Day 76 Optimizers

優化器 Optimizers 簡介

陳宇春

出題教練

知識地圖 深度學習組成概念

CUPOY

優化器

深度神經網路
Supervised LearningDeep Neural Network (DNN)

- 簡介 Introduction
- 套件介紹 Tools: Keras
- **組成概念 Concept**
- 訓練技巧 Training Skill
- 應用案例 Application

卷積神經網路
Convolutional Neural Network (CNN)

- 簡介 introduction
- 套件練習 Practice with Keras
- 訓練技巧 Training Skill
- 電腦視覺 Computer Vision

深度學習組成概念
Concept of DNN

感知器概念簡介

本日知識點目標

- 了解 優化器 (optimizers) 的使用與程式樣貌
- 理解 優化器 (optimizers) 的用途
- 能從程式中辨識 優化器 (optimizers) 的參數特徵

什麼是優化算法 - Optimizer

CUPOY

- 機器學習算法當中，大部分算法的本質就是建立優化模型，通過最優化方法對目標函數進行優化從而訓練出最好的模型
- 優化算法的功能，是通過改善訓練方式，來最小化(或最大化)損失函數 E(x)
- 優化策略和算法，是用來更新和計算影響模型訓練和模型輸出的網絡參數，使其逼近或達到最優值

最常用的優化算法-Gradient Descent

- 最常用的優化算法是梯度下降
  - 這種算法使用各參數的梯度值來最小化或最大化損失函數E(x)。
- 通過尋找最小值，控制方差，更新模型參數，最終使模型收斂
- 複習一下，前兩堂提到的 Gradient Descent

$w_{i+1} = w_i - d_i \cdot \eta_i, \ \ i=0,1,\ldots$

- 參數 η 是學習率。這個參數既可以設置為固定值，也可以用一維優化方法沿著訓練的方向逐步更新計算
- 參數的更新分為兩步：第一步計算梯度下降的方向，第二步計算合適的學習

複習 – 動量Momentum

- 「一顆球從山上滾下來，在下坡的時候速度越來越快，遇到上坡，方向改變，速度下降」

- Vt :「方向速度」，會跟上一次的更新有關

$$V_t \leftarrow \beta V_{t-1} - \eta \frac{\partial L}{\partial w}$$

$$w \leftarrow w + V_t$$

- 如果上一次的梯度跟這次同方向的話，|Vt|(速度)會越來越大(代表梯度增強)，W參數的更新梯度便會越來越快，
- 如果方向不同，|Vt|便會比上次更小(梯度減弱)，W參數的更新梯度便會變小

- 加入的這一項，可以使得梯度方向不變的維度上速度變快，梯度方向有所改變的維度上的更新速度變慢，這樣就可以加快收斂並減小震盪

Optimizer – SGD 說明

- SGD-隨機梯度下降法(stochastic gradient decent)
- 找出參數的梯度(利用微分的方法)，往梯度的方向去更新參數(weight)，

SGD Weight update equation
$$w \leftarrow w - \eta \frac{\partial L}{\partial w}$$

w 為權重(weight)參數，L 為損失函數(loss function)， η 是學習率(learning rate)， ∂L/∂W 是損失函數對參數的梯度(微分)

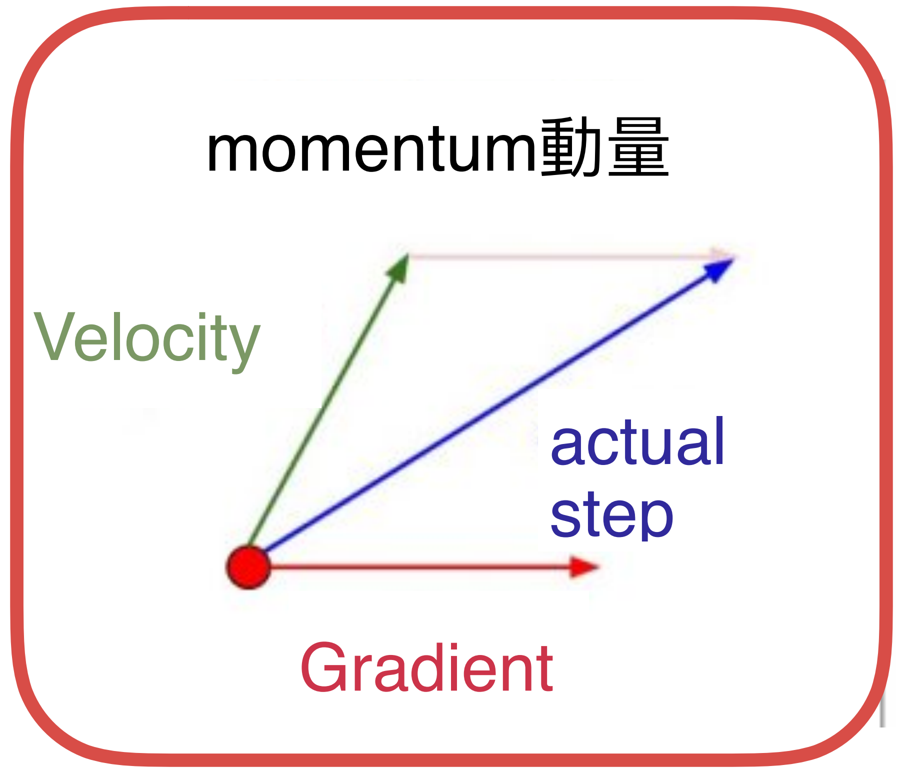
優點：SGD 每次更新時對每個樣本進行梯度更新， 對於很大的數據集來說，可能會有相似的樣本，而 SGD 一次只進行一次更新，就沒有冗餘，而且比較快

