Deep Learning for Time Series Forecasting

2022,07,22, 김동현









02, Loss Function

03. Numerical Differentiation

04, Gradient

05. Algorithms



Ch 4. 신경망 학습



01. Data Set Split

- Training Data(훈련 데이터) / Test Data(시험 데이터)
- -> 범용적으로 사용할 수 있는 모델을 만들기 위해.
- 범용 능력
- : 아직 보지 못한 Data(Training Data에 포함되지 않는 Data)로도 문제를 올바르게 풀어내는 능력
- Overfitting
- : 한 Dataset에만 지나치게 최적화(over-optimized)된 상태



02, Loss Function

- NN에서 사용하는 지표
- ✓ 일반적으로 사용하는 지표 종류
 - 1) SSE: Sum of Squares for Error
 - 2) CEE: Cross Entropy Error
- 신경망 성능의 '나쁨 ' 을 나타내는 지표
- : NN이 training data를 얼마나 잘 처리하지 못하는지를 나타냄.



02. Loss Function 02–1. SSE

- Formula : $E = \sum_k (y_k t_k)^2$
- $-y_k$: NN의 출력(추정한 값)
- $-t_k$: 정답 레이블

[8]: 0.5975

-k: 데이터의 차원 수

```
[5]: # 4.2.1. 오차제곱할(SSE) #

def sum_squares_error(y, t):
    return 0.5 * np.sum((y-t)**2)

[6]: # 정답은 '2'
    t = [0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0] # One-Hot Encoding

[7]: # Example 1 : '2'일 확률이 가장 높다고 추정할(0.6)
    y = [0.1, 0.05, 0.6, 0.0, 0.05, 0.1, 0.0, 0.1, 0.0, 0.0]
    sum_squares_error(np.array(y), np.array(t))

[7]: 0.09750000000000003

[8]: # Example 2 : '7'일 확률이 가장 높다고 추정할(0.6)
    y = [0.1, 0.05, 0.1, 0.0, 0.05, 0.1, 0.0, 0.6, 0.0, 0.0]
    sum_squares_error(np.array(y), np.array(t))
```



02. Loss Function 02-2. CEE

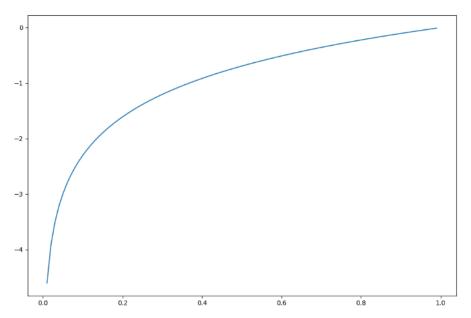
• Formula : $E = -\sum_k t_k \log y_k$

 $-y_k$: NN의 출력(추정한 값)

 $-t_k$: 정답 레이블

-k: 데이터의 차원 수

• Graph: $y = \log x$



- x가 1일 때 y는 0이 되고, x가 0에 가까워질수록 y값은 점점 작아짐.
- -> CEE도 마찬가지로, 정답에 해당하는 출력이 커질수록 0에 다가가다가, 그 출력이 1일 때 0이 됨.



02. Loss Function 02-2. CEE

```
[9]: # 4.2.2. 교水 앤트로피 오차(CEE) #

def cross_entropy_error(y, t):
    delta = 1e-7
    return -np.sum(t * np.log(y + delta))

[10]: # 정답은 '2'
    t = [0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0] # One-Hot Encoding

[11]: # Example 1 : '2'일 확률이 가장 높다고 추정함(0.6)
    y = [0.1, 0.05, 0.6, 0.0, 0.05, 0.1, 0.0, 0.1, 0.0, 0.0]
    cross_entropy_error(np.array(y), np.array(t))

[11]: 0.510825457099338

[12]: # Example 2 : '7'일 확률이 가장 높다고 추정함(0.6)
    y = [0.1, 0.05, 0.1, 0.0, 0.05, 0.1, 0.0, 0.6, 0.0, 0.0]
    cross_entropy_error(np.array(y), np.array(t))

[12]: 2.302584092994546
```

Q) np.log를 계산할 때 delta를 더한 이유?

A) log(0)은 -inf가 되어 더 이상 계산을 진행할 수 없기에, 아주 작은 값을 더해 절대 0이 되지 않도록 하기 위해서 설정해준 것.



