Improving Deep Neural Networks: Hyperparameter Tuning, Regularization and Optimization

Training set	Hold-out cross validation	Test set
훈련	다양한 모델 중 성능이 좋은 모델 확인	최종모델 평가

이전 - 70% train : 30% test

현재 – 60% train : 20% validation : 20% test (상대적으로 작은 데이터셋 일 때)

테스트셋 : 편견 없는 추정치 제공 -> 필요하지 않다면 없어도 됨(val set에서 평가)

[Bias and Variance]

high bias – underfitting

high variance – overfitting

고차원에서 편향과 분산 시각화 불가능 -> 다른 메트릭 ; train set error / dev set error

train 성능 >> dev 성능 : 훈련셋 과적합, 검증셋 일반화 X => high variance

train 성능 < dev 성능 : 과소적합 => high bias

High Bias가 있는지 확인 -> 훈련 세트나 훈련데이터 성능 살펴봐야

있으면, 훈련 세트에 잘 맞지 않거나 더 오래 훈련할 수 있음

=> 네트워크 선택시도 (더 많은 은닉계층, 은닉유닛, 오랜 훈련, 최적화 알고리즘)

Bias를 줄이면 평가하기 위해 검증세트 성능 살펴봄(분산문제)

-> 분산 문제 있으면, 더 많은 데이터를 얻으면 좋거나 정규화를 해야 한다.

머신러닝 초기엔 bias-variance trade-off 문제

-> 현재 딥러닝 빅데이터시대로 더 큰 네트워크, 더 많은 데이터 얻으며 문제 감소

(정규화로 분산 줄어들지만, 약간의 trade-off 문제 생길 수 있음)

[L2 정규화] – 과적합 방지, 고분산 해결

로지스틱 회귀 손실함수

$$J(w,b) = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} \mathcal{L}(\hat{y}^{(i)}, y^{(i)}) + \frac{\lambda}{2m}\|w\|_2^2 + \underbrace{\frac{\lambda}{2m}b^2}_{\text{omit}}$$

규제항 : w제곱의 노름 매개변수 b는 생략

$$\|w\|_2^2 = \sum_{j=1}^{n_x} w_j^2 = w^T w$$

벡터 w에 대한 제곱 유클리드 노름 => L2 정규화

=> 가중치 감소

매개변수 w는 벡터이며 고분산 문제가 있다.(많은 변수)

매개변수 b는 매우 많은 수의 매개변수(w)에 대한 하나의 매개변수이기에 생략 가능

$$\frac{\lambda}{2m}\sum_{j=1}^{n_x}|w_j| = \frac{\lambda}{2m}\|w\|_1$$

L1 정규화 => w는 희박해져 많은 0을 가짐

매개변수 집합이 0이면 모델을 저장하는데 더 적은 메모리가 필요하기에 모델을 압축시킴

람다 : 정규화 파라미터(하이퍼파라미터) - python에서는 lambd로 사용

노름 : Frobenius norm

IF 람다를 크게 하면, w를 0에 가깝게 설정하도록 유도 (손실함수 최소화를 위해)

=> 은닉 유닛의 많은 영향을 없앰 -> 작은 신경망이 됨(단순한 네트워크) <정규화 효과>

=> 하지만, 여러 층을 깊이 쌓아야 하는데, 이런 과적합한 경우에서(고분산) 큰 편향을 갖도록

w작으면, z도 작아짐 -> z는 작은 범위이므로, g(z)는 대략적으로 선형일 것이다. (g(z)=tanh)

=> 모든 층이 선형이면, 전체 네트워크가 선형 네트워크 => 과적합 줄어들음

[드롭아웃 정규화]

과적합일 때, 드롭아웃을 진행해 신경망의 노드를 제거하는 확률 세팅 => 간단한 네트워크

<Inverted Dropout>

l = 3

d3 = np.random.rand(a3.shape[0], a3.shape[1]) < keep-prob

(keep-prob = 0.8 : 특정 은닉층이 유지될 확률 / 0.2 : 은닉층 제거할 확률)

a3 = np.multiply(a3, d3) # a3 * d3 (element-wise) : 각 요소끼리 연산

=> d3의 요소들을 0으로 만드는 역할 (0(False)과 1(True)로 만들어주는 boolean array)

a3 /= keep-prob # inverted dropout technique

세번째 층에 50 단위(개)의 신경세포가 있다.