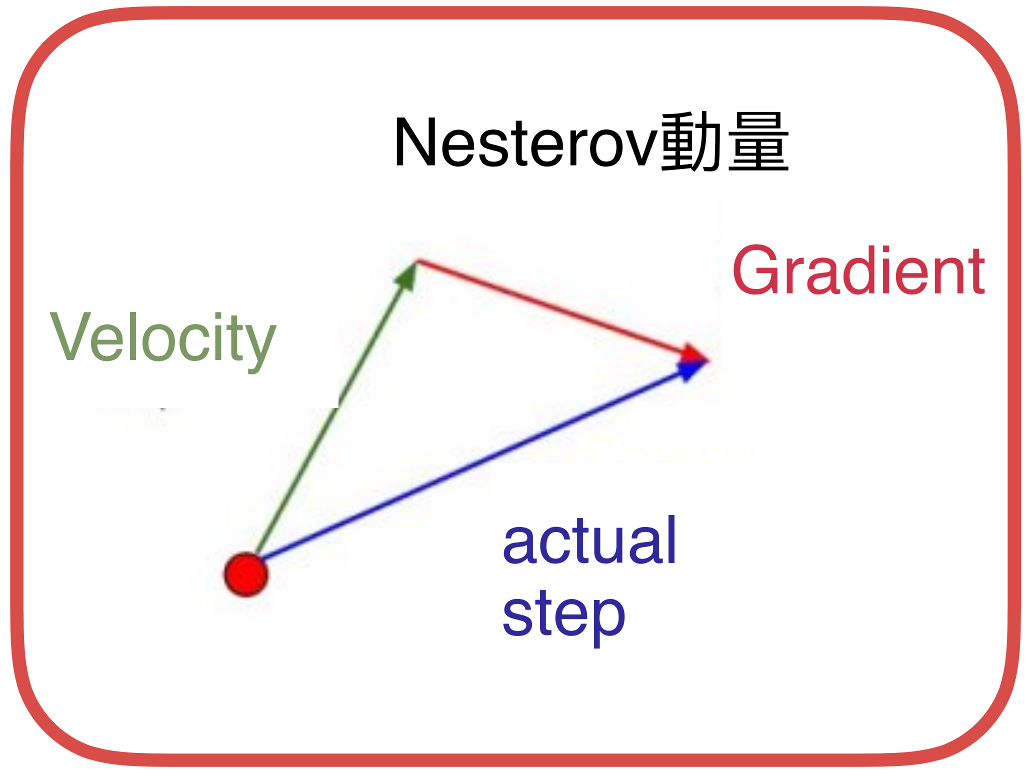
缺點： 但是 SGD 因為更新比較頻繁，會造成 cost function 有嚴重的震盪

Optimizer – SGD 調用

CUPOY

- keras.optimizers.SGD(lr=0.01, momentum=0.0, decay=0.0, nesterov=False)
  - lr：<float> 學習率。
  - Momentum 動量：<float> 參數，用於加速 SGD 在相關方向上前進，並抑制震盪。
  - Decay(衰變)：<float> 每次參數更新後學習率衰減值。
  - nesterov：布爾值。是否使用 Nesterov 動量。





圖片來源：cs231n.github

```
from keras import optimizers

model = Sequential()
model.add(Dense(64, kernel_initializer='uniform', input_shape=(10,)))
model.add(Activation('softmax’))

#實例化一個優化器對象，然後將它傳入model.compile()，可以修改參數
sgd = optimizers.SGD(lr=0.01, decay=1e-6, momentum=0.9, nesterov=True)
model.compile(loss='mean_squared_error', optimizer=sgd)

# 通過名稱來調用優化器，將使用優化器的默認參數。
model.compile(loss='mean_squared_error', optimizer='sgd')
```

