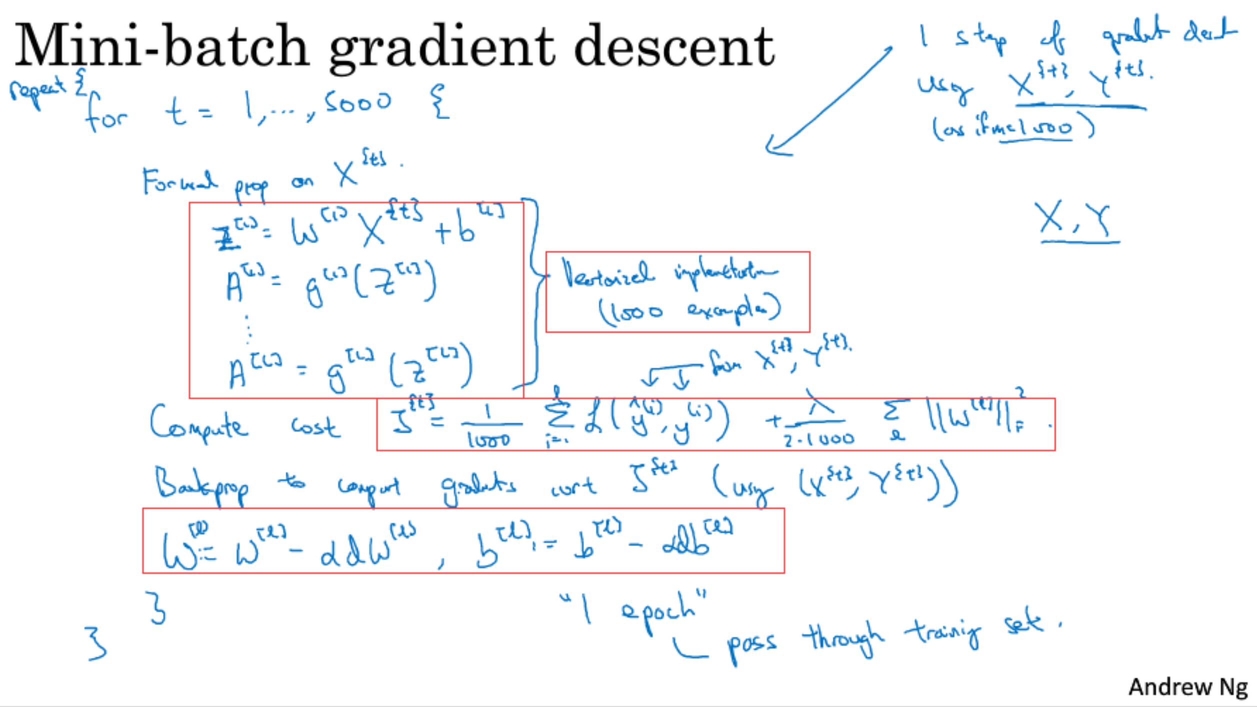
改善深层神经网络：超参数调试、正则化以及优化 第二周 优化算法

2.1 Mini-batch 梯度下降法

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，如有500万或5000万的训练数据，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。

