Optimization Algorithm

1. Mini-batch gradient descent

之前介绍的神经网络训练过程是对所有m个样本，称为batch，通过向量化计算方式，同时进行的。如果m很大，例如达到百万数量级，训练速度往往会很慢，因为**每次迭代都要对所有样本进行进行求和运算和矩阵运算**。我们将这种梯度下降算法称为**Batch Gradient Descent**。

为了解决这一问题，可以把**m个训练样本分成若干个子集**，称为mini-batches，这样每个子集包含的数据量就小了，例如只有1000，然后每次在单一子集上进行神经网络训练，速度就会大大提高。这种梯度下降算法叫做**Mini-batch Gradient Descent。**

假设总的训练样本个数m=5000000，其维度为(n_x,m)。将其分成5000个子集，每个mini-batch含有1000个样本。将每个mini-batch记为X^{t}，其维度为(n_x,1000)。相应的每个mini-batch的输出记为Y^{t}，其维度为(1,1000)，且$t=1,2,\cdots,5000$。

总结一下遇到的神经网络中几类字母的上标含义：
$X^{(i)}$：第i个样本
$Z^{[l]}$：神经网络第ll层网络的线性输出
X^{t}, Y^{t}：第t组mini-batch

Mini-batches Gradient Descent的实现过程是先将总的训练样本分成T个子集（mini-batches），然后对每个mini-batch进行神经网络训练，包括Forward Propagation，Compute Cost Function，Backward Propagation，循环至T个mini-batch都训练完毕。

$$for\ \ t=1,\cdots,T$$

$$\ \ Forward\ Propagation$$

$$\ \ ComputeCostFunction$$

$$\ \ BackwardPropagation$$

$$\ \ W:=W-\alpha\cdot dW$$

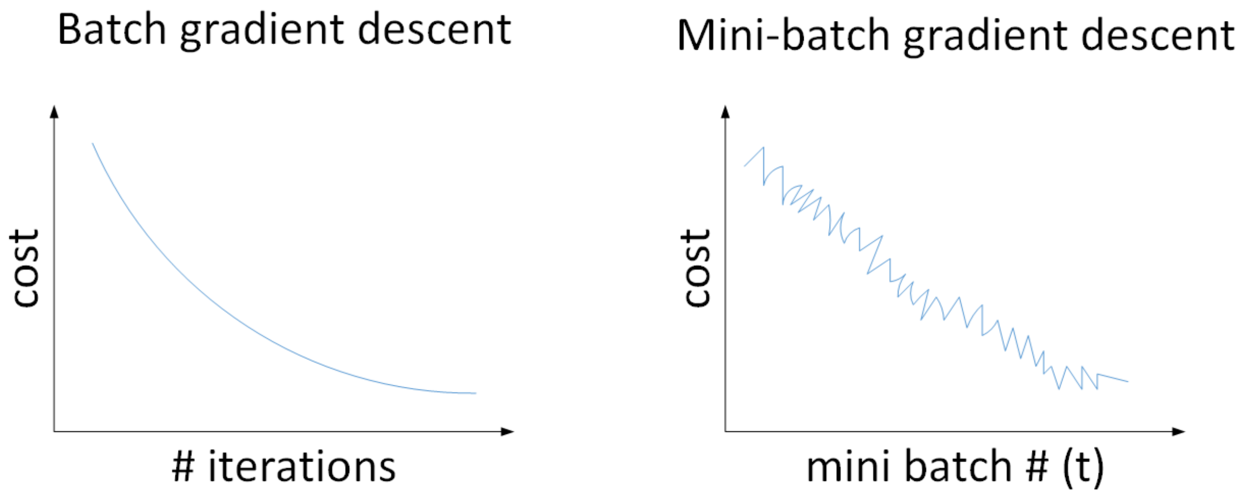
$$\ \ b:=b-\alpha\cdot db$$

经过T次循环之后，所有m个训练样本都进行了梯度下降计算。这个过程，称之为经历了一个epoch。**对于Batch Gradient Descent而言，一个epoch只进行一次梯度下降算法；而Mini-Batches Gradient Descent，一个epoch会进行T次梯度下降算法。**

对于Mini-Batches Gradient Descent，可以进行多次epoch训练。而且，每次epoch，最好是将总体训练数据重新打乱、重新分成T组mini-batches，这样有利于训练出最佳的神经网络模型。