=> a3 : 50 * m 차원 => (20%) 10 유닛은 닫거나 0으로 됨

=> z[4] = w[4] * a[3] + b[4] -> 20%의 a3의 element가 0이 됨

=> z[4]의 기대값을 감소하지 않게 하기 위해서는 a[3] /= 0.8 (다시 20%만큼 올라갈 수 있기에)

=> a[3]의 기대값 변하지 않음

inverted dropout technique : keep-prob를 어떻게 설정하더라도 a[3]의 기대값 동일하게 유지

신경망을 평가할 때, inverted dropout technique이 test time을 쉽게(간단하게) 만들어준다. 스케일링 문제가 덜하기 때문에

d vector는 첫 번째 기울기 강하 수행절차에서, 동일한 훈련셋에서 multiple pass를 진행하면, 훈련셋에 통과하는 다른 pass들에 따라 다른 은닉층을 무작위로 0으로 만든다.

=> 두 번째 기울기 강하에서 훈련셋을 2번째로 통과시켜 또 다른 패턴이 은닉층을 0으로 만들어야 하는 것은 아니다.

=> 세 번째 층의 d vector는 어떤 것을 0으로 만들지 결정하는데 사용된다.

노드가 임의로 제거될 수 있기에 다음 노드는 어떤 한 가지의 특성에 의존하면 안된다.

입력 노드 전체에 비중을 나눠 가중치 분산시키면 가중치의 squared 노름을 줄이는 효과가 있고, L2정규화처럼 드롭아웃 구현의 효과는 강도가 비슷하며 과적합을 방지하는 데 도움된다.

=> 요약) 드롭아웃이 L2정규화와 유사한 효과 가짐 (적용되는 부분에서의 차이만 있음)

w[l]의 shape이 클수록, 매개변수 세트가 크기에 가중치가 가장 큰 행렬이다. 그 행렬의 과적합을 줄이기 위해 keep-prob가 비교적 낮을 수 있다 (낮을수록 출력이 0이 되는 element 많다)

* keep-prob = 1.0 : 모든 유닛 유지, 해당 레이어에 드롭아웃 사용하지 않음

Computer Vision(CV)에는 드롭아웃이 흔히 사용됨

드롭아웃 단점 : 비용함수가 모든 반복에서 더 이상 잘 정의되지 않음

[조기종료]

train error / 비용함수 : 항상 감소

dev set error : 감소하다 어느 순간 증가 => 그 최저점에서 조기종료

w의 비율이 중간정도 되는 시점에서 중지

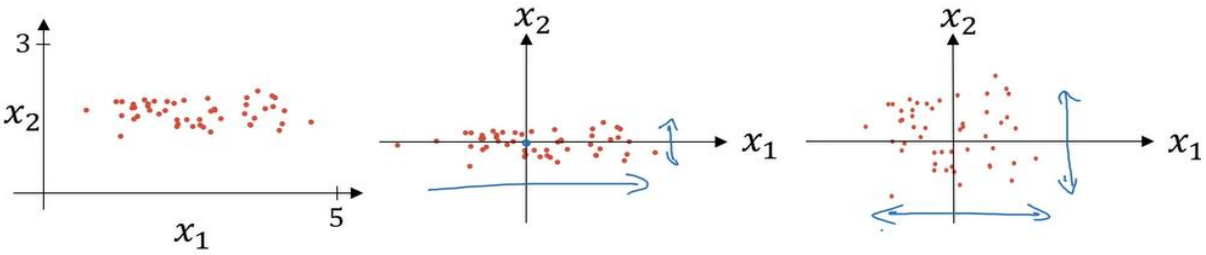
L2 정규화와 비슷하게, 신경망에서 w 파라미터 수가 비슷한 노름을 선정해 덜 과적합되게 만들어 주는 것

