Levenberg-Marquardt 算法

> 君子博学而日参省乎己，则知明而行无过矣[1]。

PS: GitHub 的公式渲染不好影响阅读，所以特地将 `markdown` 文件生成了可供完美阅读的 [pdf 格式](#)。

梯度下降算法

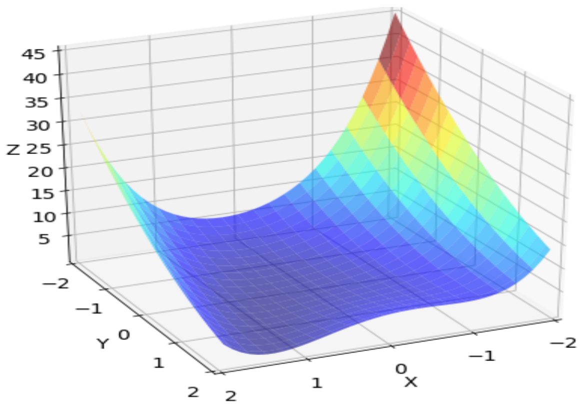
目前用于训练神经网络的算法通常是基于[梯度下降法](#)进行误差反向传播[2]，核心思想是以目标函数的负梯度方向为搜索方向，通过每次迭代使待优化的目标函数逐步减小，最终使误差函数达到极小值。附加动量因子记忆上次迭代的变化方向[3]，可以采用较大的学习速率系数以提高学习速度，但是参数调整优化过程依然线性收敛，相对速度依然较慢。