2. Understanding mini-batch gradient descent

Batch gradient descent和Mini-batch gradient descent的cost曲线如下图所示：

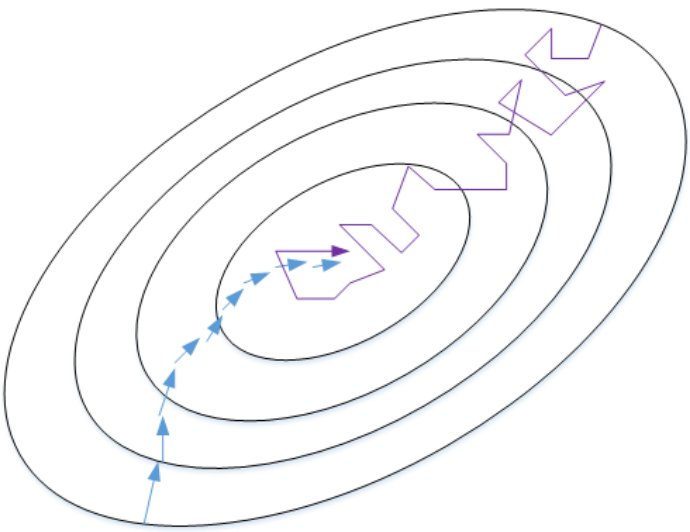


对于一般的神经网络模型，使用Batch gradient descent，随着迭代次数增加，cost是不断减小的。然而，使用Mini-batch gradient descent，随着在不同的mini-batch上迭代训练，其cost不是单调下降，而是受类似noise的影响，出现振荡。但整体的趋势是下降的，最终也能得到较低的cost值。

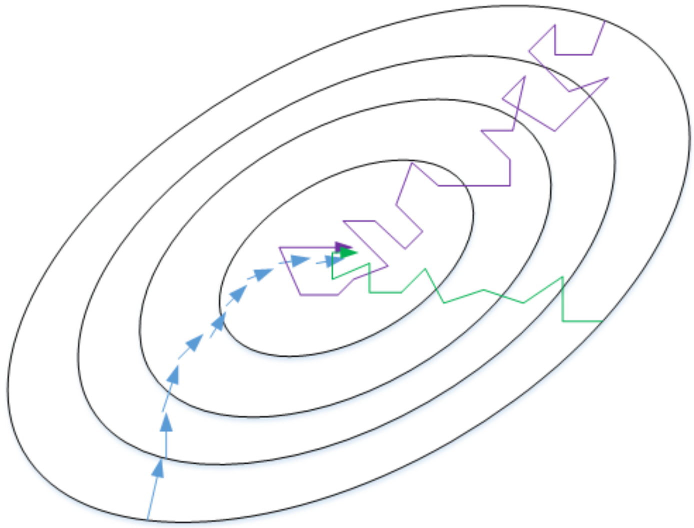
之所以出现细微振荡的原因是不同的mini-batch之间是有差异的。例如可能第一个子集(X^1, Y^1)是好的子集，而第二个子集(X^2, Y^2)包含了一些噪声noise。出现细微振荡是正常的。

如何选择每个mini-batch的大小？有两个极端：如果mini-batch size=m，即为Batch gradient descent，只包含一个子集为$(X^1, Y^1) = (X, Y)$；如果**mini-batch size=1，即为Stachastic gradient descent**，每个样本就是一个子集$(X^1, Y^1) = (x^{(i)}, y^{(i)})$，共有m个子集。

来比较一下Batch gradient descent和Stachastic gradient descent的梯度下降曲线。如下图所示，蓝色的线代表Batch gradient descent，紫色的线代表Stachastic gradient descent。Batch gradient descent会比较平稳地接近全局最小值，但是因为使用了所有m个样本，每次前进的速度有些慢。Stachastic gradient descent每次前进速度很快，但是路线曲折，有较大的振荡，最终会在最小值附近来回波动，难以真正达到最小值处。而且在数值处理上就不能使用向量化的方法来提高运算速度。



实际使用中，mini-batch size不能设置得太大（Batch gradient descent），也不能设置得太小（Stachastic gradient descent）。这样，相当于结合了Batch gradient descent和Stachastic gradient descent各自的优点，既能使用向量化优化算法，又能叫快速地找到最小值。**mini-batch gradient descent的梯度下降曲线如下图绿色所示，每次前进速度较快，且振荡较小，基本能接近全局最小值。**