단점 : 이 두 별개 문제를 단독으로 풀 수 없고 묶는다. => L2 정규화 사용이 더 좋음

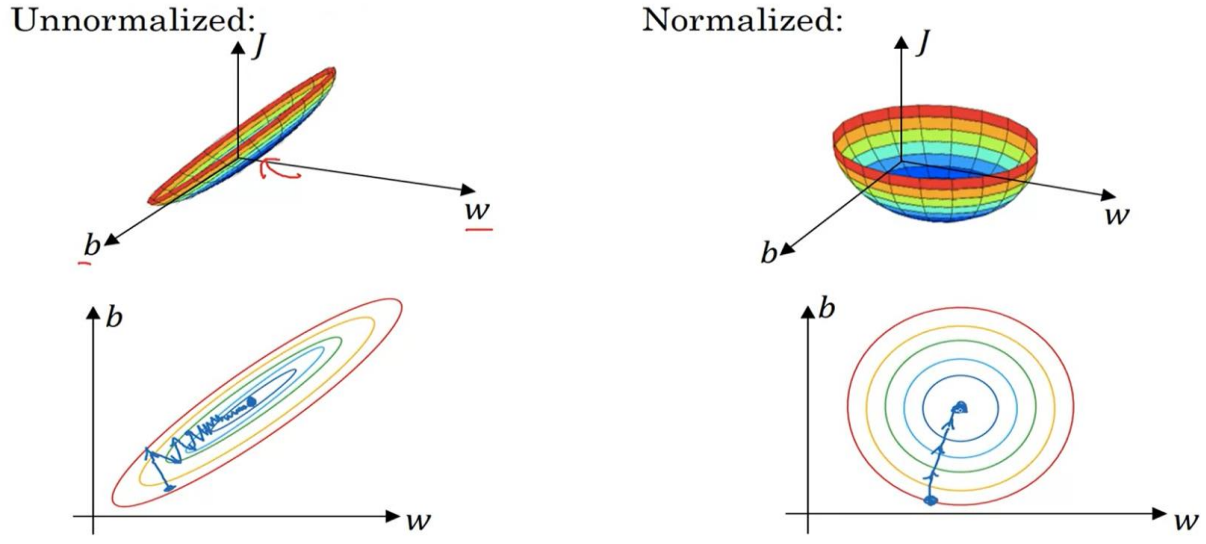
- 비용함수가 최저가 되는 파라미터 w, b 찾기
- overfit이 되지 않게 하는 정규화나 데이터 수 늘리기

장점 : 기울기 강하를 한 번만 실행해도 작은 w값, 중간값, 큰 값을 한번에 구할 수 있다.

[입력을 정규화] – 신경망 훈련 속도 높임



- 평균을 빼거나 0으로 만드는 단계
- 분산을 정규화하는 단계



[기울기 폭발/소실 문제] – 역전파과정에서 입력층에 가까워질수록 gradient 값이 매우 커지는 / 작아지는 현상 => 활성화함수 기울기 원인 * Xavier 초기화

w[l] > I(단위행렬) : 활성화가 기하급수적으로 증가

w[l] < I : 활성화가 기하급수적으로 감소

⇨ 신경망의 무작위 초기화

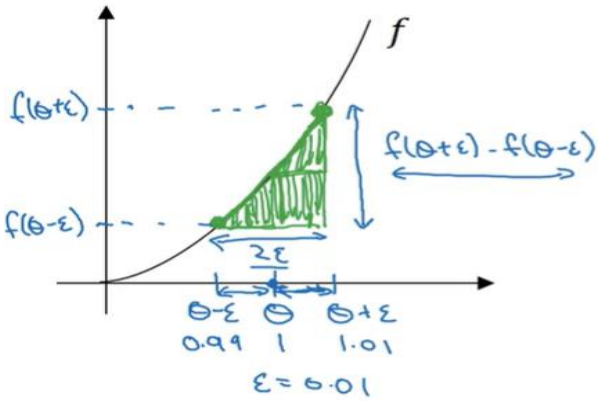
z = w1x1 + w2x2 + w3x3 + … + wnxn

z가 너무 작지 않게 하기 위해 n(입력특성 개수)이 클수록 w_i가 작기를 바람(각각의 항이 작아야)

Var(wi) = 1/n (Relu일 경우, 2/n tanh이면 1/n)

w[l] = np.random.randn(,) * np.sqrt(1/n[l-1]) (Relu일 경우, 2/n[l-1])

[two-sided difference]



f(세타) = 세타 ^3

$$\frac{f(\theta+\varepsilon) - f(\theta-\varepsilon)}{2\varepsilon} \approx g(\theta)$$

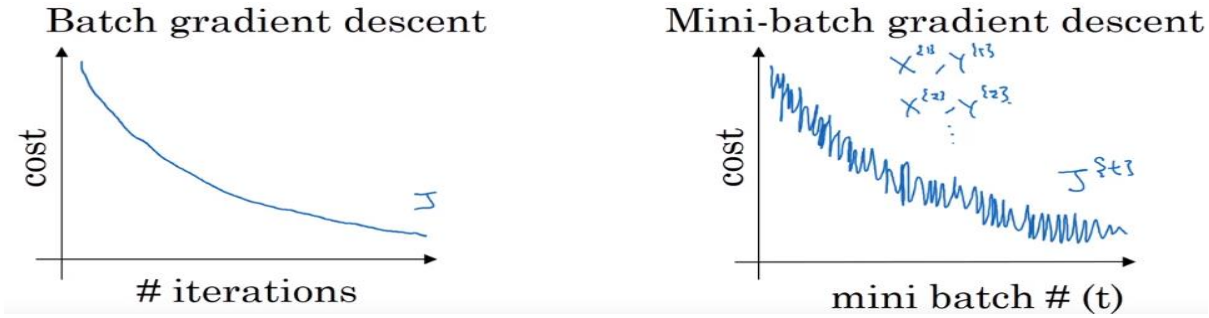
$$\frac{(1.01)^3 - (0.99)^3}{2(0.01)} = 3.0001$$