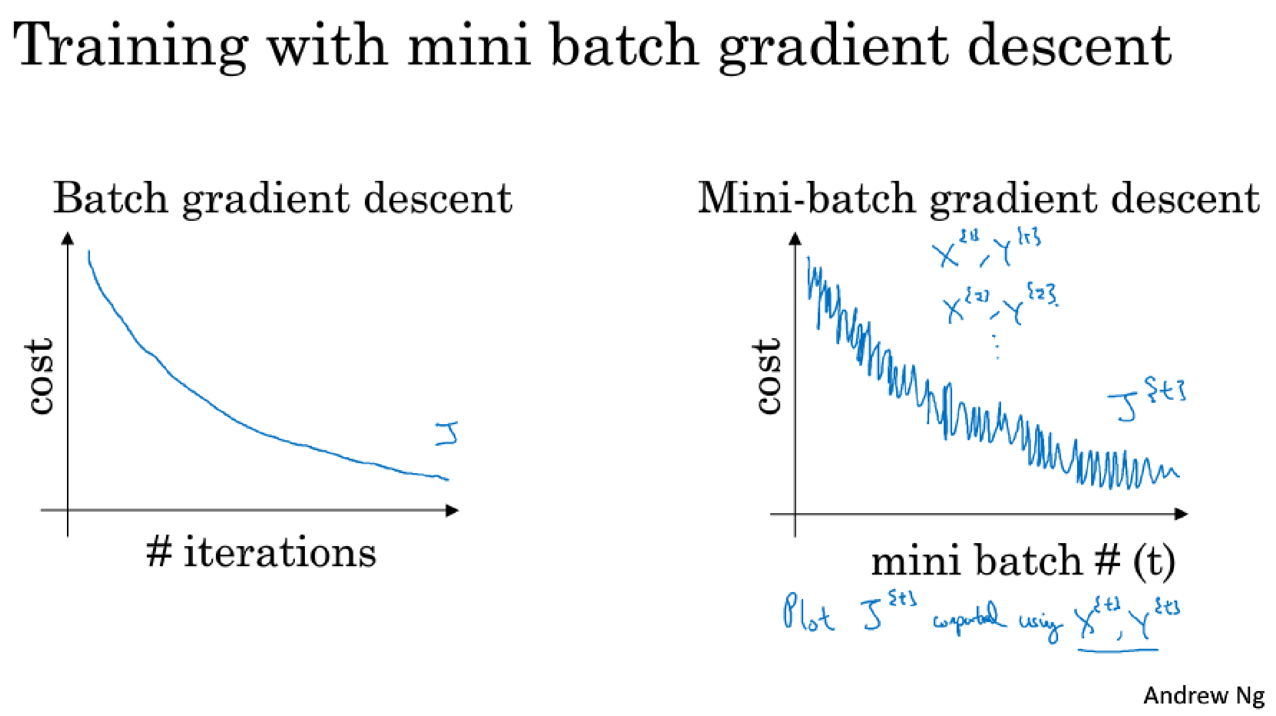
算法核心：



对于普通的梯度下降法，一个epoch只能进行一次梯度下降；而对于Mini-batch梯度下降法，一个epoch可以进行Mini-batch的个数次梯度下降。

不同size大小的比较

普通的batch梯度下降法和Mini-batch梯度下降法代价函数的变化趋势，如下图所示：



batch梯度下降：

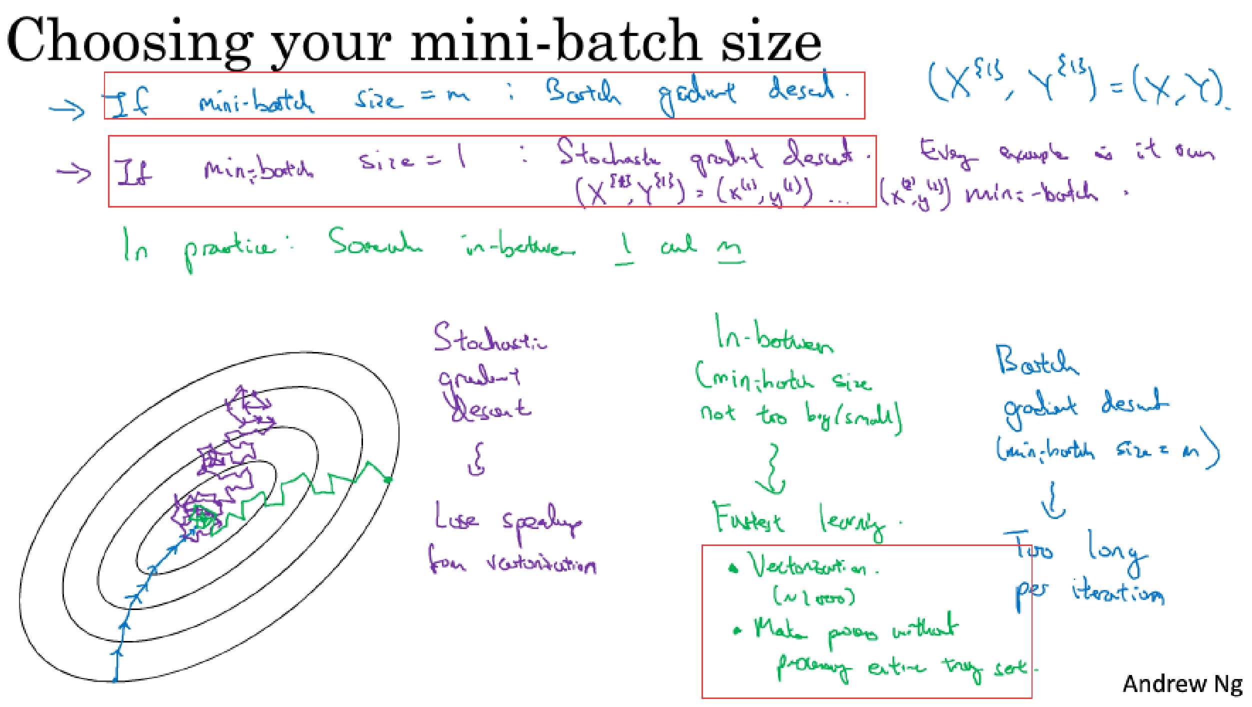
- 对所有m个训练样本执行一次梯度下降，每一次迭代时间较长；
- Cost function 总是向减小的方向下降。

随机梯度下降：

- 对每一个训练样本执行一次梯度下降，但是丢失了向量化带来的计算加速；
- Cost function总体的趋势向最小值的方向下降，但是无法到达全局最小值点，呈现波动的形式。

Mini-batch梯度下降：

- 选择一个1<size<m 的合适的size进行Mini-batch梯度下降，可以实现快速学习，也应用了向量化带来的好处。
- Cost function的下降处于前两者之间。