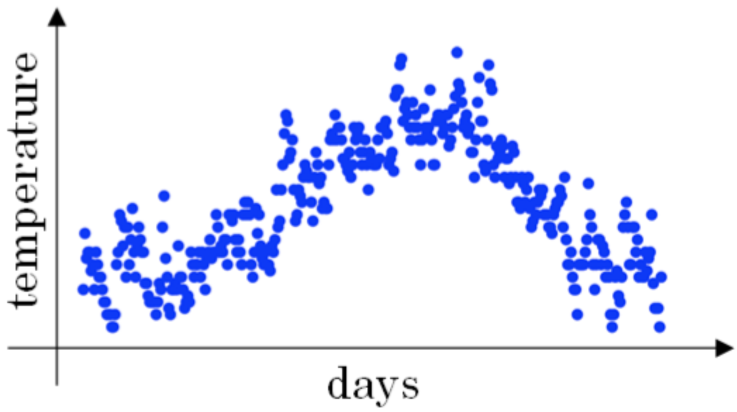
一般来说，如果**总体样本数量m不太大**时，例如m≤2000，建议直接**使用Batch gradient descent**。如果总体样本数量**m很大**时，**建议将样本分成许多mini-batches**。推荐常用的mini-batch size为64,128,256,512。

3. Exponentially weighted averages

该部分介绍指数加权平均（Exponentially weighted averages）的概念。

举个例子，记录半年内伦敦市的气温变化，并在二维平面上绘制出来，如下图所示：

$$\theta_1 = 40°F$$
$$\theta_2 = 49°F$$
$$\theta_3 = 45°F$$
$$\vdots$$
$$\theta_{180} = 60°F$$
$$\theta_{181} = 56°F$$
$$\vdots$$



看上去，温度数据似乎有noise，而且抖动较大。如果希望看到半年内气温的整体变化趋势，可以通过移动平均（moving average）的方法来对每天气温进行平滑处理。

例如可以设$V_0=0$，当成第0天的气温值。

第一天的气温与第0天的气温有关：

$$V_1=0.9V_0+0.1\theta_1$$

第二天的气温与第一天的气温有关：

$$V_2=0.9V_1+0.1\theta_2=0.9(0.9V_0+0.1\theta_1)+0.1\theta_2=0.9^2V_0+0.9\cdot 0.1\theta_1+0.1\theta_2$$

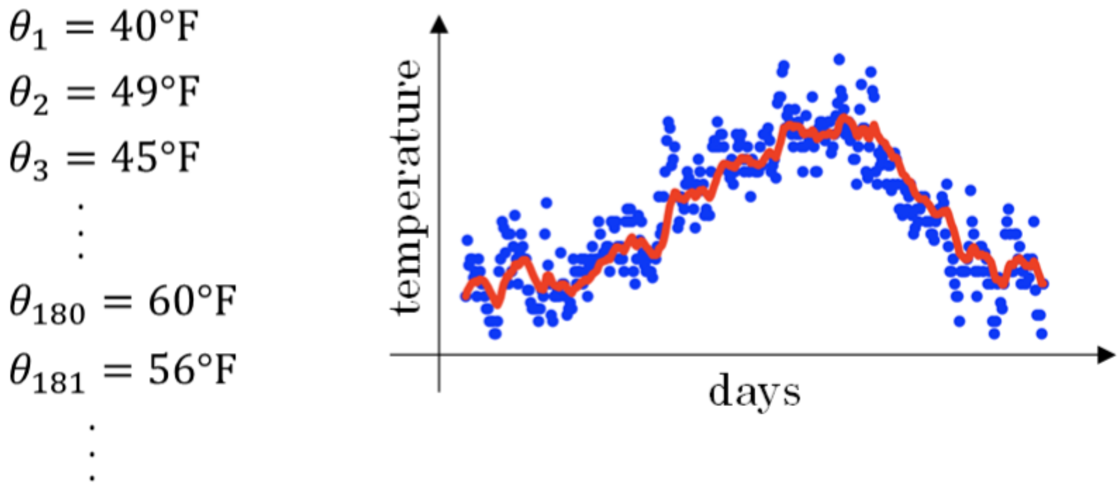
第三天的气温与第二天的气温有关：

$$V_3=0.9V_2+0.1\theta_3=0.9(0.9^2V_0+0.9\cdot 0.1\theta_1+0.1\theta_2)+0.1\theta_3=0.9^3V_0+0.9^2\cdot 0.1\theta_1+0.9\cdot 0.1\theta_2+0.1\theta_3$$

即第t天与第t-1天的气温迭代关系为：

$$V_t=0.9V_{t-1}+0.1\theta_t=0.9^tV_0+0.9^{t-1}\cdot 0.1\theta_1+0.9^{t-2}\cdot 0.1\theta_2+\cdots+0.9\cdot 0.1\theta_{t-1}+0.1\theta_t$$