[최적화 알고리즘]

mini-batch - 대규모에서 빠름

m개의 샘플 ; X{1}, X{2}, … X{m/1000} => 하나의 미니배치는 1000개 샘플 (X{1})

X : (n_x, m) X{1} : (n_x, 1000) m/1000번 -> 1epoch



mini-batch size = m : Batch gradient descent (X{1}, Y{1}) = (X, Y)

- 반복마다 거대한 훈련셋 처리
- 반복마다 긴 시간 소요 (큰 데이터셋일 때)

- 미니배치를 사용한 1 epoch 속도 >배치를 이용한 1 epoch 속도 => 항상은 아님

mini-batch size = 1 : Stochastic gradient descent (확률적 경사 하강법)

- 노이즈는 더 작은 값의 학습속도를 사용해 개선시키거나 감소시킬 수 있음
- 벡터화에서 속도를 잃음 (1개이기에)

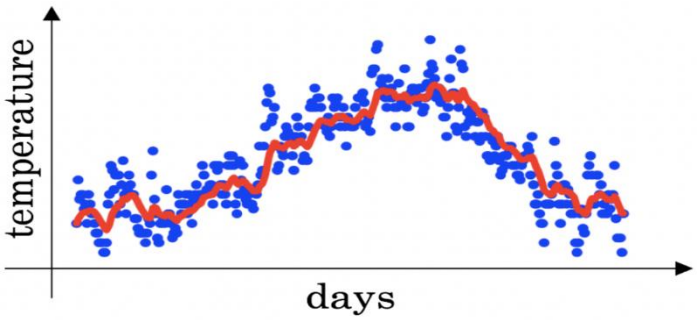
<mini-batch size 고르기>

작은 훈련셋 (m <= 2000) -> 배치 경사 하강법

보통 -> 64, 128, 256, 512

< 지수 가중 평균 >

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



V_0 = 0 (초기화)

B = 0.9 -> red line

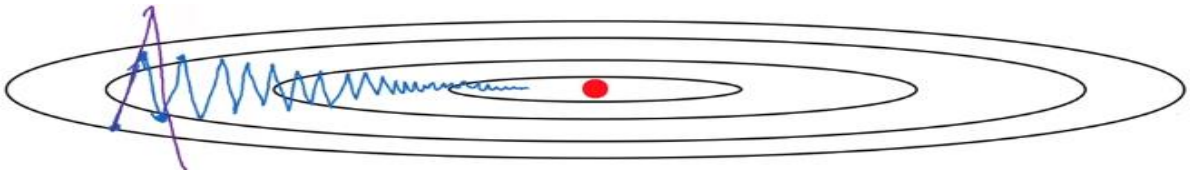
B 증가

-> red line이 약간 오른쪽으로 이동

B 감소

-> red line 안에서 진동 심해짐

[모멘텀 기울기 하강] - 기울기의 지수 가중평균 산출해 가중을 업데이트 하는 것 / 이동평균사용



세로축에서 학습률이 작기를 바람(진동이 커짐을 방지하기 위해) / 가로축에서는 빠른 러닝 원함
변동의 기울기의 평균화를 구하면, 세로축의 방향의 변동은 거의 0에 가까운 값으로 평균화됨
가로축 방향은 모든 미분이 가로 방향의 오른쪽을 가리켜 평균이 꽤 크기에 빠르게 움직임
미니 배치가 전체 훈련셋인 경우, 즉 배치 기울기 하강일 경우 잘 작동해 dw(큼), db(작음) 계산