Rosenbrock 函数

我们选取 [Rosenbrock 函数](#) 作为测试优化算法性能的函数，这是一个非凸函数，由公式 (1) 决定：

$$f(x,y)=(a-x)^2+b(y-x^2)^2 \tag{1}$$

令 $a=1, b=1$，可以得到：

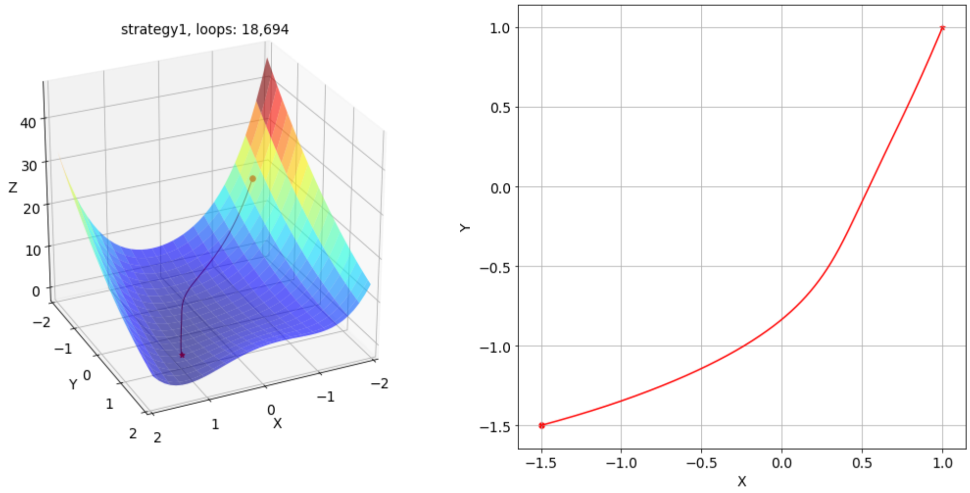


学习率策略

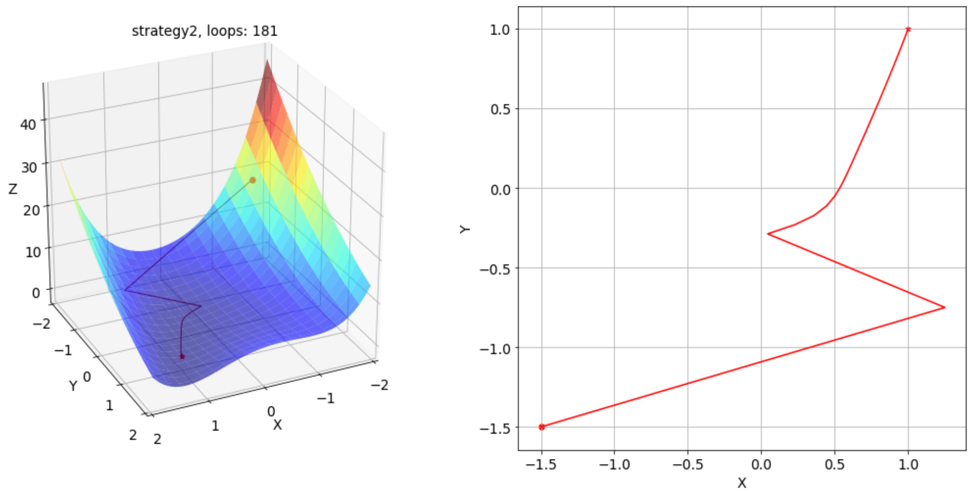
为了测试不同 `learning rate` 下梯度下降算法的表现，我们采用了 `4` 种优化策略：

> 1. 固定学习率 $lr_{min}=0.001$；
> 2. 固定学习率 $lr_{max}=0.1$；
> 3. 固定学习率 $lr_{max}=0.1$，动量因子 $\beta=0.1$；
> 4. 初始最大学习率 $lr_{max}=0.1$，每次迭代衰减为前次学习率的 0.9 倍，最终学习率不小于 $lr_{min}=0.001$。

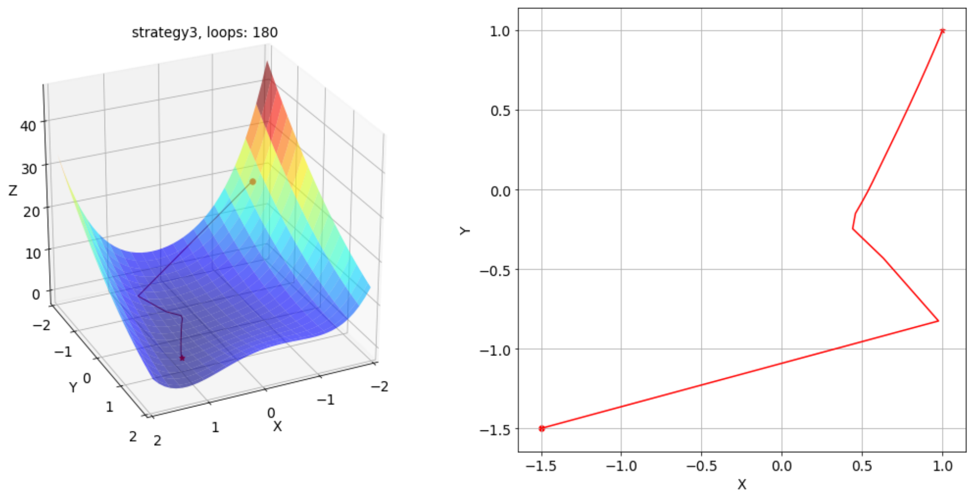
策略 1 下梯度下降法寻找最优解的路径及其在 `x-y` 平面投影的俯视图如下所示：



