小部分训练子集即称为 mini-batch。

1.1.2 随机梯度下降

随机梯度下降法（Stochastic Gradient Descent，SGD）与批梯度下降原理类似，区别在于每次通过一个样本来迭代更新。其具体过程为：

$$
\begin{aligned}
X &= [x^{(1)}, x^{(2)}, \dots, x^{(m)}] \\
for \quad i &= 1, 2, \dots, m \{ \\
z^{[1]} &= w^{[1]} x^{(i)} + b^{[1]} \\
a^{[1]} &= g^{[1]}(z^{[1]}) \\
&\dots \quad \dots \\
z^{[l]} &= w^{[l]} a^{[l-1]} + b^{[l]} \\
a^{[l]} &= g^{[l]}(z^{[l]}) \\
J(\theta) &= \mathcal{L}(\hat{y}^{(i)}, y^{(i)}) + \frac{\lambda}{2} \sum_{l=1}^{L} ||w^{[l]}||_F^2 \\
\theta_j &:= \theta_j - \alpha \frac{\partial J(\theta)}{\partial \theta_j} \}
\end{aligned}
\tag{2}
$$

示意图如下：



- 优点：训练速度快。
- 缺点：最小化每条样本的损失函数，最终的结果往往是在全局最优解附近，不是全局最优；不易于并行实现。

1.1.3 小批量梯度下降

Mini-Batch 梯度下降法（小批量梯度下降法）每次同时处理单个的 mini-batch，其他与 batch 梯度下降法一致。

使用 batch 梯度下降法，对整个训练集的一次遍历只能做一个梯度下降；而使用 Mini-Batch 梯度下降法，对整个训练集的一次遍历（称为一个 epoch）能做 mini-batch 个数个梯度下降。之后，可以一直遍历训练集，直到最后收敛到一个合适的精度。具体过程为：

$$
X = [x^{\{1\}}, x^{\{2\}}, \dots, x^{\{k=\frac{m}{t}\}}] \tag{3}
$$

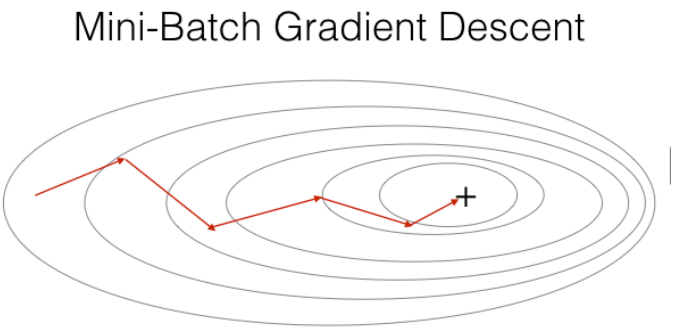
其中：

$$
\begin{aligned}
x^{\{1\}} &= x^{(1)}, x^{(2)}, \dots, x^{(t)} \\
x^{\{2\}} &= x^{(t+1)}, x^{(t+2)}, \dots, x^{(2t)} \\
&\dots \quad \dots
\end{aligned}
\tag{4}
$$

之后：

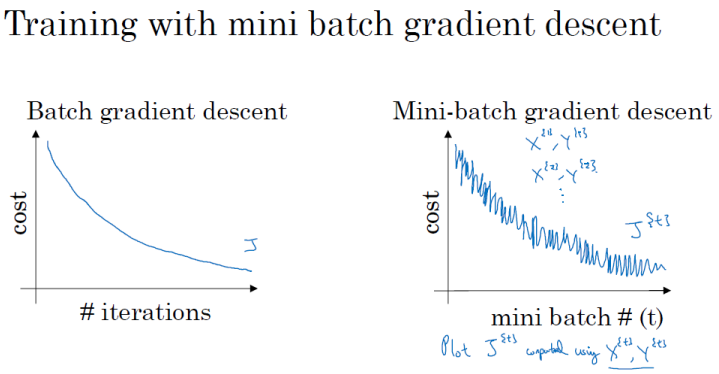
$$
\begin{aligned}
&for \quad i = 1, 2, \dots, k \ \{ \\
&\quad z^{[1]} = w^{[1]} x^{(i)} + b^{[1]} \\
&\quad a^{[1]} = g^{[1]}(z^{[1]}) \\
&\quad \dots \quad \dots \\
&\quad z^{[l]} = w^{[l]} a^{[l-1]} + b^{[l]} \\
&\quad a^{[l]} = g^{[l]}(z^{[l]}) \\
&J(\theta) = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^{k} \mathcal{L}(\hat{y}^{(i)}, y^{(i)}) + \frac{\lambda}{2k} \sum_{l=1}^{L} ||w^{[l]}||_F^2 \\
&\quad \theta_j := \theta_j - \alpha \frac{\partial J(\theta)}{\partial \theta_j} \ \}
\end{aligned}
\tag{5}
$$