Mini-batch 大小的选择

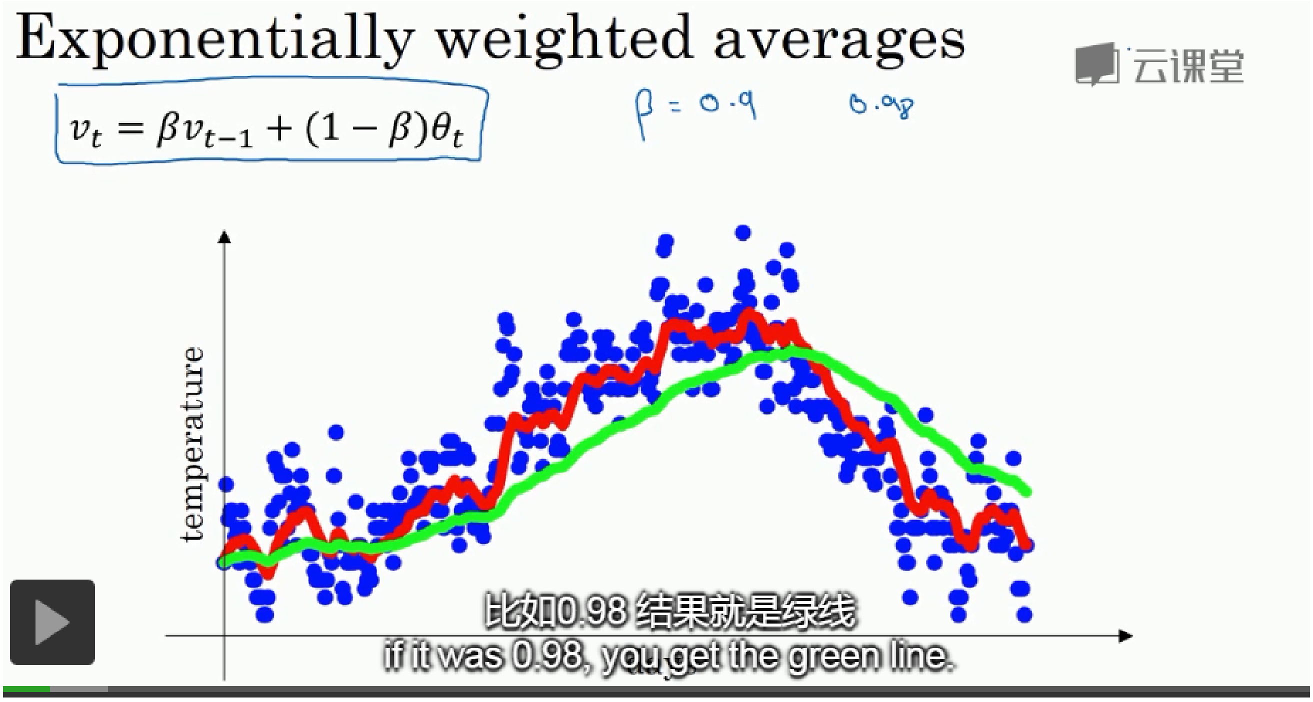
- 如果训练样本的大小比较小时，如$m \leqslant 2000$时 —— 选择batch梯度下降法；
- 如果训练样本的大小比较大时，典型的大小为：
  2^6、2^7、$\cdots$、2^{10}；
- Mini-batch的大小要符合CPU/GPU内存。