02. Loss Function 02-3. Mini-Batch Training

- Training Data에 대한 Loss Function 값을 구하고, 그 값을 최대한 줄여주는 매개변수를 찾아냄.
- -> 대상: 모든 Training Data
- CEE Formula : $E = -\frac{1}{N} \sum_{n} \sum_{k} t_{nk} \log y_{nk}$
- $-y_{nk}$: NN의 출력(추정한 값)
- $-t_{nk}$: 정답 레이블
- -k: 데이터의 차원 수
- N: 데이터 개수
- 첨자 nk: n번째 데이터의 k번째 값
- Training Data로부터 일부만 골라 학습 진행 -> Mini-Batch



02. Loss Function 02-4. Why?

- 목표: 높은 정확도를 끌어내는 매개변수 값을 찾는 것
 Q) 'Accuracy' 대신 'Loss Function'을 택하는 이유?
 A) NN에서의 '미분(Differentiation)'의 역할에 주목하면 해결됨.
- NN 학습에서는 최적의 매개변수(가중치, 편향)를 탐색할 때, Loss Function의 값을 가능한 작게 하는 매개변수 값을 찾음.
- -> 매개변수의 미분을 계산, 그 미분 값을 단서로 매개변수의 값을 서서히 갱신하는 과정 반복.
- 의미: 가중치 매개변수의 값을 아주 조금 변화시켰을 때, Loss Function이 어떻게 변하나?



02. Loss Function 02-4. Why?

"신경망을 학습할 때 정확도를 지표로 삼아서는 안 된다. 정확도를 지표로 하면 매개변수의 미분이 대부분의 장소에서 0이 되기 때문이다."

- 정확도(Accuracy)는 매개변수의 미소한 변화에는 거의 반응을 보이지 않고, 있다 하더라도 그 값이 불연속적으로 갑자기 변화함.
- -> 계단 함수(Step Function)를 활성화 함수로 사용하지 않는 이유와 동일함.
- Step Function은 한순간만 변화를 일으키지만, Sigmoid Function의 미분은 출력이 연속적으로 변하고 곡선의 기울기도 연속적으로 변함.
- -> 미분 값은 어느 장소라도 0이 되지 않음(중요한 성질).



03. Numerical Differentiation 03-1. Differentiation

• Formula :
$$\frac{\mathrm{d}f(x)}{\mathrm{d}x} = \lim_{h \to 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$

```
[18]: def numerical_diff(f, x):
    h = 1e-4 # 0.0001
    return (f(x+h) - f(x-h)) / (2*h)
```

- Key points
- 1) 미세한 값 $h = 10^{-4}$ 로 설정함. 이 정도의 값을 사용하면 좋은 결과를 얻는다고 알려져 있음.
- 2) 수치 미분에는 오차가 포함됨. 이를 줄이기 위해, (x+h)와 (x-h)일 때의 함수 f의 차분을 계산하는 방법을 씀. -> 중심 차분, 중앙 차분



03. Numerical Differentiation 03-1. Differentiation

• **Example :** $y = 0.01x^2 + 0.1x$

```
[19]: # Example #
    def function_1(x):
        return 0.01*x**2 + 0.1*x

[20]: # Numerical Differentiation Apply #
    numerical_diff(function_1, 5)

[20]: 0.1999999999999898

[21]: numerical_diff(function_1, 10)

[21]: 0.2999999999986347
```

- 해석적 해 : $\frac{\mathrm{d}f(x)}{\mathrm{d}x} = 0.02x + 0.1$
- Ex 1) x = 5일 때 0.2
- Ex 2) x = 10일 때 0.3



03. Numerical Differentiation 03-2. Partial Differentiation

• Example : $f(x_0, x_1) = x_0^2 + x_1^2$

Q1) x_0 = 3, x_1 = 4일 때, x_0 에 대한 편미분? / A) 해석적 해 : $2x_0 = 6$

```
[23]: def function_tmp1(x0):
    return x0*x0 + 4.0**2.0

numerical_diff(function_tmp1, 3.0)
```

[23]: 6.00000000000378

Q2) x_0 = 3, x_1 = 4일 때, x_1 에 대한 편미분? / A) 해석적 해 : $2x_1 = 8$

```
[24]: def function_tmp2(x1):
    return 3.0**2.0 + x1*x1

numerical_diff(function_tmp2, 4.0)
```