示意图如下：



理解 Mini-batch

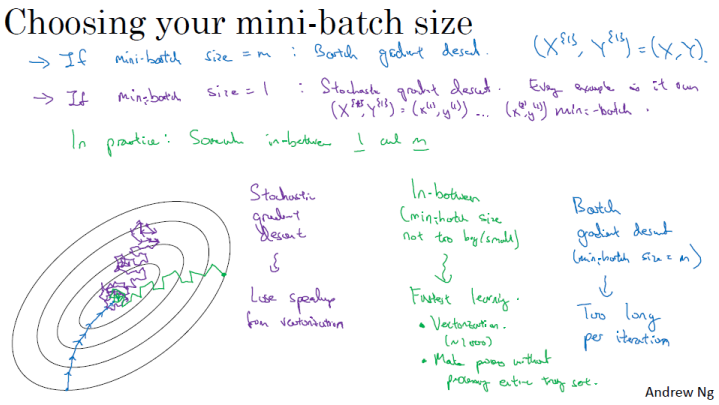
batch 梯度下降法和 Mini-batch 梯度下降法代价函数的变化趋势如下：



batch 的不同大小

- mini-batch 的大小为 1，即是随机梯度下降法（stochastic gradient descent），每个样本都是独立的 mini-batch；
- mini-batch 的大小为 m（数据集大小），即是 batch 梯度下降法；

下图是以上三者的比较：



mini-batch 大小的选择

- 如果训练样本的大小比较小，如 m ⩽ 2000 时，选择 batch 梯度下降法；
- 如果训练样本的大小比较大，选择 Mini-Batch 梯度下降法。为了和计算机的信息存储方式相适应，代码在 mini-batch 大小为 2 的幂次时运行要快一些。典型的大小为 2^6、2^7、...、2^9；
- mini-batch 的大小要符合 CPU/GPU 内存。

mini-batch 的大小也是一个重要的超变量，需要根据经验快速尝试，找到能够最有效地减少成本函数的值。

1.2 梯度下降优化

1.2.1 指数加权平均

指数加权平均（Exponentially Weight Average）是一种常用的序列数据处理方式，计算公式为：

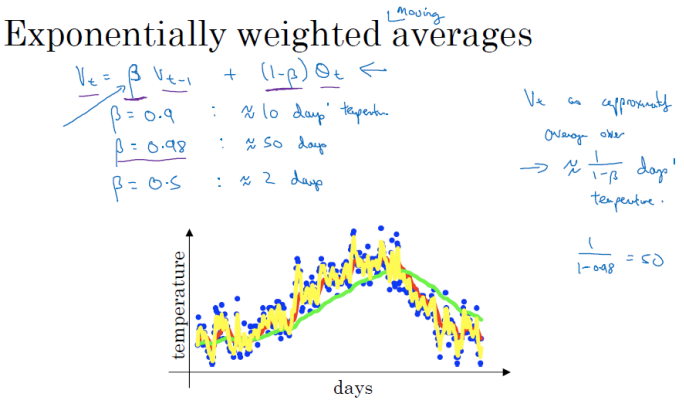
$$S_t = \begin{cases} Y_1, & t = 1 \\ \beta S_{t-1} + (1-\beta) Y_t, & t > 1 \end{cases} \tag{6}$$