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

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

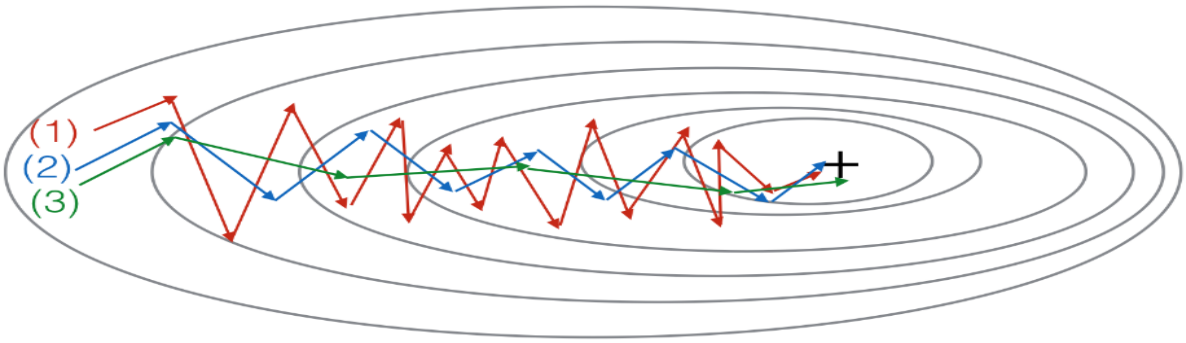
$$W = W - \alpha v_{dW},\ b = b - \alpha v_{db}$$

dW, db : 경사 아래로 내려가고 있는 악셀 역할

V_dw, V_db (모멘텀항) : 속도

B(<1) : 마찰력 역할, 제한없이 속도가 붙는 것을 막아줌

하이퍼파라미터 alpha(고정) ,Beta(0.9) : 지수 가중 평균 조정



(1) : gradient descent

(2) : gradient descent with momentum (small B)

(3) : gradient descent with momentum (large B)

[RMS prop] (Root Mean Square)

S_dw = B * S_dw + (1-B) * dW^2

S_db = B * S_db + (1-B) * db^2

$$W := W - \alpha \frac{dW}{\sqrt{S_{dW}}} \qquad b := b - \alpha \frac{db}{\sqrt{S_{db}}}$$

W방향(가로방향) – 빠른 학습

b방향(세로방향) – 느린 학습 원함 (느린 학습으로 진동 큼을 방지, 기울기 클수록 빠른 학습)

가로방향의 변동은 증가시키고, 세로방향의 변동은 늦추고 싶기에 S_dw는 상대적으로 작고, S_db는 상대적으로 큰 값이 되어야 한다.

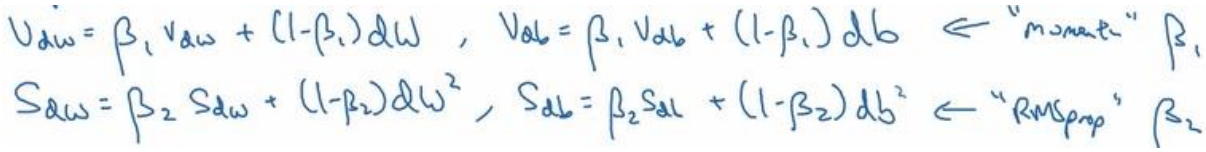
=> 그래야 W의 변화량이 커지고, b의 변화량이 작아진다.

=> S_db가 큰 값이므로, 기울기는 b방향으로 더 크게 된다.

진동을 감소시키는 효과가 있고, 감소시키면 더 큰 learning rate를 사용할 수 있고, 속도 증가됨

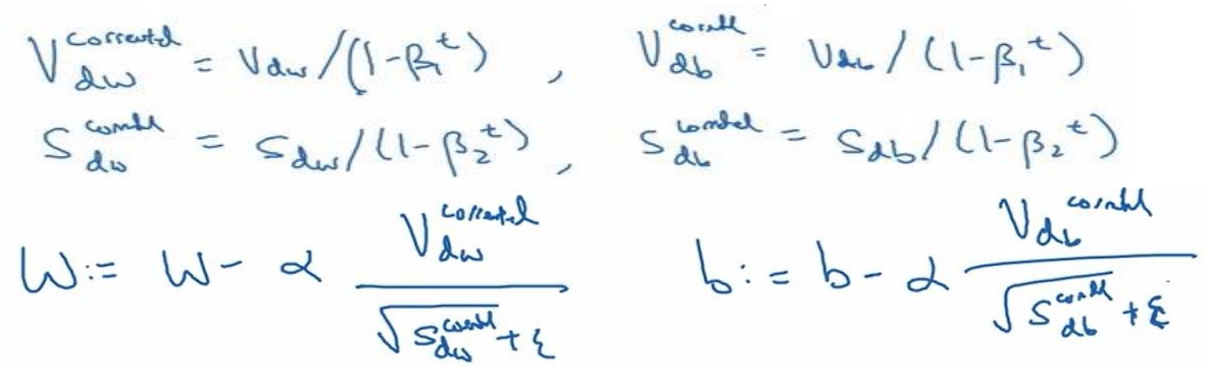
[Adam] – RMSprop + 모멘텀 => 적응적인 모멘트 추정

V_dw = V_db = S_dw = S_db = 0



Adam은 바이어스 수정도 같이 함

- 바이어스 수정 후의 평균 (Beta의 제곱 취해줌)