经过移动平均处理得到的气温如下图红色曲线所示：



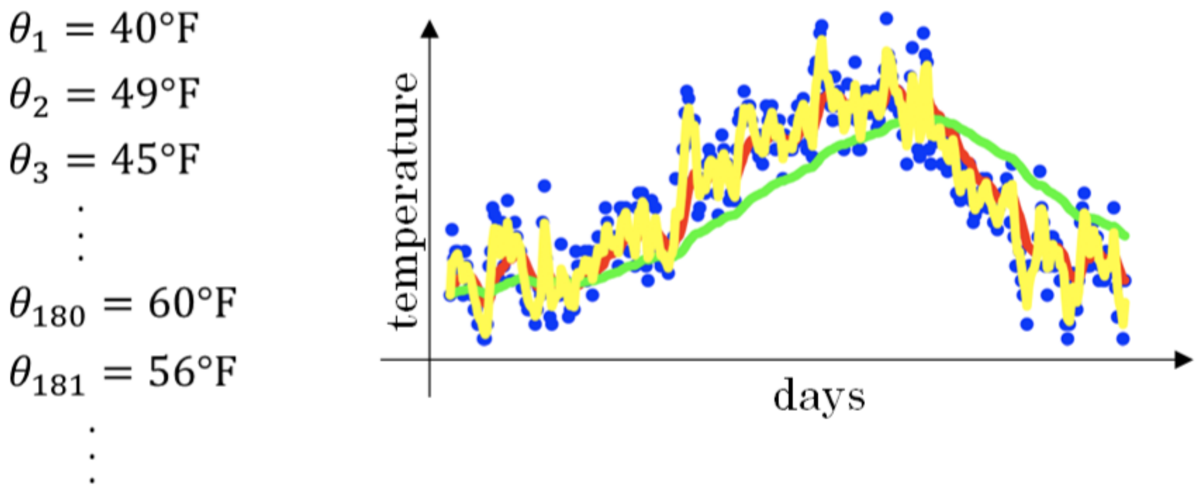
这种滑动平均算法称为指数加权平均（exponentially weighted average）。根据之前的推导公式，其一般形式为：

$$V_t = \beta V_{t-1} + (1-\beta)\theta_t$$

上面的例子中，$\beta = 0.9$。β值决定了指数加权平均的天数，近似表示为：

$$\frac{1}{1-\beta}$$

例如，当$\beta = 0.9$，则$\frac{1}{1-\beta} = 10$，表示将前10天进行指数加权平均。当$\beta = 0.98$，则$\frac{1}{1-\beta} = 50$，表示将前50天进行指数加权平均。β值越大，则指数加权平均的天数越多，平均后的趋势线就越平缓，但是同时也会向右平移。下图绿色曲线和黄色曲线分别表示了$\beta = 0.98$和$\beta = 0.5$时，指数加权平均的结果。



这里简单解释一下公式$\frac{1}{1-\beta}$是怎么来的。准确来说，指数加权平均算法跟之前所有天的数值都有关系，根据之前的推导公式就能看出。但是指数是衰减的，一般认为衰减到$\frac{1}{e}$就可以忽略不计了。因此，根据之前的推导公式，只要证明

$$\beta^{\frac{1}{1-\beta}} = \frac{1}{e}$$

β

就好了。

令$\frac{1}{1-\beta} = N$，N>0，则$\beta = 1 - \frac{1}{N}$，$\frac{1}{N} < 1$。即证明转化为：