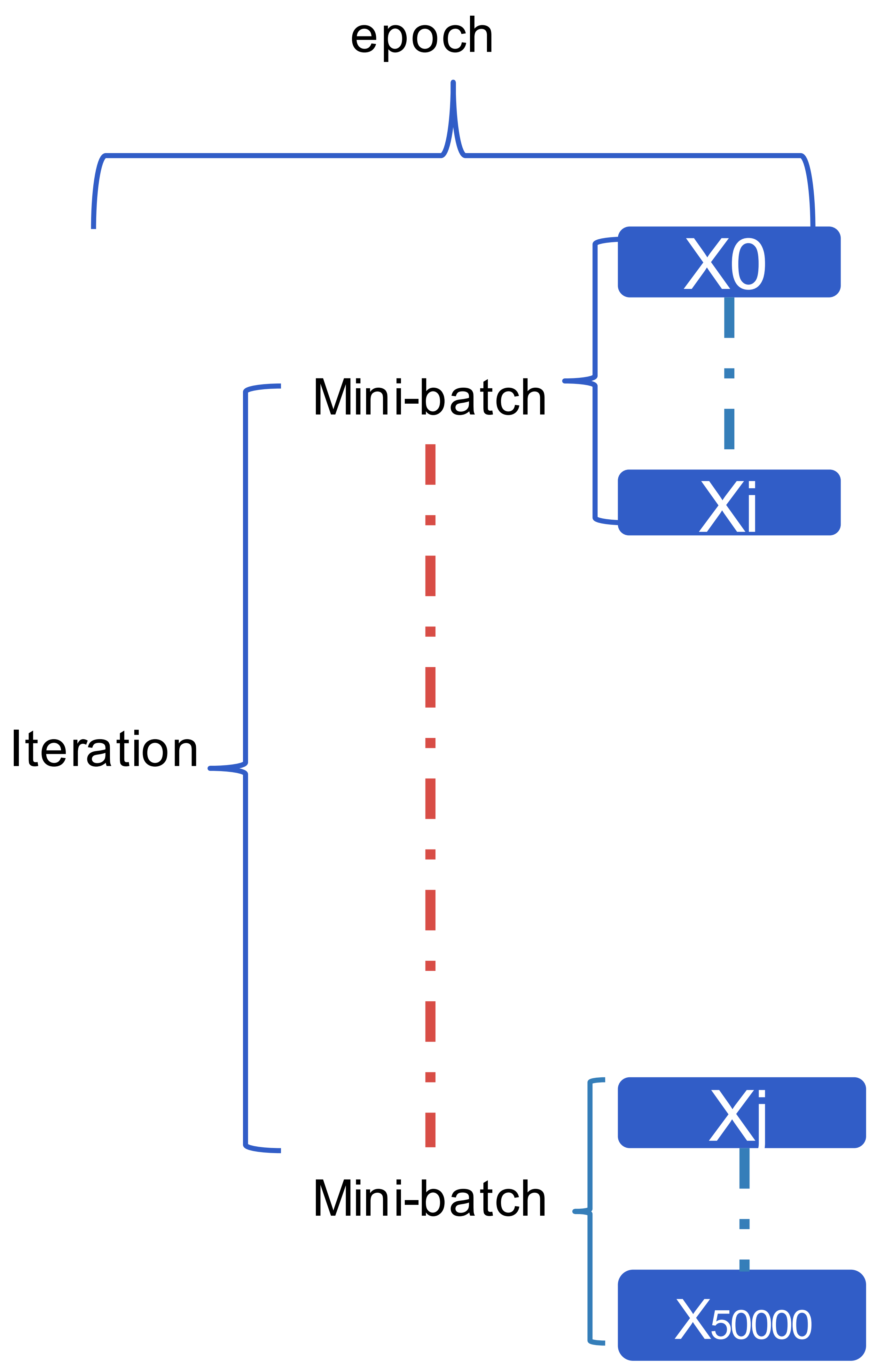
Optimizer – SGD, mini-batch gradient descent

- batch-gradient，其實就是普通的梯度下降算法但是採用批量處理。
  - 當數據集很大（比如有100000個左右時），每次 iteration 都要將1000000 個數據跑一遍，機器帶不動。於是有了 mini-batch-gradient ——將 1000000 個樣本分成 1000 份，每份 1000 個，都看成一組獨立的數據集，進行 forward_propagation 和 backward_propagation。
- 在整個算法的流程中，cost function 是局部的，但是W和b是全局的。
  - 批量梯度下降對訓練集上每一個數據都計算誤差，但只在所有訓練數據計算完成後才更新模型。
  - 對訓練集上的一次訓練過程稱為一代（epoch）。因此，批量梯度下降是在每一個訓練 epoch 之後更新模型。

Optimizer – SGD, mini-batch gradient descent

- epoch、 iteration 、 batchsize，mini-batch
- batchsize：批量大小，即每次訓練在訓練集中取batchsize個樣本訓練；
  - batchsize=1;
  - batchsize = mini-batch;
  - batchsize = whole training set
- iteration：1個 iteration 等於使用 batchsize 個樣本訓練一次；
- epoch：1個 epoch 等於使用訓練集中的全部樣本訓練一次；

Example:
features is (50000, 400)
labels is (50000, 10)
batch_size is 128
Iteration = 50000/128+1 = 391



Optimizer – SGD, mini-batch gradient descent

CUPOY

- 怎麼配置mini-batch梯度下降
  - Mini-batch sizes，簡稱為「batch sizes」，是算法設計中需要調節的參數。
  - 較小的值讓學習過程收斂更快，但是產生更多噪聲。
  - 較大的值讓學習過程收斂較慢，但是準確的估計誤差梯度。
  - batch size 的默認值最好是 32 盡量選擇 2 的冪次方，有利於 GPU 的加速。
  - 調節 batch size 時，最好觀察模型在不同 batch size 下的訓練時間和驗證誤差的學習曲線。
  - 調整其他所有超參數之後再調整 batch size 和學習率。