2.2 指数加权平均

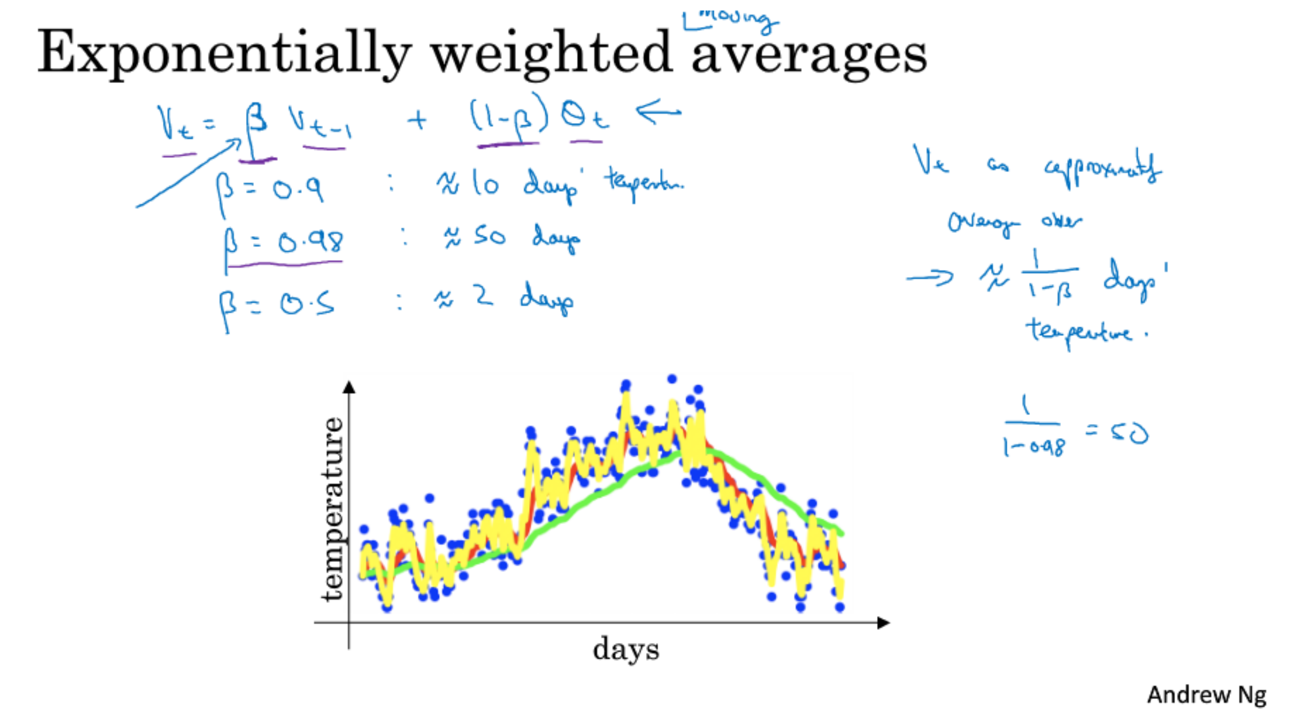
指数加权平均的关键函数：

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

下图是一个关于天数和温度的散点图：

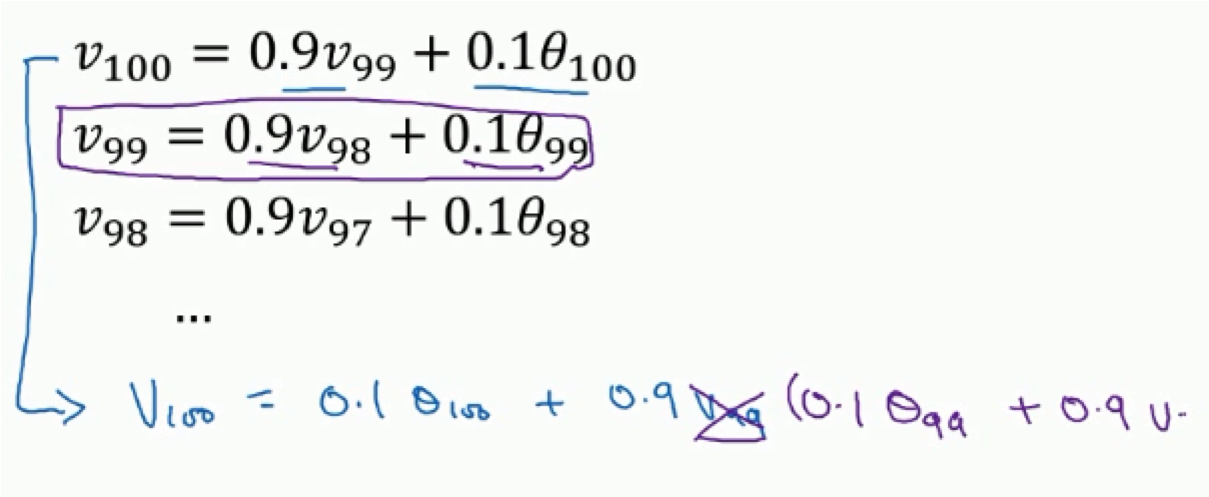


- 当β=0.9β=0.9时，指数加权平均最后的结果如图中红色线所示；
- 当β=0.98β=0.98时，指数加权平均最后的结果如图中绿色线所示；
- 当β=0.5β=0.5时，指数加权平均最后的结果如下图中黄色线所示；



理解指数加权平均

例子，当β=0.9β=0.9时：



展开：

$$
\begin{aligned}
v_{100} &= 0.1\theta_{100} + 0.9(0.1\theta_{99} + 0.9(0.1\theta_{98} + 0.9v_{97})) \\
&= 0.1\theta_{100} + 0.1 \times 0.9\theta_{99} + 0.1 \times (0.9)^2\theta_{98} + 0.1 \times (0.9)^3\theta_{97} + \cdots
\end{aligned}
$$

上式中所有θθ前面的系数相加起来为1或者接近于1，称之为偏差修正。

总体来说存在，$(1-\varepsilon)^{1/\varepsilon} = \frac{1}{e}$，在我们的例子中，$1-\varepsilon = \beta = 0.9$，即$0.9^{10} \approx 0.35 \approx \frac{1}{e}$。相当于大约10天后，系数的峰值（这里是0.1）下降到原来的$\frac{1}{e}$，只关注了过去10天的天气。