$$(1-\frac{1}{N})^N = \frac{1}{e}$$

显然，当N>>0时，上述等式是近似成立的。

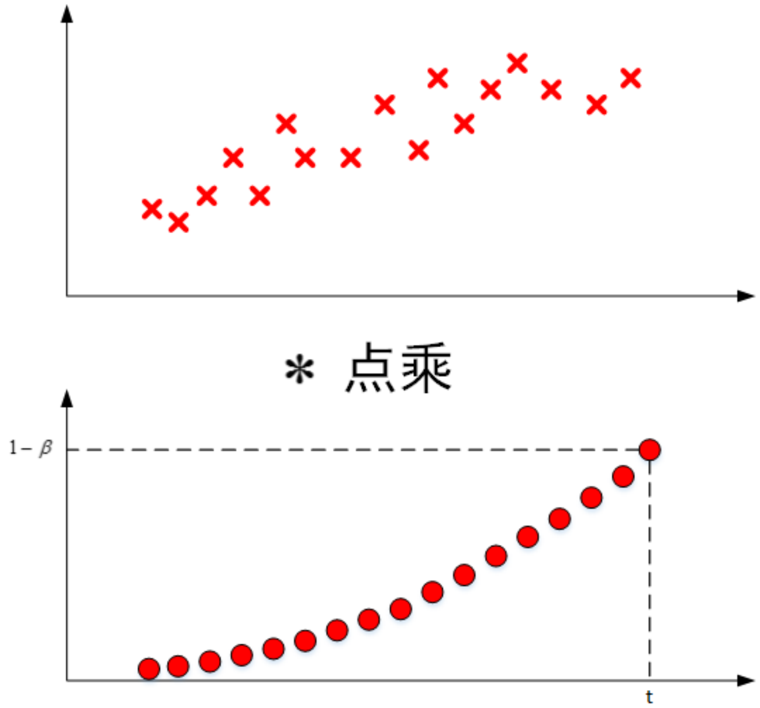
至此，简单解释了为什么指数加权平均的天数的计算公式为$\frac{1}{1-\beta}$。

4. Understanding exponetially weighted averages

将指数加权平均公式的一般形式写下来：

$$V_t = \beta V_{t-1} + (1-\beta)\theta_t = (1-\beta)\theta_t + (1-\beta)\cdot\beta\cdot\theta_{t-1} + (1-\beta)\cdot\beta^2\cdot\theta_{t-2} + \cdots + (1-\beta)\cdot\beta^{t-1}\cdot\theta_1 + \beta^t\cdot V_0$$

观察上面这个式子，$\theta_t, \theta_{t-1}, \theta_{t-2}, \cdots, \theta_1$是原始数据值，$(1-\beta), (1-\beta)\beta, (1-\beta)\beta^2, \cdots, (1-\beta)\beta^{t-1}$是类似指数曲线，从右向左，呈指数下降的。$V_t$的值就是这两个子式的点乘，将原始数据值与衰减指数点乘，相当于做了指数衰减，离得越近，影响越大，离得越远，影响越小，衰减越厉害。

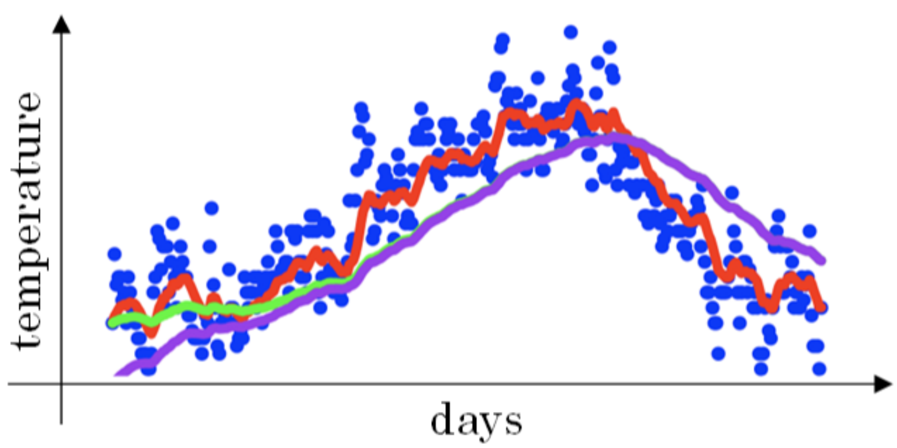


已经知道了指数加权平均的递推公式。实际应用中，为了减少内存的使用，可以使用这样的语句来实现指数加权平均算法：

$$\begin{aligned}&V_\theta = 0\\&Repeat:\\&\quad Get\ next\ \theta_t\\&\quad V_\theta := \beta V_\theta + (1-\beta)\theta_t\end{aligned}$$

5. Bias correction in exponentially weighted average

上文中提到当$\beta = 0.98$时，指数加权平均结果如下图绿色曲线所示。但是实际上，真实曲线如紫色曲线所示。



紫色曲线与绿色曲线的区别是，紫色曲线开始的时候相对较低一些。这是因为开始时设置$V_0 = 0$，所以初始值会相对小一些，直到后面受前面的影响渐渐变小，趋于正常。