Optimizer - Adagrad

- 對於常見的數據給予比較小的學習率去調整參數，對於不常見的數據給予比較大的學習率調整參數
  - 每個參數都有不同的 learning rate,
  - 根據之前所有 gradient 的 root mean square 修改

第 t 次更新

$$g^t = \frac{\partial L}{\partial \theta}\Big|_{\theta=\theta^t}$$

Gradient

網路參數(b, w)

Gradient descent

$$\theta^{t+1} = \theta^t - \eta g^t$$

Adagrad

Learning rate

$$\theta^{t+1} = \theta^t - \frac{\eta}{\sigma^t} g^t$$

$$\sigma^t \sqrt[2]{\frac{(g^0)^2 + \dots + (g^t)^2}{t + 1}}$$

Root mean square(RMS) of all Gradient

- 優點： Adagrad 的是減少了學習率的手動調節
- 缺點：它的缺點是分母會不斷積累，這樣學習率就會收縮並最終會變得非常小。

Optimizer – Adagrad 調用

- 超參數設定值:

keras.optimizers.Adagrad(lr=0.01, epsilon=None, decay=0.0)

- lr：float >= 0. 學習率.一般 η 就取 0.01
- epsilon： float >= 0. 若為 None，默認為 K.epsilon().
- decay：float >= 0. 每次參數更新後學習率衰減值

```
from keras import optimizers

model = Sequential()
model.add(Dense(64, kernel_initializer='uniform', input_shape=(10,)))
model.add(Activation('softmax’))

#實例化一個優化器對象，然後將它傳入model.compile() , 可以修改參數
opt = optimizers. Adagrad(lr=0.01, epsilon=None, decay=0.0)
model.compile(loss='mean_squared_error', optimizer=opt)
```

Optimizer - RMSprop

- RMSProp 算法也旨在抑制梯度的鋸齒下降，但與動量相比， RMSProp 不需要手動配置學習率超參數，由算法自動完成。更重要的是，RMSProp 可以為每個參數選擇不同的學習率。
- RMSprop 是為了解決 Adagrad 學習率急劇下降問題的，所以
- 比對梯度更新規則：

<u>Adagrad</u>

$$\theta^{t+1} = \theta^t - \frac{\eta}{\sigma^t} g^t$$

$$\sigma^t \sqrt[2]{\frac{(g^0)^2 + \ldots + (g^t)^2}{t+1}}$$

Root mean square (RMS) of all Gradient

<u>RMSprop</u>

$$\theta^{t+1} = \theta^t - \frac{\eta}{\sqrt{r^t}} g^t$$

$$r^t = (1-p)(g^t)^2 + p r^{t-1}$$

分母換成了過去的梯度平方的衰減平均值

Optimizer – RMSprop 調用

- keras.optimizers.RMSprop(lr=0.001, rho=0.9, epsilon=None, decay=0.0)
- This optimizer is usually a good choice for recurrent neural networks.

Arguments

- lr：float >= 0. Learning rate.
- rho：float >= 0.
- epsilon：float >= 0. Fuzz factor. If None, defaults to K.epsilon().
- decay：float >= 0. Learning rate decay over each update.

```
from keras import optimizers

model = Sequential()
model.add(Dense(64, kernel_initializer='uniform', input_shape=(10,)))
model.add(Activation('softmax’))

#實例化一個優化器對象，然後將它傳入model.compile() , 可以修改參數
opt = optimizers.RMSprop(lr=0.001, epsilon=None, decay=0.0)
model.compile(loss='mean_squared_error', optimizer=opt)
```

Optimizer – Adam 說明

- 除了像 RMSprop 一樣存儲了過去梯度的平方 vt 的指數衰減平均值，也像 momentum 一樣保持了過去梯度 mt 的指數衰減平均值,「t」：

the first moment (the mean) $m_t = \beta_1 m_t + (1-\beta_1) g_t$

the second moment (the uncentered variance) $v_t = \beta_2 m_t + (1-\beta_2) g_t^2$

- 計算梯度的指數移動平均數，m0 初始化為 0。綜合考慮之前時間步的梯度動量。
- β1 係數為指數衰減率，控制權重分配（動量與當前梯度），通常取接近於1的值。默認為 0.9
- 其次，計算梯度平方的指數移動平均數，v0 初始化為 0。β2 係數為指數衰減率，控制之前的梯度平方的影響情況。類似於 RMSProp 算法，對梯度平方進行加權均值。默認為 0.999

Optimizer – Adam 說明

- 由於 m0 初始化為 0，會導致 mt 偏向於 0，尤其在訓練初期階段。所以，此處需要對梯度均值 mt 進行偏差糾正，降低偏差對訓練初期的影響。
- 與 m0 類似，因為 v0 初始化為 0 導致訓練初始階段 vt 偏向 0，對其進行糾正。

$$\hat{m}_t = \frac{m_t}{1-\beta_1^t} \qquad \hat{v}_t = \frac{v_t}{1-\beta_2^t}$$

the decay rates are small

(i.e. β1 and β2 are close to 1)