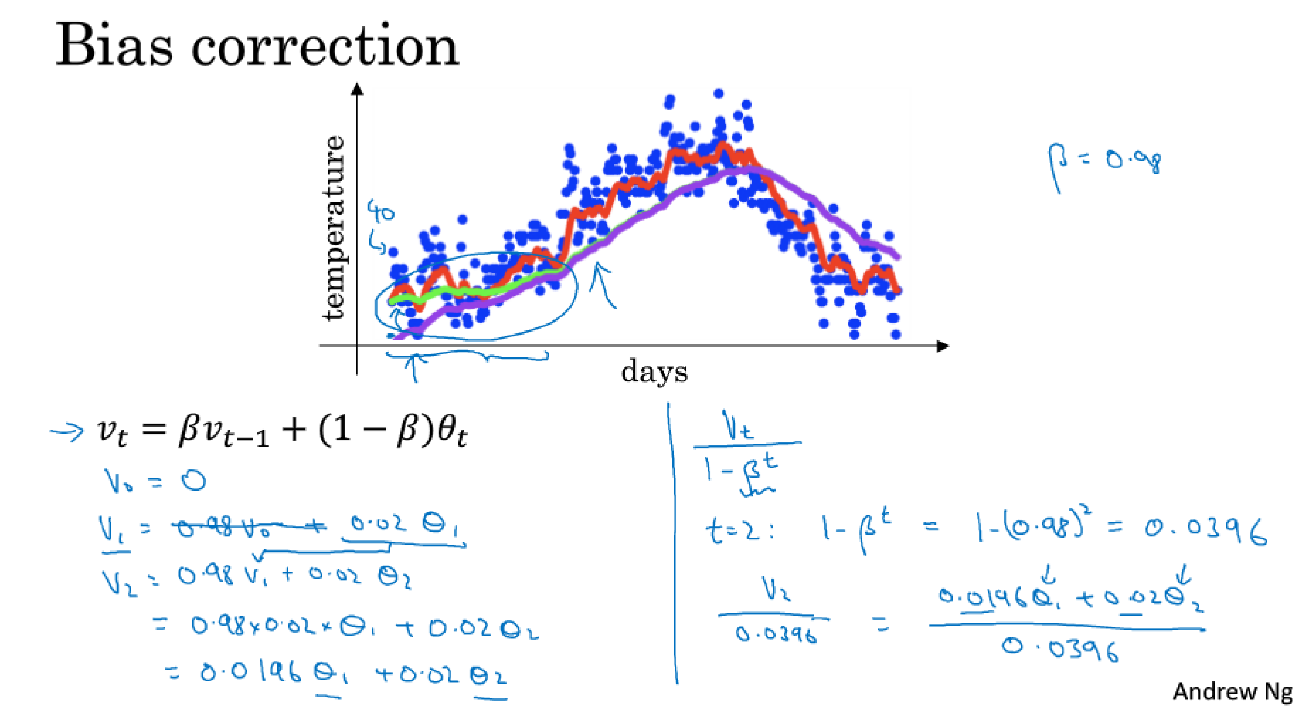
指数加权平均实现

$$
\begin{aligned}
v_0 &= 0 \\
v_1 &= \beta v_0 + (1-\beta)\theta_1 \\
v_2 &= \beta v_1 + (1-\beta)\theta_2 \\
v_3 &= \beta v_2 + (1-\beta)\theta_3 \\
&\cdots
\end{aligned}
$$

因为，在计算当前时刻的平均值，只需要前一天的平均值和当前时刻的值，所以在数据量非常大的情况下，指数加权平均在节约计算成本的方面是一种非常有效的方式，可以很大程度上减少计算机资源存储和内存的占用。

指数加权平均的偏差修正

在我们执行指数加权平均的公式时，当β=0.98β=0.98时，我们得到的并不是图中的绿色曲线，而是下图中的紫色曲线，其起点比较低。



原因：

$$
\begin{gathered}
v_0 = 0 \\
v_1 = 0.98 v_0 + 0.02\theta_1 = 0.02\theta_1 \\
v_2 = 0.98 v_1 + 0.02\theta_2 = 0.98 \times 0.02\theta_1 + 0.02\theta_2 = 0.0196\theta_1 + 0.02\theta_2
\end{gathered}
$$

如果第一天的值为如4040，则得到的v1=0.02×40=0.8，则得到的值要远小于实际值，后面几天的情况也会由于初值引起的影响，均低于实际均值。

偏差修正：

$$
使用\frac{v_t}{1-\beta^t}
$$

当t=2时：

$$
1-\beta^t = 1-(0.98)^2 = 0.0396
$$

$$
\frac{v_2}{0.0396} = \frac{0.0196\theta_1 + 0.02\theta_2}{0.0396}
$$

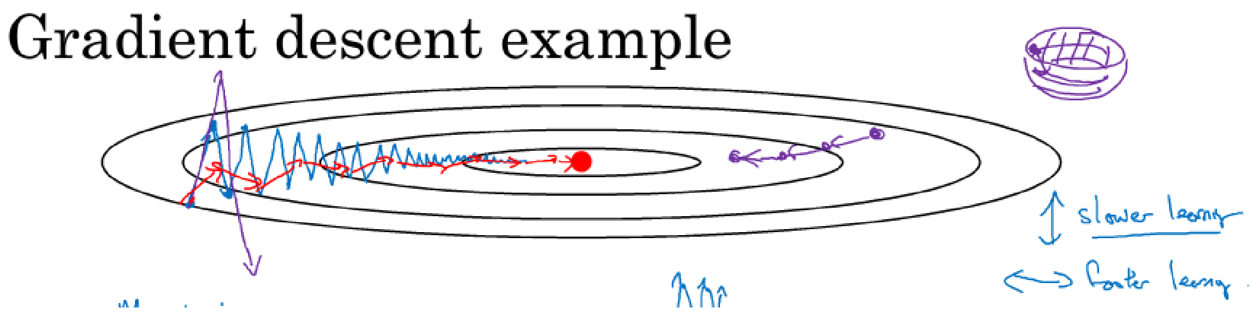
偏差修正得到了绿色的曲线，在开始的时候，能够得到比紫色曲线更好的计算平均的效果。随着tt逐渐增大，β^t近于0，所以后面绿色的曲线和紫色的曲线逐渐重合了。