<하이퍼파라미터>

alpha(learning_rate) : 조정

Beta1(가중평균 dw / 모멘텀과 같은 항) : 0.9 -> 미분의 평균값 (1차 모멘트)

Beta2(이동 가중 평균 dw^2) : 0.999 -> 제곱의 지수 가중 평균 계산 (2차 모멘트)

[학습률 감소]

: 학습 알고리즘 속도를 높이기 위해 시간이 지남에 따라 학습률을 천천히 줄이는 것

학습률 고정 + 잡음 -> 최저점에 수렴 못할 가능성 있음, 주변 배회

학습률 큰 동안 비교적 빠른 학습, 학습률 작으면 최소의 좁은 지역에서 진동

1 epoch = 데이터를 한 번 통과

$$\alpha = \frac{1}{1+decayRate \times epochNumber}\alpha_0$$

decay-rate : 학습률 감소율

alpha0 : 초기 학습률

Epoch	α
1	0.1
2	0.067
3	0.05
4	0.04

ex) 초기 학습률 = 0.2

/ 학습률 감소율 = 1

학습률 점차 감소

<지수 감소>

alpha = 0.95^epoch_num * alpha0 : 학습률을 기하급수적으로 떨어트림

alpha = (k / sqrt(epoch_num)) * alpha0

alpha = (k / sqrt(t)) * alpha0 (t : 미니배치 수)

[로컬 옵티마]

안장점(saddle point) : 비용 함수에서 기울기가 0인 지점

plateaus : 실제로 학습속도를 늦출 수 있으며, 미분이 오랫동안 0에 가까운 영역
-> 이 구간을 빠져나오기 위한 시간이 오래 걸림 => 학습을 늦추게 하는 요소 => 문제 !!

비교적 신경망이 큰 네트워크를 훈련하는 이상, 안좋은 local optima에 갇힐 확률은 작으며 비용 함수는 비교적 고차원의 공간에서 정의된다. 또한 plateaus가 문제가 돼서 학습의 속도를 저하할 수 있는데, 모멘텀 / RMSprop / Adam과 같은 알고리즘이 plateaus를 빠져나오는 속도를 높인다.

[하이퍼 파라미터 튜닝]

<중요도>
학습률 alpha > 모멘텀 Beta(0.9) / 은닉층 개수 / 미니배치 size
> 층 개수 / 학습률 감소 > Adam Beta1(0.9) , Beta2(0.999), epsilon(10^-8)

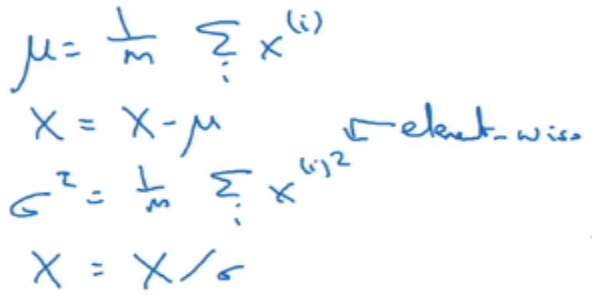
<집합> - 그리드서치 사용하지 않고, 무작위로 추출하는 것이 더 좋다.

➔ 특정 범위의 유효한 값에서 균일화된 임의의 작업은 아님

➔ 적절한 척도를 사용해 하이퍼파라미터 탐색해야

범위 지정(ex. 은닉노드 수, 층 개수) / 범위 지정 + 로그 스케일(더욱 균등하게) (ex. 학습률)
/ 범위 지정 + 로그 스케일 + 지수 가중 평균(ex. 베타) -> B값은 1에 가까울수록 민감