[24]: 7.99999999999119



04. Gradient

• 기울기(Gradient): 모든 변수의 편미분을 벡터로 정리한 것

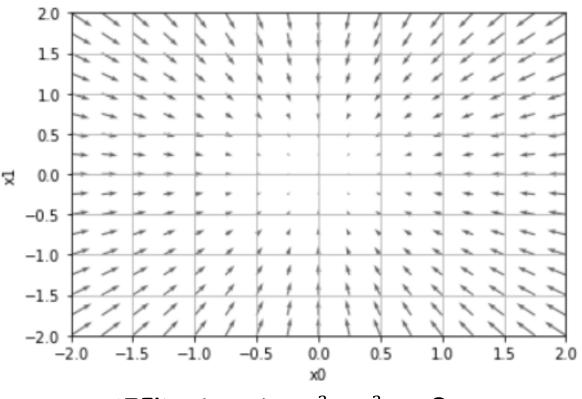
```
[19]: # Example #
[22]: def numerical_gradient(f, x):
                                                                                 def function_2(x):
          h = 1e-4 # 0.0001
         grad = np.zeros like(x) # x와 형상이 같은 배열을 생성
                                                                                    return x[0]^{**2} + x[1]^{**2}
         for idx in range(x.size):
                                                                                numerical gradient(function 2, np.array([3.0, 4.0]))
             tmp_val = x[idx]
             # f(x+h) 계산
                                                                           [27]: array([6., 8.])
             x[idx] = tmp val + h
             fxh1 = f(x)
                                                                           [28]: numerical gradient(function 2, np.array([0.0, 2.0]))
             # f(x-h) 계산
                                                                           [28]: array([0., 4.])
             x[idx] = tmp val - h
             fxh2 = f(x)
                                                                           [29]: numerical gradient(function 2, np.array([3.0, 0.0]))
             grad[idx] = (fxh1 - fxh2) / (2*h)
                                                                           [29]: array([6., 0.])
             x[idx] = tmp val # 값 복원
                                                                           -> 해석적 해 : [2x_0, 2x_1]
          return grad
```

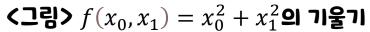
- 기울기는 각 지점에서 낮아지는 방향을 가리킴.
- -> 기울기가 가리키는 쪽은 각 장소에서 함수의 출력 값을 가장 크게 줄이는 방향임.



04. Gradient

Q) '기울기가 가리키는 쪽은 각 장소에서 함수의 출력 값을 가장 크게 줄이는 방향'의 의미?







- 최적의 매개변수(가중치, 편향)를 학습 시에 찾아야 함.
- 일반적인 Loss Function은 복잡하고 최솟값이 되는 곳을 짐작하기 어려움.
- -> 기울기를 잘 이용해 함수의 최솟값을 찾으려는 것(Gradient Method, 경사법)
- 주의점: 각 지점에서 함수의 값을 낮추는 방안을 제시하는 지표가 '기울기' 라는 것
- 기울어진 방향이 꼭 최솟값을 가리키는 건 아님.
- 그 방향으로 가야 함수의 값을 줄일 수 있음.



Q) 과정?

- 현 위치에서 기울어진 방향으로 일정 거리만큼 이동.
- 이동한 곳에서도 마찬가지로 기울기를 구하고, 또 그 기울어진 방향으로 나아가기를 반복.
- -> 함수의 값을 점차 줄이는 것
- 종류
- 1) Gradient Descent Method(경사 하강법) : 최솟값 찾는 것
- 2) Gradient Ascent Method(경사 상승법): 최댓값 찾는 것



• Formula :
$$x_0 = x_0 - \eta \frac{\partial f}{\partial x_0}$$

$$x_1 = x_1 - \eta \frac{\partial f}{\partial x_1}$$

- $-\eta$: 갱신하는 양(Learning Rate, 학습률)
- 방식 : 변수의 값을 갱신하는 단계를 여러 번 반복하면서 서서히 함수의 값을 줄이는 것

Q) Learning Rate 설정?

- 0.01이나 0.0001 등 미리 특정 값으로 정해두어야 함.
- 일반적으로 이 값이 너무 크거나 작으면 '좋은 장소 ' 를 찾아갈 수 없음.
- NN 학습에서는 보통 이 값을 변경하면서 올바르게 학습하고 있는지 확인하면서 진행함.



04. Gradient 04-1. Gradient Method

Q) Gradient Method을 이용한 $f(x_0, x_1) = x_0^2 + x_1^2$ 의 최솟값?

```
[32]: # Gradient Descent #
def gradient_descent(f, init_x, lr=0.01, step_num=100):
    x = init_x

for i in range(step_num):
    grad = numerical_gradient(f, x)
    x -= lr * grad
    return x
```

```
[33]: def function_2(x):
    return x[0]**2 + x[1]**2

init_x = np.array([-3.0, 4.0])
gradient_descent(function_2, init_x=init_x, lr=0.1, step_num=100)
```

[33]: array([-6.11110793e-10, 8.14814391e-10])

- Result : (-6.1e-10, 8.1e-10)
- -> 실제로 진정한 최솟값은 (0, 0)이므로 Gradient method로 거의 정확한 결과를 얻음.



04. Gradient 04-1. Gradient Method

Q) Learning Rate가 너무 크거나 작으면 어떻게 될까?

```
[36]: # 尊音量이 너무 큰 예 : lr=10.0
init_x = np.array([-3.0, 4.0])
gradient_descent(function_2, init_x=init_x, lr=10.0, step_num=100)

[36]: array([-2.58983747e+13, -1.29524862e+12])

[37]: # 尊音量이 너무 작은 예 : lr=1e-10
init_x = np.array([-3.0, 4.0])
gradient_descent(function_2, init_x=init_x, lr=1e-10, step_num=100)

[37]: array([-2.99999994, 3.99999992])
```

- Learning Rate가 큰 경우 : 큰 값으로 발산
- Learning Rate가 작은 경우: 거의 갱신되지 않은 채 끝남
- -> 값을 적절히 설정해주어야 한다는 것을 알 수 있음(Hyper-parameter).