其中 Y_t 为 t 下的实际值，Y_t 为 t 下加权平均后的值，β 为权重值。

指数加权平均数在统计学中被称为“指数加权移动平均值”。

理解指数加权平均

下面是反应温度变化的大致趋势的数据图：



给定一个时间序列，例如伦敦一年每天的气温值，图中蓝色的点代表真实数据。对于一个即时的气温值，取权重值 β 为 0.9，根据求得的值可以得到图中的红色曲线，它反映了气温变化的大致趋势。

当取权重值 β=0.98 时，可以得到图中更为平滑的绿色曲线。而当取权重值 β=0.5 时，得到图中噪点更多的黄色曲线。**β 越大相当于求取平均利用的天数越多**，曲线自然就会越平滑而且越滞后。

当 β 为 0.9 时，

$$
\begin{aligned}
v_0 &= 0 \\
v_1 &= 0.9v_0 + 0.1\theta_1 \\
&\cdots \quad \cdots \\
v_{100} &= 0.1\theta_{100} + 0.1 \times 0.9\theta_{99} + 0.1 \times 0.9^2\theta_{98} \ \ldots \\
v_t &= 0.9v_{t-1} + 0.1\theta_t
\end{aligned} \tag{7}
$$

其中 θi 指第 i 天的实际数据。所有 θ 前面的系数（不包括 0.1）相加起来为 1 或者接近于 1，这些系数被称作**偏差修正（Bias Correction）**

根据函数极限的一条定理：

$$
\lim_{\epsilon \to 0}(1-\epsilon)^{\frac{1}{\epsilon}} = \frac{1}{e} \approx 0.368 \tag{8}
$$

当 β 为 0.9 时，可以当作把过去 10 天的气温指数加权平均作为当日的气温，因为 10 天后权重已经下降到了当天的 1/3 左右。同理，当 β 为 0.98 时，可以把过去 50 天的气温指数加权平均作为当日的气温。

因此，在计算当前时刻的平均值时，只需要前一天的平均值和当前时刻的值：

$$
v_t = \beta v_{t-1} + (1-\beta)\theta_t \tag{9}
$$

考虑到代码，只需要不断更新 v 即可：

$$
v := \beta v + (1-\beta)\theta_t \tag{10}
$$

指数平均加权并不是最精准的计算平均数的方法，你可以直接计算过去 10 天或 50 天的平均值来得到更好的估计，但缺点是保存数据需要占用更多内存，执行更加复杂，计算成本更加高昂。

指数加权平均数公式的好处之一在于它只需要一行代码，且占用极少内存，因此效率极高，且节省成本。

指数加权平均的偏差修正

当进行指数加权平均计算时，第一个值 v_0 被初始化为 0，这样将在前期的运算用产生一定的偏差。为了矫正偏差，需要在每一次迭代后用以下式子进行偏差修正：

$$
v_t := \frac{v_t}{1-\beta^t} \tag{11}
$$

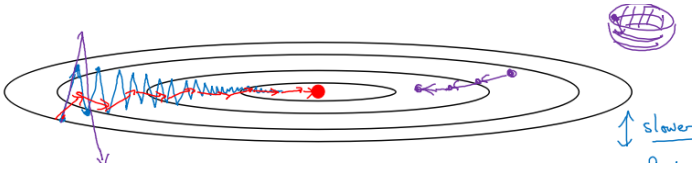
随着 t 的增大，β 的 t 次方趋近于 0。因此当 t 很大的时候，偏差修正几乎没有作用，但是在前期学习可以帮助更好的预测数据。在实际过程中，一般会忽略前期偏差的影响。

1.2.2 动量梯度下降

动量梯度下降（Gradient Descent with Momentum）是计算梯度的指数加权平均数，并利用该值来更新参数值。具体过程为：

$$
\begin{aligned}
v_{dw} &= \beta v_{dw} + (1-\beta)dw \\
v_{db} &= \beta v_{db} + (1-\beta)db \\
w &:= w - \alpha v_{dw} \\
b &:= b - \alpha v_{db}
\end{aligned} \tag{12}
$$