修正这种问题的方法是进行偏移校正（bias correction），即在每次计算完V_t后，对V_t进行下式处理：

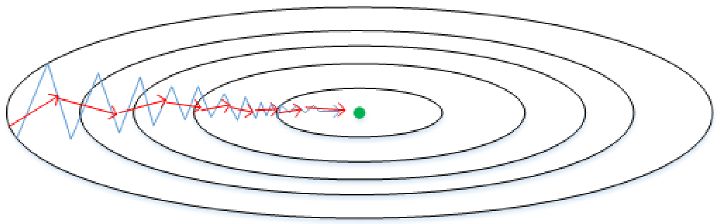
$$\frac{V_t}{1-\beta^t}$$

在刚开始的时候，t比较小，$(1-\beta^t)<1$，这样就将V_t修正得更大一些，效果是把紫色曲线开始部分向上提升一些，与绿色曲线接近重合。随着t增大，$(1-\beta^t)\approx 1$基本不变，紫色曲线与绿色曲线依然重合。这样就实现了简单的偏移校正，得到希望的绿色曲线。

机器学习中，偏移校正并不是必须的。因为，在迭代一次次数后（t较大），V_t受初始值影响微乎其微，紫色曲线与绿色曲线基本重合。所以，一般可以忽略初始迭代过程，等到一定迭代之后再取值，这样就不需要进行偏移校正了。

6. Gradient descent with momentum

该部分将介绍动量梯度下降算法，其速度要比传统的梯度下降算法快很多。做法是在每次训练时，**对梯度进行指数加权平均处理**，然后用得到的梯度值更新权重W和常数项b。下面介绍具体的实现过程。



原始的梯度下降算法如上图蓝色折线所示。在梯度下降过程中，梯度下降的振荡较大，尤其对于W、b之间数值范围差别较大的情况。此时每一点处的梯度只与当前方向有关，产生类似折线的效果，前进缓慢。而如果对梯度进行指数加权平均，这样使当前梯度不仅与当前方向有关，还与之前的方向有关，这样处理让梯度前进方向更加平滑，减少振荡，能够更快地到达最小值处。

权重W和常数项b的指数加权平均表达式如下：

$$V_{dW}=\beta\cdot V_{dW}+(1-\beta)\cdot dW$$

$$V_{db}=\beta\cdot V_{db}+(1-\beta)\cdot db$$

从动量的角度来看，以权重W为例，V_{dW}可以成速度V，dW可以看成是加速度a。指数加权平均实际上是计算当前的速度，当前速度由之前的速度和现在的加速度共同影响。而$\beta<1$，又能限制速度V_{dW}过大。也就是说，当前的速度是渐变的，而不是瞬变的，是动量的过程。这保证了梯度下降的平稳性和准确性，减少振荡，较快地达到最小值处。

动量梯度下降算法的过程如下：

$On\ iteration\ t:$

$\quad Compute\ dW,\ db\ on\ the\ current\ mini-batch$

$\quad V_{dW}=\beta V_{dW}+(1-\beta)dW$

$\quad V_{db}=\beta V_{db}+(1-\beta)db$

$\quad W=W-\alpha V_{dW},\ b=b-\alpha V_{db}$

初始时，令$V_{dW}=0,V_{db}=0$。一般设置$\beta=0.9$，即指数加权平均前10天的数据，实际应用效果较好。

另外，关于偏移校正，可以不使用。因为经过10次迭代后，随着滑动平均的过程，偏移情况会逐渐消失。

补充一下，在其它文献资料中，动量梯度下降还有另外一种写法：

$$V_{dW}=\beta V_{dW}+dW$$

$$V_{db}=\beta V_{db}+db$$

即消去了dW和db前的系数$(1-\beta)$。这样简化了表达式，但是学习因子α相当于变成了$\frac{\alpha}{1-\beta}$，表示α也受β的影响。从效果上来说，这种写法也是可以的，但是不够直观，且调参涉及到α，不够方便。所以，实际应用中，推荐第一种动量梯度下降的表达式。

7. RMSprop

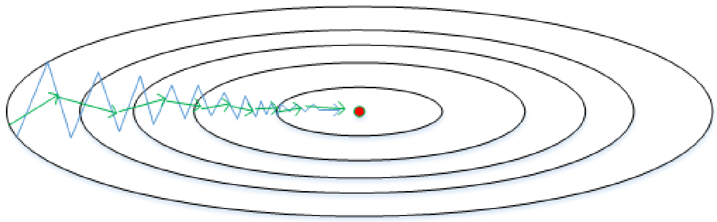
RMSprop是另外一种优化梯度下降速度的算法。每次迭代训练过程中，其权重W和常数项b的更新表达式为：

$$S_W = \beta S_{dW} + (1-\beta)dW^2$$

$$S_b = \beta S_{db} + (1-\beta)db^2$$

$$W := W - \alpha \frac{dW}{\sqrt{S_W}},\ b := b - \alpha \frac{db}{\sqrt{S_b}}$$