更新參數，初始的學習率 lr 乘以梯度均值與梯度方差的平方根之比。其中默認學習率 lr =0.001, eplison (ε=10^-8)，避免除數變為 0。
對更新的步長計算，能夠從梯度均值及梯度平方兩個角度進行自適應地調節，而不是直接由當前梯度決定

Optimizer - Adam 調用

keras.optimizers.Adam(lr=0.001, beta_1=0.9, beta_2=0.999, epsilon=None, decay=0.0, amsgrad=False)

- lr：float >= 0. 學習率。
- beta_1：float, 0 < beta < 1. 通常接近於 1。
- beta_2：float, 0 < beta < 1. 通常接近於 1。
- epsilon：float >= 0. 模糊因數. 若為 None, 默認為 K.epsilon()。
- amsgrad：boolean. 是否應用此演算法的 AMSGrad 變種，來自論文 「On the Convergence of Adam and Beyond」
- decay：float >= 0. 每次參數更新後學習率衰減值。

```
from keras import optimizers

model = Sequential()
model.add(Dense(64, kernel_initializer='uniform', input_shape=(10,)))
model.add(Activation('softmax’))

#實例化一個優化器對象，然後將它傳入 model.compile() , 可以修改參數
opt = optimizers. Adam(lr=0.001, epsilon=None, decay=0.0)
model.compile(loss='mean_squared_error', optimizer=opt)
```

如何選擇優化器

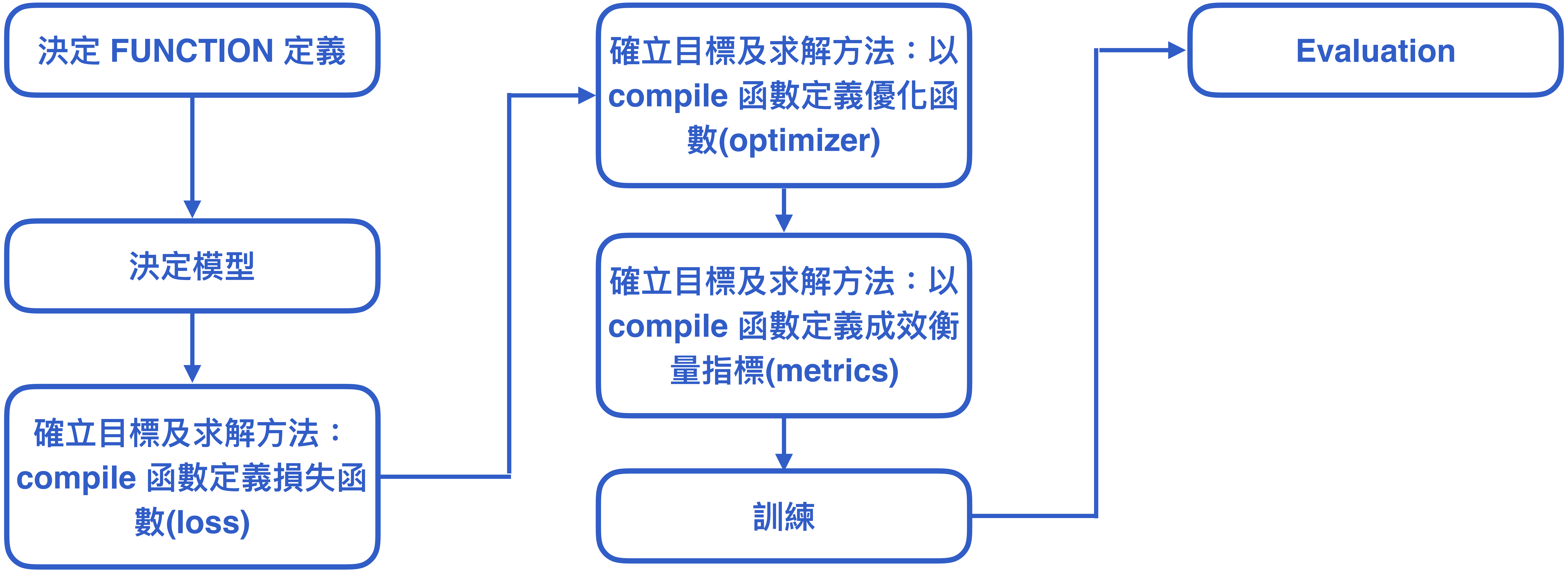
- 隨機梯度下降（SGD）：SGD 指的是 mini batch gradient descent 優點：針對大數據集，訓練速度很快。從訓練集樣本中隨機選取一個 batch 計算一次梯度，更新一次模型參數。
    - 缺點：
      對所有參數使用相同的學習率。對於稀疏數據或特徵，希望盡快更新一些不經常出現的特徵，慢一些更新常出現的特徵。所以選擇合適的學習率比較困難。
- 容易收斂到局部最優 Adam：利用梯度的一階矩估計和二階矩估計動態調節每個參數的學習率。
    - 優點：
      1.經過偏置校正後，每一次迭代都有確定的範圍，使得參數比較平穩。善於處理稀疏梯度和非平穩目標。
      2.對內存需求小
      3.對不同內存計算不同的學習率
- RMSProp：自適應調節學習率。對學習率進行了約束，適合處理非平穩目標和 RNN。