虽然存在这种问题，但是在实际过程中，一般会忽略前期均值偏差的影响。

3. 动量（Momentum）梯度下降法

动量梯度下降的基本思想就是**计算梯度的指数加权平均数**，并利用该梯度来更新权重。

在我们优化 Cost function 的时候，以下图所示的函数图为例：

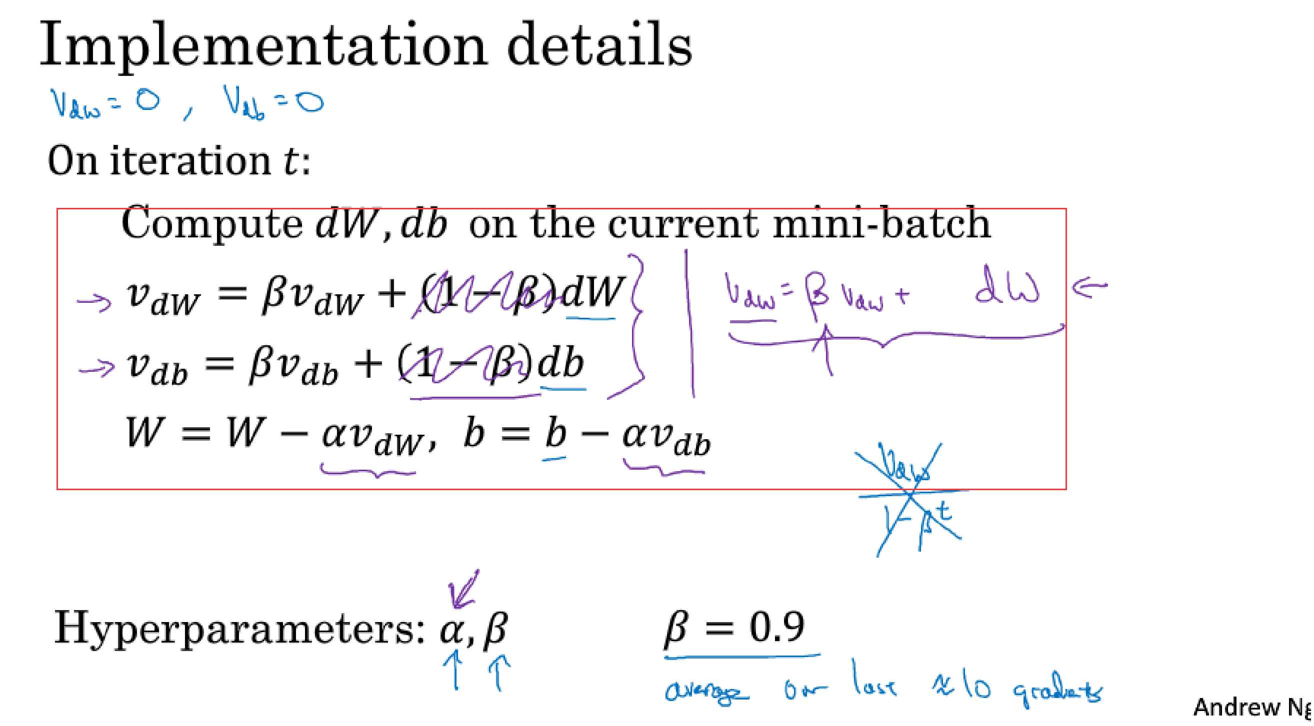


在利用梯度下降法来最小化该函数的时候，每一次迭代所更新的代价函数值如图中蓝色线所示在上下波动，而这种幅度比较大波动，减缓了梯度下降的速度，而且我们只能使用一个较小的学习率来进行迭代。

如果用较大的学习率，结果可能会如紫色线一样偏离函数的范围，所以为了避免这种情况，只能用较小的学习率。

但是我们又希望在如图的纵轴方向梯度下降的缓慢一些，不要有如此大的上下波动，在横轴方向梯度下降的快速一些，使得能够更快的到达最小值点，而这里用动量梯度下降法既可以实现，如红色线所示。

算法实现



ββ常用的值是0.9。

在我们进行动量梯度下降算法的时候，由于使用了指数加权平均的方法。原来在纵轴方向上的上下波动，经过平均以后，接近于0，纵轴上的波动变得非常的小；但在横轴方向上，所有的微分都指向横轴方向，因此其平均值仍然很大。最终实现红色线所示的梯度下降曲线。