下面简单解释一下RMSprop算法的原理，仍然以下图为例，为了便于分析，令水平方向为W的方向，垂直方向为b的方向。



从图中可以看出，梯度下降（蓝色折线）在垂直方向（b）上振荡较大，在水平方向（W）上振荡较小，表示在b方向上梯度较大，即db较大，而在W方向上梯度较小，即dW较小。因此，上述表达式中S_b较大，而S_W较小。在更新W和b的表达式中，变化值$\frac{dW}{\sqrt{S_W}}$较大，而$\frac{db}{\sqrt{S_b}}$较小。也就使得W变化得多一些，b变化得少一些。即加快了W方向的速度，减小了b方向的速度，减小振荡，实现快速梯度下降算法，其梯度下降过程如绿色折线所示。总得来说，就是**如果哪个方向振荡大，就减小该方向的更新速度，从而减小振荡。**

还有一点需要注意的是为了避免RMSprop算法中分母为零，通常可以在分母增加一个极小的常数ε：

$$W := W - \alpha \frac{dW}{\sqrt{S_W}+\varepsilon},\ b := b - \alpha \frac{db}{\sqrt{S_b}+\varepsilon}$$

其中，$\varepsilon = 10^{-8}$，或者其它较小值。

8. Adam optimization algorithm

Adam（Adaptive Moment Estimation）算法结合了动量梯度下降算法和RMSprop算法。其算法流程为：

$V_{dW} = 0,\ S_{dW},\ V_{db} = 0,\ S_{db} = 0$

$On\ iteration\ t:$

$\quad Cimpute\ dW,\ db$

$\quad V_{dW} = \beta_1 V_{dW} + (1-\beta_1)dW,\ V_{db} = \beta_1 V_{db} + (1-\beta_1)db$

$\quad S_{dW} = \beta_2 S_{dW} + (1-\beta_2)dW^2,\ S_{db} = \beta_2 S_{db} + (1-\beta_2)db^2$

$\quad V_{dW}^{corrected} = \frac{V_{dW}}{1-\beta_1^t},\ V_{db}^{corrected} = \frac{V_{db}}{1-\beta_1^t}$

$\quad S_{dW}^{corrected} = \frac{S_{dW}}{1-\beta_2^t},\ S_{db}^{corrected} = \frac{S_{db}}{1-\beta_2^t}$

$\quad W := W - \alpha \frac{V_{dW}^{corrected}}{\sqrt{S_{dW}^{corrected}}+\varepsilon},\ b := b - \alpha \frac{V_{db}^{corrected}}{\sqrt{S_{db}^{corrected}}+\varepsilon}$

Adam算法包含了几个超参数，分别是：$\alpha, \beta_1, \beta_2, \varepsilon$。其中，$\beta_1$通常设置为0.9，$\beta_2$通常设置为0.999，$\varepsilon$通常设置为$10^{-8}$。一般只需要对$\beta_1$和$\beta_2$进行调试。

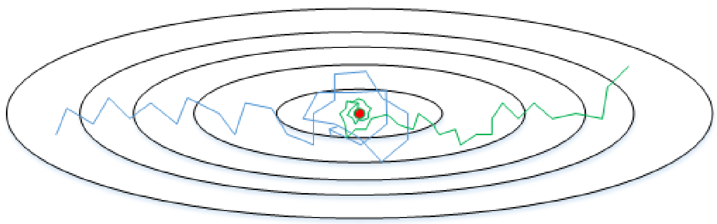
实际应用中，Adam算法结合了动量梯度下降和RMSprop各自的优点，使得神经网络训练速度大大提高。

9. Learning rate decay

减小学习因子α也能有效提高神经网络训练速度，这种方法被称为learning rate decay。

Learning rate decay就是随着迭代次数增加，学习因子α逐渐减小。下面用图示的方式来解释这样做的好处。下图中，蓝色折线表示使用恒定的学习因子α，由于每次训练α相同，步进长度不变，在接近最优值处的振荡也大，在最优值附近较大范围内振荡，与

最优值距离就比较远。绿色折线表示使用不断减小的α，随着训练次数增加，α逐渐减小，步进长度减小，使得能够在最优值处较小范围内微弱振荡，不断逼近最优值。相比较恒定的α来说，learning rate decay更接近最优值。