如何選擇優化器

CUPOY

- 如果輸入數據集比較稀疏，SGD、NAG和動量項等方法可能效果不好。因此對於稀疏數據集，應該使用某種自適應學習率的方法，且另一好處為不需要人為調整學習率，使用默認參數就可能獲得最優值。
  - Adagrad, RMSprop, Adam。
- 如果想使訓練深層網絡模型快速收斂或所構建的神經網絡較為複雜，則應該使用Adam或其他自適應學習速率的方法，因為這些方法的實際效果更優。
  - Adam 就是在 RMSprop 的基礎上加了 bias-correction 和momentum，
  - 隨著梯度變的稀疏，Adam 比 RMSprop 效果會好。

前述流程 / python程式 對照



前述流程 / python程式 對照

python 程式 (請參閱今日範例)

```
from keras import optimizers
model = Sequential()

model.add(Dense(64, kernel_initializer='uniform', input_shape=(10,)))
model.add(Activation('softmax'))

# set parameters:
max_features = 5000
batch_size = 32
kernel_size = 3
hidden_dims = 250
epochs = 2


model.compile(loss='binary_crossentropy', optimizer='adam', metrics=['accuracy'])
history = model.fit(x_train, y_train, batch_size=batch_size, epochs=epochs,
            validation_data=(x_test, y_test))
```