算法本质解释

在对应上面的计算公式中，将Cost function想象为一个碗状，想象从顶部往下滚球，其中：

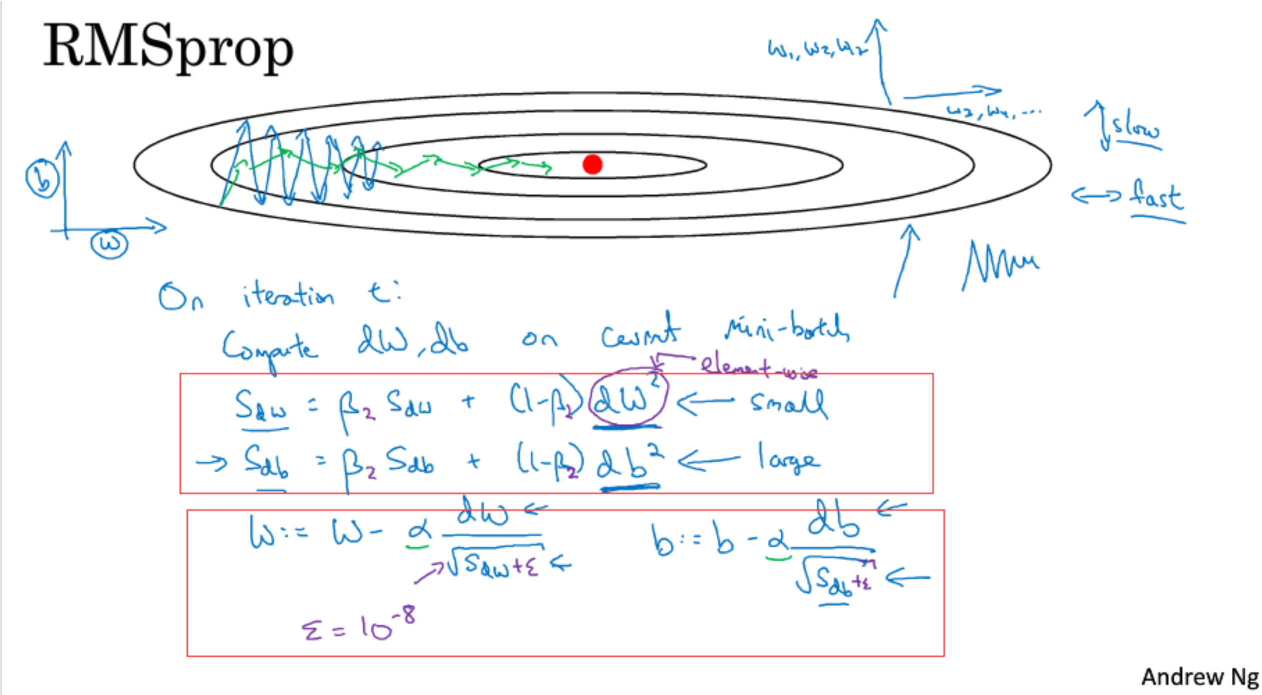
- 微分项dw,dbdw,db想象为球提供的加速度；
- 动量项vdw,vdbvdw,vdb相当于速度；

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ββ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。

2.4 RMSprop

除了上面所说的**Momentum**梯度下降法，**RMSprop**（root mean square prop）也是一种可以加快梯度下降的算法。

同样算法的样例实现如下图所示：



这里假设参数b的梯度处于纵轴方向，参数w的梯度处于横轴方向（当然实际中是处于高维度的情况），利用RMSprop算法，可以减小某些维度梯度更新波动较大的情况，如图中蓝色线所示，使其梯度下降的速度变得更快，如图绿色线所示。

在如图所示的实现中，RMSprop将微分项进行平方，然后使用平方根进行梯度更新，同时为了确保算法不会除以0，平方根分母中在实际使用会加入一个**很小的值如**ε=10−8。

5. Adam 优化算法

Adam 优化算法的基本思想就是将 Momentum 和 RMSprop 结合起来形成的一种适用于不同深度学习结构的优化算法。

算法实现

- 初始化：$V_{dw}=0$，$S_{dw}=0$，$V_{db}=0$，$S_{db}=0$
- 第t次迭代：
  - Compute dw，db on the current mini-batch
  - $V_{dw}=\beta_1 V_{dw}+(1-\beta_1)dw$，$V_{db}=\beta_1 V_{db}+(1-\beta_1)db$ <–"Momentum"
  - $S_{dw}=\beta_2 S_{dw}+(1-\beta_2)(dw)^2$，$S_{db}=\beta_2 S_{db}+(1-\beta_2)(db)^2$ <–"RMSprop"
  - $V_{dw}^{corrected}=V_{dw}/(1-\beta_1^t)$，$V_{db}^{corrected}=V_{db}/(1-\beta_1^t)$ <– 偏差修正
  - $S_{dw}^{corrected}=S_{dw}/(1-\beta_2^t)$，$S_{db}^{corrected}=S_{db}/(1-\beta_2^t)$ <– 偏差修正
  - $w:=w-\alpha\frac{V_{dw}^{corrected}}{\sqrt{S_{dw}^{corrected}}+\varepsilon}$，$b:=b-\alpha\frac{V_{db}^{corrected}}{\sqrt{S_{db}^{corrected}}+\varepsilon}$

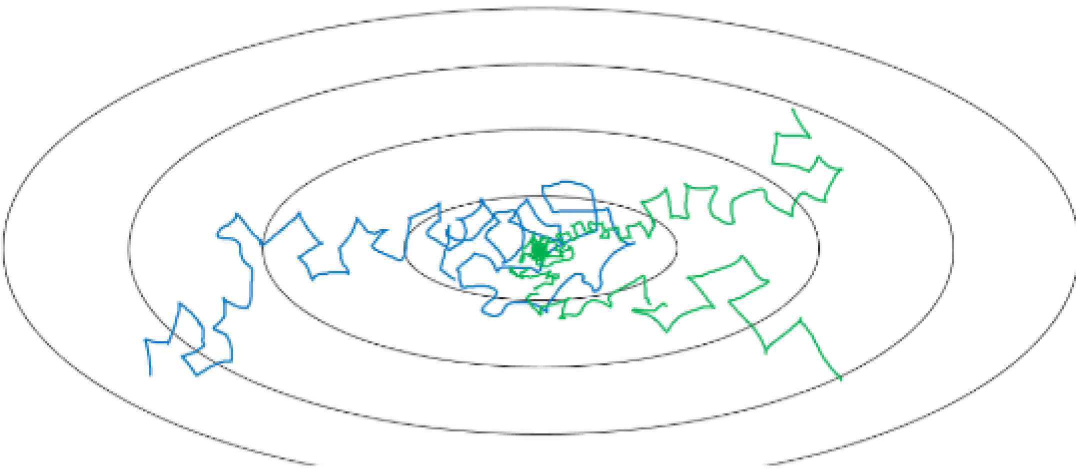
超参数的选择

- α：需要进行调试；
- β_1：常用缺省值为0.9，dw的加权平均；
- β_2：推荐使用0.999，dw^2的加权平均值；
- ε：推荐使用10^{-8}。