[배치 정규화] – 입력 기능을 정규화하면 학습 속도 높임



a[2]은 다음 층(w[3], b[3])의 입력이기에 훈련에 영향을 준다. -> a[2]가 아닌 z[2]를 정규화

배치 노름 도입 (층[l] 생략) : 평균값, 분산 계산하고, 값을 빼고 나누는 것

$$\mu = \frac{1}{m}\sum_i z^{(i)}$$

$$\sigma^2 = \frac{1}{m}\sum_i (z^{(i)} - \mu)^2$$

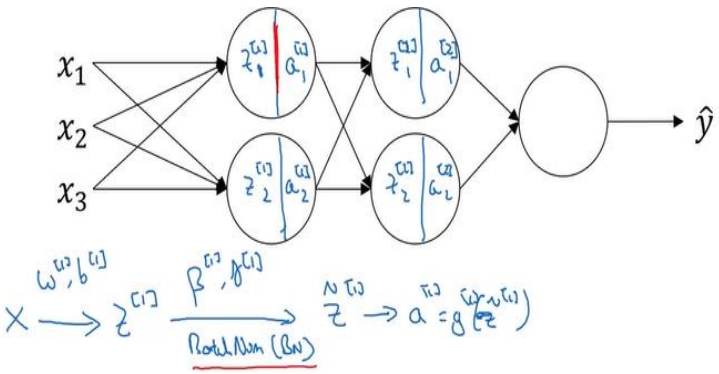
$$z^{(i)}_{\text{norm}} = \frac{z^{(i)} - \mu}{\sqrt{\sigma^2 + \varepsilon}}$$

$$\tilde{z}^{(i)} = \gamma z^{(i)}_{\text{norm}} + \beta$$

모델의 학습 가능한 파라미터(r, B)
=> RMS prop, Adam을 이용

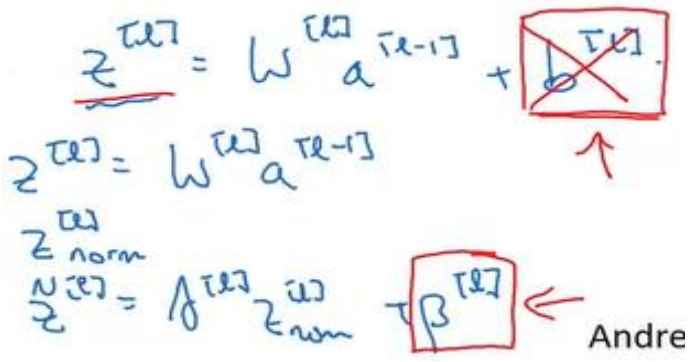
IF r(gamma) = sqrt(시그마^2 + epsilon), B(Beta) = 뮤, -> z틸다(i) = z(i)

입력층 뿐만 아니라 신경망의 일부 은닉층까지 정규화를 적용하는데, 은닉 단위가 강제적으로 평균0, 분산1이 되는 것을 원치 않는다. (비선형 활성화함수 원해서)
=> r, B 조정해서 은닉 단위 값(z(i))들의 일부 고정된 평균과 분산을 갖도록 정규화 (조정 안하면 은닉 유닛은 항상 평균0, 분산1)



첫번째 은닉층에 맞는 입력 X
→ z[1] 값 산출
→ 배치노름 적용해
정규화된 틸다 z[1]
→ 활성화함수 a[1] = g[1](틸다z[1])
→ z[2] 값 산출

배치 노름은 훈련셋의 미니 배치와 같이 적용된다. (배치노름은 한 번에 하나의 미니배치로 처리)



- z[l] 값들에 대해서 배치 노름은 평균값을 0으로 만들기 때문에 b[l] 파라미터를 갖는 의미 없다.
-> B(Beta)[l]로 대체 : 이동이나 바이어스 항들에 영향을 주는 파라미터

z[l]의 차원 : (n[l], 1) b[l]의 차원 : (n[l], 1)
B[l], r[l]의 차원 : (n[l], 1) – 각각 은닉에 대해 B[l], r[l]을 통해 평균값과 분산이 스케일링되기에 n[l]

배치 노름이 잘 작동하는 이유
- 입력특성을 정규화하여 학습의 속도 증가시킴 (입력뿐만 아니라 은닉층에도 정규화 적용)
- 정규화를 통해 ,W 변화에 덜 민감해짐

데이터의 분포가 변함 : 공변량 변화 (ex. 검은 고양이 사진 로지스틱회귀로 분류하는 것을 유색 고양이 에 적용하면 분류기가 잘 동작하지 않을 수 있어 다시 학습시켜야 할 수 있다.)

파라미터가 변하면 은닉 단위의 값은 항상 변하는 것이고, 공변량 변화 문제가 생김
-> 배치 노름을 적용해 평균/분산이 같게 해주어 은닉 단위 값의 분포가 이동하는 양을 줄여준다.

일반화 효과
- 미니배치로 평균/분산 계산했기에 전체 데이터로 구했을 때보다 더 잡음이 많다.
- 드롭아웃도 은닉층 활성화에 잡음을 더한다.
=> 더 큰 미니배치 크기 이용하면, 잡음을 줄이고 일반화 효과를 줄인다.