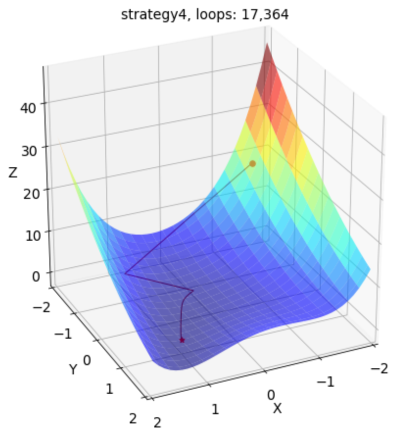
策略 2 下寻找最优解的路径及其在 `x-y` 平面投影的俯视图如下所示：

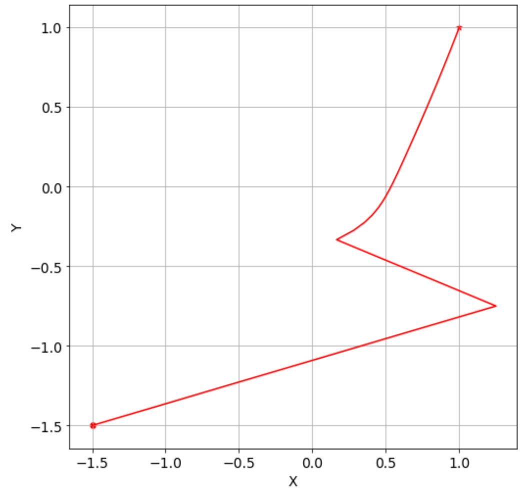


策略 3 下寻找最优解的路径及其在 `x-y` 平面投影的俯视图如下所示：



策略 4 下寻找最优解的路径及其在 `x-y` 平面投影的俯视图如下所示：





根据结果，明显可以看出学习率 `learning rate` 选择过小或过大会导致网络训练过慢或震荡发散，整个网络的训练速度对学习率的选取依赖程度很高。完整的代码及 `jupyter notebook` 文件已上传至该 `repo` 的 `codes` 和 `notebooks` 文件夹：

- gradient_descent.py
- gradient_descent.ipynb
- gradient_descent_kernel

Levenberg-Marquardt算法

LM算法[4]是一种利用标准数值优化技术的快速算法，具有高斯牛顿法的局部收敛性和梯度下降法的全局特性，在局部搜索能力上强于梯度下降法。LM算法基本思想是先沿着负梯度方向进行搜索，然后根据牛顿法在最优值附近产生一个新的理想的搜索方向。LM算法具有二阶收敛速度，迭代次数很少，可以大幅度提高收敛速度和算法的稳定性，避免陷入局部最小点的优点。
第 `k+1` 次迭代时模型的参数由 $\mathbf{w}^{k+1}$ 决定[5]：

$$\mathbf{w}^{k+1} = \mathbf{w}^k + \Delta\mathbf{w}^k \tag{2}$$

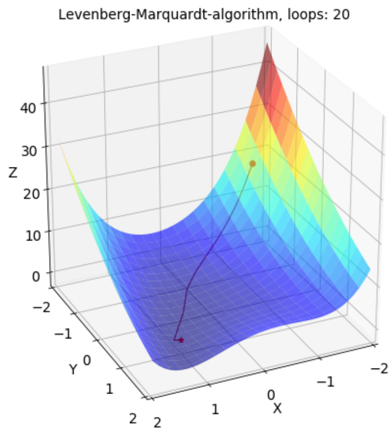
LM算法对模型参数的修正量 $\Delta\mathbf{w}$ 由公式 (3) 可以解出：

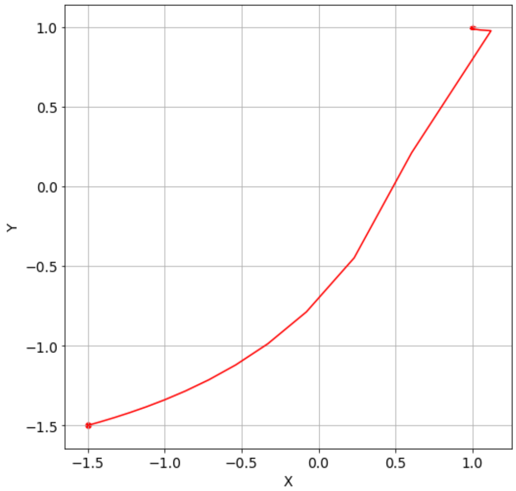
$$[\mathbf{J}^T(\mathbf{w})\mathbf{J}(\mathbf{w}) - \mu\mathbf{I}]\Delta\mathbf{w} = -\mathbf{J}^\mathbf{T}(\mathbf{w})\mathbf{e}(\mathbf{w}) \tag{3}$$