重要知識點複習：動量Momentum

CUPOY

- 「一顆球從山上滾下來，在下坡的時候速度越來越快，遇到上坡，方向改變，速度下降」

- Vt :「方向速度」，會跟上一次的更新有關

$$V_t \leftarrow \beta V_{t-1} - \eta \frac{\partial L}{\partial w}$$

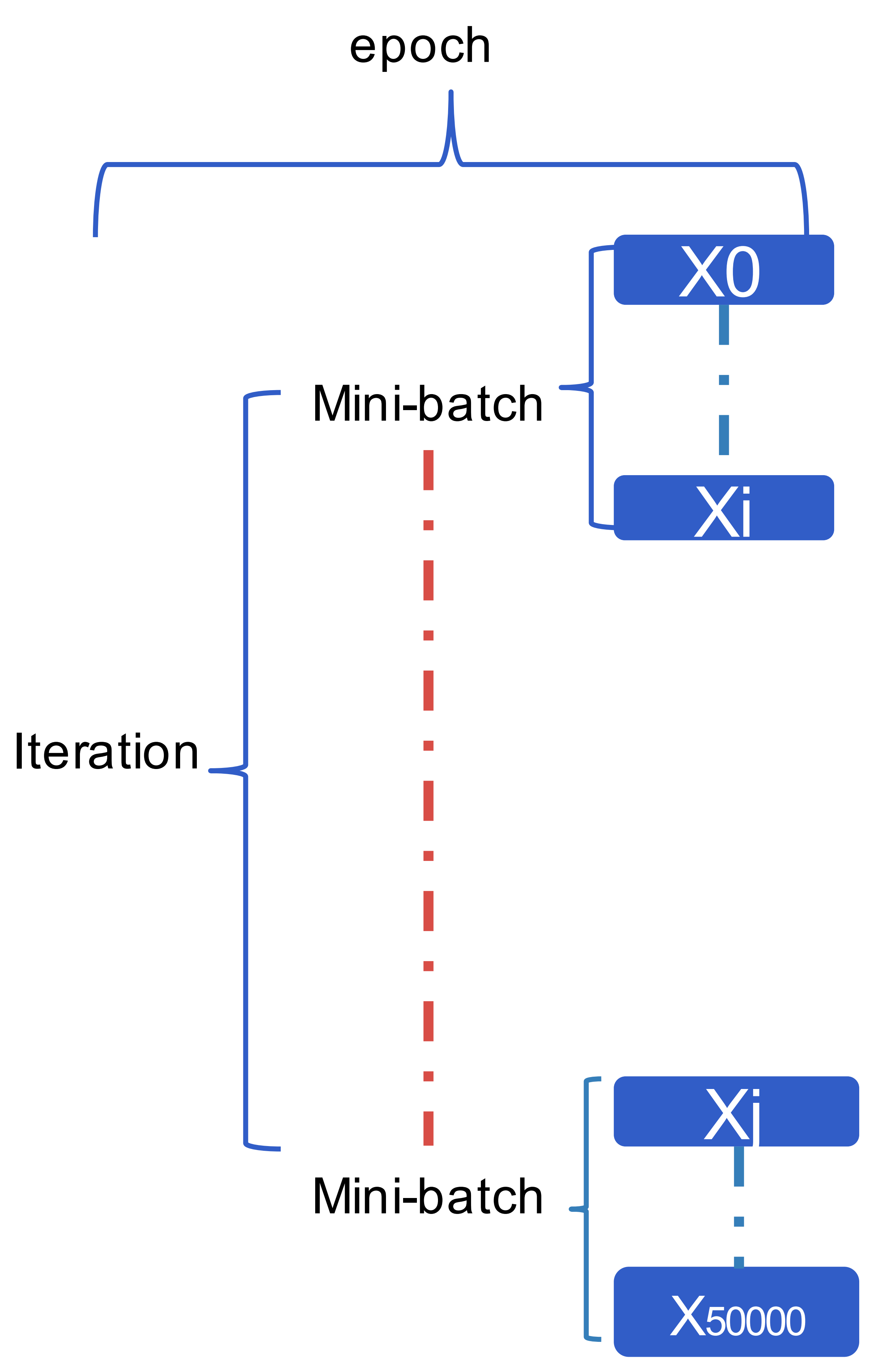
$$w \leftarrow w + V_t$$

- 如果上一次的梯度跟這次同方向的話，IVtI(速度)會越來越大(代表梯度增強)，W參數的更新梯度便會越來越快，
- 如果方向不同，IVtI便會比上次更小(梯度減弱)，W參數的更新梯度便會變小

- 加入的這一項，可以使得梯度方向不變的維度上速度變快，梯度方向有所改變的維度上的更新速度變慢，這樣就可以加快收斂並減小震盪

重要知識點複習：mini-batch

- epoch、 iteration 、 batchsize，mini-batch
- batchsize：批量大小，即每次訓練在訓練集中取 batchsize 個樣本訓練；
  - batchsize=1;
  - batchsize = mini-batch;
  - batchsize = whole training set
- iteration：1個 iteration 等於使用 batchsize 個樣本訓練一次；
- epoch：1個 epoch 等於使用訓練集中的全部樣本訓練一次；



Example:
features is (50000, 400)
labels is (50000, 10)
batch_size is 128
Iteration = 50000/128+1 = 391

重要知識點複習：幾個常用的優化器

- SGD（Stochastic Gradient Descent）隨機梯度下降法這種方法是將數據分成一小批一小批的進行訓練。但是速度比較慢。
- AdaGrad 採用改變學習率的方式。
- RMSProp 這種方法是將 Momentum 與 AdaGrad 部分相結合。
- Adam，結合 AdaGrad 和 RMSProp 兩種優化算法的優點。對梯度的一階矩估計（First Moment Estimation，即梯度的均值）和二階矩估計（Second Moment Estimation，即梯度的未中心化的方差）進行綜合考慮，計算出更新步長。

延伸閱讀

除了每日知識點的基礎之外，推薦的延伸閱讀能補足學員們對該知識點的了解程度，建議您解完每日題目後，若有多餘時間，可再補充延伸閱讀文章內容。

推薦延伸閱讀

CUPOY

- An overview of gradient descent optimization algorithms （英文）

- 在很多機器學習和深度學習的應用中，我們發現用的最多的優化器是Adam，為什麼呢？

下面是TensorFlow中的優化器：https://www.tensorflow.org/api_guides/python/train （英文）

- 在keras中也有SGD，RMSprop，Adagrad，Adadelta，Adam等：https://keras.io/optimizers/（英文）

- 我們可以發現除了常見的梯度下降，還有Adadelta，Adagrad，RMSProp 等幾種優化器，都是什麼呢，又該怎麼選擇呢？
  https://blog.csdn.net/qq_35860352/article/details/80772142 （簡體）

- Sebastian Ruder的這篇論文中給出了常用優化器的比較
  https://arxiv.org/pdf/1609.04747.pdf （英文）

推薦延伸閱讀

- **優化器是編譯Keras模型所需的兩個參數之一**

```
from keras import optimizers
model = Sequential() model.add(Dense(64, kernel_initializer='uniform',
input_shape=(10,)))
model.add(Activation('softmax'))
sgd = optimizers.SGD(lr=0.01, decay=1e-6, momentum=0.9,
nesterov=True)
model.compile(loss='mean_squared_error', optimizer=sgd)
```

您可以在傳遞優化器之前將其實例化model.compile()，如上例所示，或者您可以通過其名稱來調用它。

在後一種情況下，將使用優化程序的默認參數。

```
# pass optimizer by name: default parameters will be used
model.compile(loss='mean_squared_error', optimizer='sgd')
```

```
from keras import optimizers

# All parameter gradients will be clipped to
# a maximum value of 0.5 and
# a minimum value of -0.5.
sgd = optimizers.SGD(lr=0.01, clipvalue=0.5)
```

```
from keras import optimizers

# All parameter gradients will be clipped to
# a maximum norm of 1.
sgd = optimizers.SGD(lr=0.01, clipnorm=1.)
```

- **所有Keras優化器通用的參數**

的參數clipnorm和clipvalue可以與所有優化可以用來控制限幅梯度

推薦延伸閱讀

- 二階優化算法

  https://web.stanford.edu/class/msande311/lecture13.pdf

  二階優化算法使用了二階導數(也叫做**Hessian方法**)來最小化或最大化損失函數。由於二階導數的計算成本很高，所以這種方法並沒有廣泛使用。

The second-order information is used but no need to inverse it.