[테스트셋에서 배치노름]

$$\mu = \frac{1}{m}\sum_i z^{(i)}$$

$$\sigma^2 = \frac{1}{m}\sum_i (z^{(i)} - \mu)^2$$

$$z^{(i)}_{\text{norm}} = \frac{z^{(i)} - \mu}{\sqrt{\sigma^2 + \varepsilon}}$$

$$\tilde{z}^{(i)} = \gamma z^{(i)}_{\text{norm}} + \beta$$

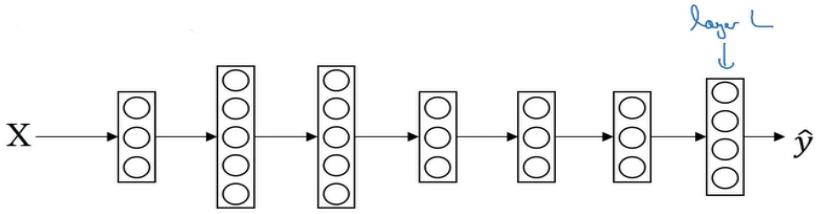
m : 미니배치 개수
test에선 미니배치가 없을 수 있다.(한번에 처리)
-> 뮤와 시그마제곱을 계산하는 다른방법 필요
* 일반적인 배치 정규화는 지수 가중 평균을 이용해 미니 배치에서의 값으로 예측하여 구함

최종 네트워크를 통해 전체 미니배치에서 전체 훈련셋을 실행시켜 뮤와 시그마제곱을 가지지만, 지수 가중 평균을 도입해 뮤와 시그마제곱값을 추적한다. <running average>

[소프트맥스] – C 중 하나 또는 여러 클래스 중 하나를 인식해 예측
(입력을 범주화하려는 클래스의 수 = C)

다른 결과값들에 거쳐 정규화가 되어야 한다. => 벡터의 값을 갖고, 결과값도 벡터로 가져야 함

출력층(output layer)의 노드 수 n[l] = C
ex) C = 4 // 첫번째 노드는 C=0일 확률, … , 마지막 네번째 노드는 C=3일 확률 -> 확률의 합=1
결과값 y_hat : (4, 1) 차원의 벡터



마지막 층 L
z[L] = w[L] * a[L-1] + b[L]
-> z[L]에 softmax 적용

t = e^(z[L]) (shape : (4, 1))
a[L] = e^(z[L]) / sum(t_i) = t_i / sum(t_i) = y_hat = g[L](z[L]) (shape : (4, 1))

- 시그모이드 : 실수를 입력하고 실수를 출력
- 소프트맥스 : 다른 결과값들에 거쳐 정규화가 되고, 벡터를 입력하고 벡터로 출력

$$z^{[L]} = \begin{bmatrix} 5 \\ 2 \\ -1 \\ 3 \end{bmatrix} \qquad t = \begin{bmatrix} e^5 \\ e^2 \\ e^{-1} \\ e^3 \end{bmatrix}$$

$$g^{[L]}(z^{[L]}) = \begin{bmatrix} e^5/(e^5+e^2+e^{-1}+e^3) \\ e^2/(e^5+e^2+e^{-1}+e^3) \\ e^{-1}/(e^5+e^2+e^{-1}+e^3) \\ e^3/(e^5+e^2+e^{-1}+e^3) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.842 \\ 0.042 \\ 0.002 \\ 0.114 \end{bmatrix} = a[L]$$

- hard max : 벡터 z를 가져와서 이 벡터와 일치시킴
  => z의 요소들 중 가장 큰 요소에 1을 넣고 나머진 0으로 채움

소프트맥스가 로지스틱 활성화 함수를 두개의 클래스가 아닌 C 클래스로 일반화 함
IF C = 2, 로지스틱 회귀분석으로 됨 -> 단일 출력을 계산하는 방식으로 축소됨

ex) y = [0 1 0 0] (ground truth)

y_hat = [0.3 0.2 0.1 0.4] => 신경망이 잘 예측하지 못한 것이다.

손실함수 = -(y1 * log(y1_hat) + y2 * log(y2_hat) + y3 * log(y3_hat) + y4 * log(y4_hat))

= - y2 * log(y2_hat) = - log(y2_hat)

** y1 = y3= y4 = 0

손실함수를 최소화하려면 y2_hat을 크게 해야 하는데, 가장 큰 값이 아니다.

역전파 dz[L] = y_hat – y

[tensorflow 코드]