其中，$\mathbf{J}(\mathbf{w})$ 为 Jacobian矩阵，$\mathbf{e}(\mathbf{w})$ 为期望值 $\hat{y}$ 与在参数 $\mathbf{w}$ 下函数 $y(\mathbf{w})$ 的差。

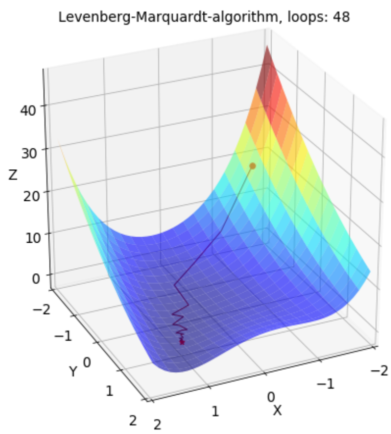
$$\mathbf{e}(\mathbf{w}) = \hat{y} - y(\mathbf{w}) \tag{4}$$

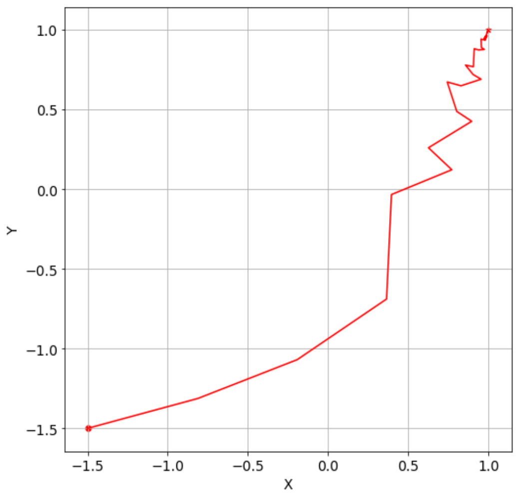
LM算法受参数 μ 的影响较大，当 μ 取较大值时算法更加接近于带小步长的梯度下降法，当 μ 值取较小值时更加接近高斯-牛顿算法。
在实际使用的情况下，通常采取的策略是开始时使用较小的 μ 值，使得模型能够很快收敛，当误差降低较慢时再采用较大 μ 使得最终模型参数收敛于最优值。以下给出当已知最优参数（$x=1, y=1$）的情况下LM算法的寻优路径及其在 `x-y` 平面投影的俯视图如下所示（μ 的值固定为 0.05）。





然后给出未知最优参数情况下LM算法的寻优路径及其在 `x-y` 平面投影的俯视图如下所示（μ 的值固定为 8×10^{-8}）。





无论是哪种情况，在两张图中都可以明显的看出LM算法较梯度下降算法收敛更加迅速，但是在最优值附近可能会发生震荡的现象。关于通过LM算法求 Rosenbrock 函数极小值的完整代码及 `jupyter notebook` 文件已上传至该 `repo` 的 `codes` 和 `notebooks` 文件夹：

- LM_algorithm.py
- LM_algorithm.ipynb
- LM_algorithm_kernel

脚注 (Footnote)

[1]：荀子·劝学 -- 荀况

[2]：Rumelhart D E, Hinton G E, Williams R J. Learning representations by back-propagating errors[J]. Cognitive modeling, 1988, 5(3): 1.

[3]：Vogl T P, Mangis J K, Rigler A K, et al. Accelerating the convergence of the back-propagation method[J]. Biological cybernetics, 1988, 59(4-5): 257-263.

[4]：Levenberg K. A method for the solution of certain non-linear problems in least squares[J]. Quarterly of applied mathematics, 1944, 2(2): 164-168.

[5]：Ван Л. Петросян О.Г. Распознавание лиц на основе классификации вейвлет признаков путём вейвлет-нейронных сетей // Информатизация образования и науки. 2018. №4. С. 129-139.

↑Back to Content↑