0) Initialization: Given initial solution $\mathbf{x}^0$. Let $\mathbf{g}^0 = \nabla f(\mathbf{x}^0)$, $\mathbf{d}^0 = -\mathbf{g}^0$ and $k = 0$.

1) Iterate Update:

$$\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k + \alpha^k \mathbf{d}^k, \text{ where } \alpha^k = \frac{-(\mathbf{g}^k)^T \mathbf{d}^k}{(\mathbf{d}^k)^T \nabla^2 f(\mathbf{x}^k) \mathbf{d}^k}.$$

2) Compute Conjugate Direction: Compute $\mathbf{g}^{k+1} = \nabla f(\mathbf{x}^{k+1})$. Unless $k = n-1$:

$$\mathbf{d}^{k+1} = -\mathbf{g}^{k+1} + \beta^k \mathbf{d}^k \quad \text{where} \quad \beta^k = \frac{(\mathbf{g}^{k+1})^T \nabla^2 f(\mathbf{x}^k) \mathbf{d}^k}{(\mathbf{d}^k)^T \nabla^2 f(\mathbf{x}^k) \mathbf{d}^k}$$

and set $k = k + 1$ and go to Step 1.

3) Restart: Replace $\mathbf{x}^0$ by $\mathbf{x}^n$ and go to Step 0.

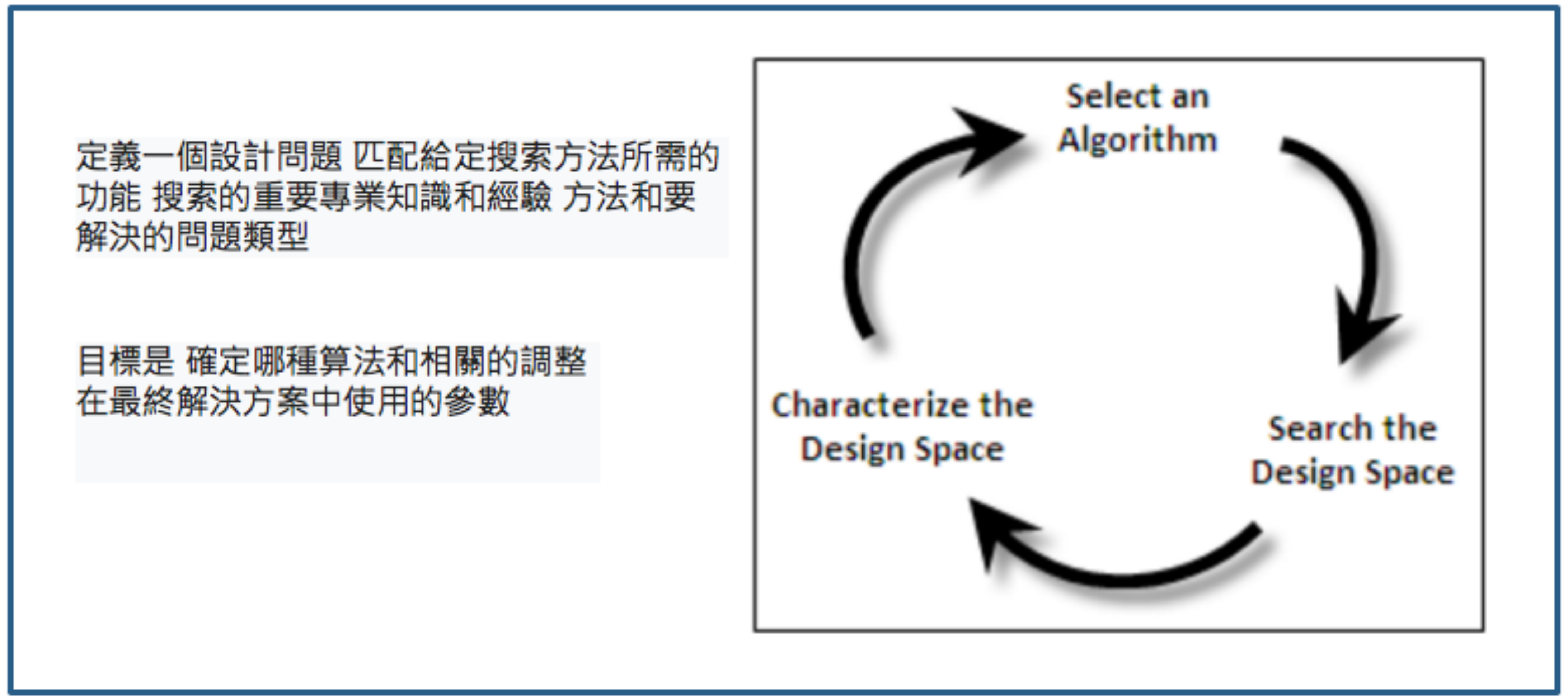
For convex quadratic minimization, this process end in no more than 1 round.

推薦延伸閱讀

- 自適應的算法

  如果需要更快的收斂，或者是訓練更深更複雜的神經網絡，需要用一種自適應的算法。

  http://www.redcedartech.com/pdfs/Select_Optimization_Method.pdf （英文）



解題時間
It’s Your Turn

請跳出PDF至官網Sample Code＆作業
開始解題