其中，将动量衰减参数 β 设置为 0.9 是超参数的一个常见且效果不错的选择。当 β 被设置为 0 时，显然就成了 batch 梯度下降法。



进行一般的梯度下降将会得到图中的蓝色曲线，由于存在上下波动，减缓了梯度下降的速度，因此只能使用一个较小的学习率进行迭代。如果用较大的学习率，结果可能会像紫色曲线一样偏离函数的范围。

而使用动量梯度下降时，通过累加过去的梯度值来减少抵达最小值路径上的波动，加速了收敛，因此在横轴方向下降得更快，从而得到图中红色的曲线。

当前后梯度方向一致时，动量梯度下降能够加速学习；而前后梯度方向不一致时，动量梯度下降能够抑制震荡。

我们不需要进行偏差修正，因为在 10 次迭代之后，移动平均已经不再是一个具有偏差的预测。

因此实际在使用梯度下降法或者动量梯度下降法时，不会同时进行偏差修正。

形象理解

将成本函数想象为一个碗状，从顶部开始运动的小球向下滚，其中 dw，db 想象成球的加速度；而 v_{dw}、v_{db} 相当于速度。

小球在向下滚动的过程中，因为加速度的存在速度会变快，但是由于 β 的存在，其值小于 1，可以认为是摩擦力，所以球不会无限加速下去。

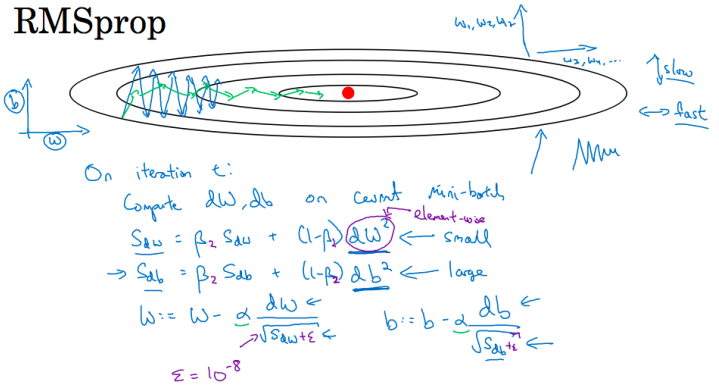
1.2.3 RMSProp 算法

RMSProp（Root Mean Square Prop，均方根支）算法是在对梯度进行指数加权平均的基础上，引入平方和平方根。具体过程为：

$$
\begin{aligned}
s_{dw} &= \beta s_{dw} + (1-\beta) dw^2 \\
s_{db} &= \beta s_{db} + (1-\beta) db^2 \\
w &:= w - \alpha \frac{dw}{\sqrt{s_{dw} + \epsilon}} \\
b &:= b - \alpha \frac{db}{\sqrt{s_{db} + \epsilon}}
\end{aligned}
\tag{13}
$$

其中，ϵ 是一个实际操作时加上的较小数（例如 10^{-8}），为了防止分母太小而导致的数值不稳定。

当 dw 或 db 较大时，dw^2、db^2 会较大，造成 s_{dw}、s_{db} 也会较大，最终使 $\frac{dw}{\sqrt{s_{dw}}}$、$\frac{db}{\sqrt{s_{db}}}$ 较小，减小了抵达最小值路径上的摆动。



RMSProp 有助于减少抵达最小值路径上的摆动，并允许使用一个更大的学习率 α，从而加快算法学习速度。并且，它和 Adam 优化算法已被证明适用于不同的深度学习网络结构。

注意，β 也是一个超参数。

1.2.4 Adam 优化算法

Adam 优化算法（Adaptive Moment Estimation，自适应矩估计）基本上就是将 Momentum 和 RMSProp 算法结合在一起，通常有超越二者单独时的效果。具体过程如下：