6. 学习率的衰减

在我们利用 mini-batch 梯度下降法来寻找Cost function的最小值的时候，如果我们设置一个固定的学习速率αα，则算法在到达最小值点附近后，由于不同batch中存在一定的噪声，使得不会精确收敛，而一直会在一个最小值点较大的范围内波动，如下图中蓝色线所示。

但是如果我们使用学习率衰减，逐渐减小学习速率αα，在算法开始的时候，学习速率还是相对较快，能够相对快速的向最小值点的方向下降。但随着αα的减小，下降的步伐也会逐渐变小，最终会在最小值附近的一块更小的区域里波动，如图中绿色线所示。



学习率衰减的实现

- 常用：

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

- 指数衰减：

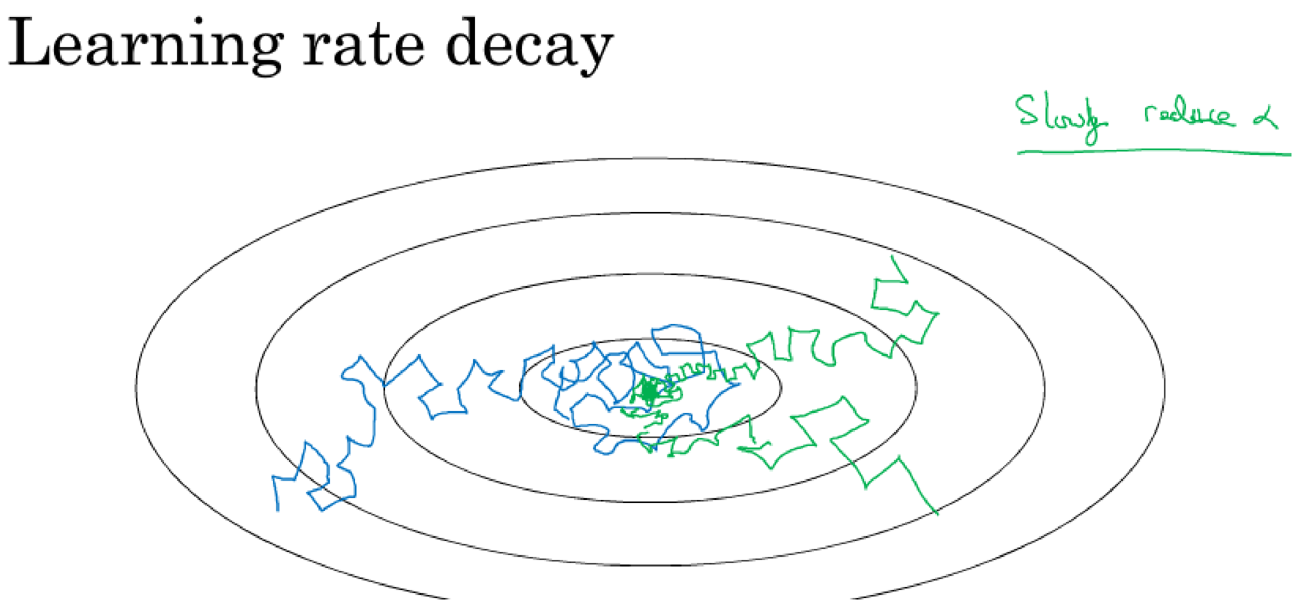
$$\alpha = 0.95^{epoch\_num} \alpha_0$$

- 其他：

$$\alpha = \frac{k}{epoch\_num} \cdot \alpha_0$$

- 离散下降（不同阶段使用不同的学习速率）

6. 第一个问题，在一个具有高维度空间的函数中，如果梯度为0，那么在每个方向，Cost function可能是凸函数，也有可能是凹函数。但如果参数维度为2万维，想要得到局部最优解，那么所有维度均需要是凹函数，其概率为2−200002−20000，可能性非常的小。也就是说，在低纬度中的局部最优点的情况，并不适用于高纬度，我们在梯度为0的点更有可能是鞍点。
7. 在高纬度的情况下： * 几乎不可能陷入局部最小值点； * 处于鞍点的停滞区会减缓学习过程，利用如Adam等算法进行改善。



Learning rate decay

1 epoch = 1 pass through data.

$$\alpha = \frac{1}{1 + \underline{\text{decay-rate}} * \text{epoch-num}} \underline{\alpha_0}$$

$\alpha_0 = 0.2$
decay-rate = 1

Epoch	α
1	0.1
2	0.67
3	0.5
4	0.4
⋮	⋮