Learning rate decay中对α可由下列公式得到：

$$\alpha = \frac{1}{1 + decay_rate * epoch}\alpha_0$$

其中，deacy_rate是参数（可调），epoch是训练完所有样本的次数。随着epoch增加，α会不断变小。

除了上面计算α的公式之外，还有其它可供选择的计算公式：

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

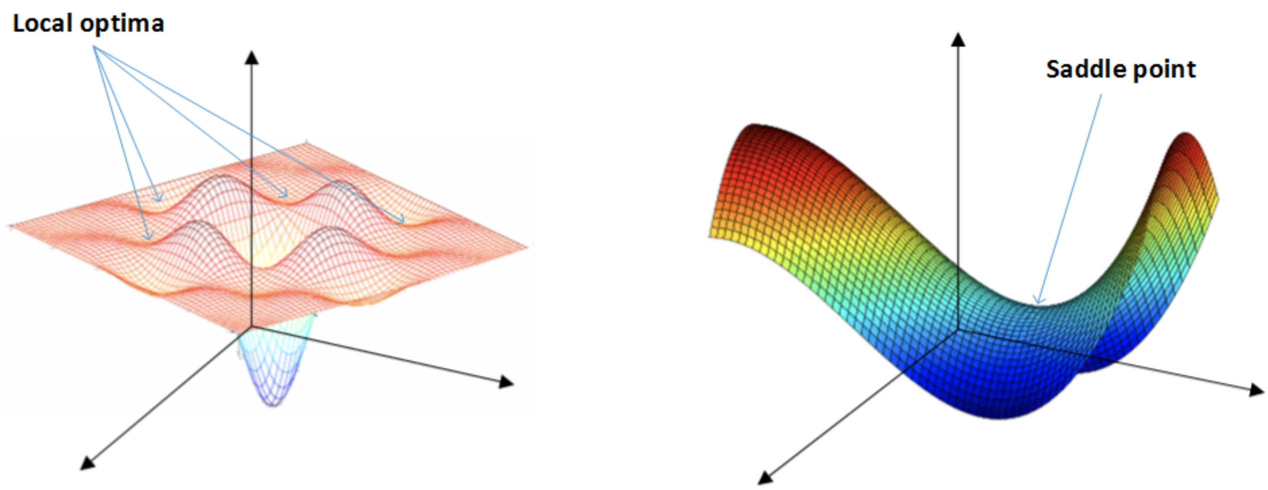
$$\alpha = \frac{k}{\sqrt{epoch}} \cdot \alpha_0 \quad or \quad \frac{k}{\sqrt{t}} \cdot \alpha_0$$

其中，k为可调参数，t为mini-bach number。

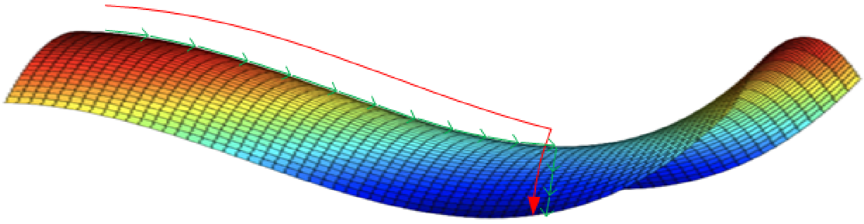
除此之外，还可以设置α为关于t的离散值，随着t增加，α呈阶梯式减小。当然，也可以根据训练情况灵活调整当前的α值，但会比较耗时间。

10. The problem of local optima

在使用梯度下降算法不断减小cost function时，可能会得到局部最优解（local optima）而不是全局最优解（global optima）。之前对局部最优解的理解是形如碗状的凹槽，如下图左边所示。但是在神经网络中，local optima的概念发生了变化。准确地来说，大部分梯度为零的"最优点"并不是这些凹槽处，而是形如右边所示的马鞍状，称为saddle point。也就是说，梯度为零并不能保证都是convex（极小值），也有可能是concave（极大值）。特别是在神经网络中参数很多的情况下，所有参数梯度为零的点很可能都是右边所示的马鞍状的saddle point，而不是左边那样的local optimum。



类似马鞍状的plateaus会降低神经网络学习速度。Plateaus是梯度接近于零的平缓区域，如下图所示。在plateaus上梯度很小，前进缓慢，到达saddle point需要很长时间。到达saddle point后，由于随机扰动，梯度一般能够沿着图中绿色箭头，离开saddle point，继续前进，只是在plateaus上花费了太多时间。



总的来说，关于local optima，有两点总结：
1.只要选择合理的强大的神经网络，一般不太可能陷入local optima
2.Plateaus可能会使梯度下降变慢，降低学习速度

值得一提的是，上文介绍的动量梯度下降，RMSprop，Adam算法都能有效解决plateaus下降过慢的问题，大大提高神经网络的学习速度。