首先进行初始化：

$$v_{dW} = 0, s_{dW} = 0, v_{db} = 0, s_{db} = 0 \tag{14}$$

用每一个 mini-batch 计算 dW、db，第 t 次迭代时：

$$\begin{aligned} v_{dW} &= \beta_1 v_{dW} + (1-\beta_1) dW \\ v_{db} &= \beta_1 v_{db} + (1-\beta_1) db \\ s_{dW} &= \beta_2 s_{dW} + (1-\beta_2)(dW)^2 \\ s_{db} &= \beta_2 s_{db} + (1-\beta_2)(db)^2 \end{aligned} \tag{15}$$

一般使用 Adam 算法时需要计算偏差修正：

$$\begin{aligned} v_{dW}^{corrected} &= \frac{v_{dW}}{1-{\beta_1}^t} \\ v_{db}^{corrected} &= \frac{v_{db}}{1-{\beta_1}^t} \\ s_{dW}^{corrected} &= \frac{s_{dW}}{1-{\beta_2}^t} \\ s_{db}^{corrected} &= \frac{s_{db}}{1-{\beta_2}^t} \end{aligned} \tag{16}$$

所以，更新 W、b 时有：

$$\begin{aligned} W &:= W - \alpha \frac{v_{dW}^{corrected}}{\sqrt{s_{dW}^{corrected}} + \epsilon} \\ b &:= b - \alpha \frac{v_{db}^{corrected}}{\sqrt{s_{db}^{corrected}} + \epsilon} \end{aligned} \tag{17}$$

超参数的选择

Adam 优化算法有很多的超参数，其中

- 学习率 α：需要尝试一系列的值，来寻找比较合适的；
- β1：常用的缺省值为 0.9；
- β2：Adam 算法的作者建议为 0.999；
- ϵ：不重要，不会影响算法表现，Adam 算法的作者建议为 10^{-8}；

β1、β2、ϵ 通常不需要调试。

1.2.5 学习率衰减

如果设置一个固定的学习率 α，在最小值点附近，由于不同的 batch 中存在一定的噪声，因此不会精确收敛，而是始终在最小值周围一个较大的范围内波动。

随着时间推移，慢慢减少学习率 α 的大小。在初期 α 较大时，迈出的步长较大，能以较快的速度进行梯度下降，而后期逐步减小 α 的值，减小步长，有助于算法的收敛，更容易接近最优解。

- 最常用的学习率衰减方法：

$$\alpha = \frac{1}{1 + decay\_rate * epoch\_num} * \alpha_0 \tag{18}$$

  其中，decay_rate 为衰减率（超参数），epoch_num 为将所有的训练样本完整过一遍的次数。

- 指数衰减：

$$\alpha = 0.95^{epoch\_num} * \alpha_0 \tag{19}$$

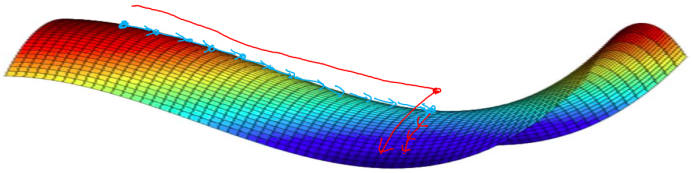
- 其他：

$$\alpha = \frac{k}{\sqrt{epoch\_num}} * \alpha_0 \tag{20}$$

- 离散下降

对于较小的模型，也有人会在训练时根据进度手动调小学习率。

1.3 局部最优问题



鞍点（saddle）是函数上的导数为零，但不是轴上局部极值的点。当我们建立一个神经网络时，通常梯度为零的点是上图所示的鞍点，而非局部最小值。减少损失的难度也来自误差曲面中的鞍点，而不是局部最低点。因为在一个具有高维度空间的成本函数中，如果梯度为 0，那么在每个方向，成本函数或是凸函数，或是凹函数。而所有维度均需要是凹函数的概率极小，因此在低维度的局部最优点的情况并不适用于高维度。

- 在训练较大的神经网络、存在大量参数，并且成本函数被定义在较高的维度空间时，困在极差的局部最优中是不大可能的；
- 鞍点附近的平稳段会使得学习非常缓慢，而这也是动量梯度下降法、RMSProp 以及 Adam 优化算法能够加速学习的原因，它们能帮助尽早走出平稳段。