Q) Hyper-parameter?

- Parameter(매개변수): Training Data와 학습 알고리즘에 의해 자동으로 획득되는 변수
- Hyper-parameter(초매개변수): 사람이 직접 설정해야 하는 변수
- -> Hyper-parameter는 여러 후보 값 중에서 시험을 통해 가장 잘 학습하는 값을 찾는 과정을 거쳐야 함.



04. Gradient in NN

- · NN 학습에서도 기울기를 구해야 함.
- 기울기: 가중치 매개변수에 대한 Loss Function의 기울기

Example

- Shape = 2X3, 가중치 = W, Loss Function = L인 NN
- Gradient : $\frac{\partial L}{\partial w}$ (Loss Function L이 얼마나 변화하는지?)

$$w = \begin{pmatrix} w_{11} & w_{12} & w_{13} \\ w_{21} & w_{22} & w_{23} \end{pmatrix}$$

$$\frac{\partial L}{\partial w} = \begin{pmatrix} \frac{\partial L}{\partial w_{11}} & \frac{\partial L}{\partial w_{12}} & \frac{\partial L}{\partial w_{13}} \\ \frac{\partial L}{\partial w_{21}} & \frac{\partial L}{\partial w_{22}} & \frac{\partial L}{\partial w_{23}} \end{pmatrix}$$



04. Gradient on NN

```
[52]: # coding: utf-8
      import sys, os
      sys.path.append(os.pardir) # 부모 디렉터리의 파일을 가져올 수 있도록 설정
      import numpy as np
      from common.functions import softmax, cross_entropy_error
      from common.gradient import numerical gradient
      class simpleNet:
          def __init__(self):
             self.W = np.random.randn(2,3) # 정규분포로 초기화
         def predict(self, x):
             return np.dot(x, self.W)
          def loss(self, x, t):
             z = self.predict(x)
             y = softmax(z)
             loss = cross_entropy_error(y, t)
             return loss
```

• 메서드: 2개

1) predict(x): 예측 수행

2) loss(x, t) : 손실 함수의 값



04. Gradient on NN

```
[63]: net = simpleNet()
print(net.W) # 가중치 메개변수

[[-0.60806075 -0.43637445 -0.89868553]
[-0.66366866 -0.33942224 0.62043004]]

[64]: x = np.array([0.6, 0.9])
p = net.predict(x)
print(p)
print(np.argmax(p)) # 최뎃과의 인텍스

[-0.96213824 -0.56730469 0.01917572]
2

[65]: t = np.array([0, 0, 1]) # 점단 레이블
net.loss(x, t) # 손실함수의 과

[65]: 0.6580896002148787
```

- net.W: np.random.randn(2, 3)으로 나온 가중치 매개변수
- p: 신경망이 예측한 값
- t:정답 레이블
- net.loss(x, t) : 손실함수의 값



04. Gradient on NN

Q) 기울기(Gradient)?

```
[66]: f = lambda w: net.loss(x, t)
dW = numerical_gradient(f, net.W)
print(dW)

[[ 0.11645742   0.17283878 -0.2892962 ]
      [ 0.17468613   0.25925817 -0.4339443 ]]
```

- $\frac{\partial L}{\partial w_{11}}$ 은 대략 0.1 -> w_{11} 을 h만큼 늘리면 Loss Function의 값은 0.1h만큼 증가
- $\frac{\partial L}{\partial w_{23}}$ 은 대략 -0.4 -> w_{23} 을 h만큼 늘리면 Loss Function의 값은 0.4h만큼 감소
- Loss Function을 줄인다는 관점에서 본다면, w_{11} 은 음의 방향으로, w_{23} 은 양의 방향으로 갱신해야 함.
- -> 신경망의 기울기를 구한 다음, Gradient Method에 따라 가중치 매개변수를 갱신하기만 하면 됨.



05. Algorithms

전제

- 신경망에는 적응 가능한 가중치와 편향이 있음.
- 이 가중치와 편향을 Training Data에 적응하도록 조정하는 과정을 '학습 ' 이라 함.

1단계: Mini-Batch(미니배치)

- Training Data 중 일부를 무작위로 가져옴.
- 목표: Mini-Batch의 Loss Function 값을 줄이는 것

2단계: Gradient(기울기) 산출

- 1단계의 목표를 위해 각 가중치 매개변수의 기울기를 구함.
- Gradient는 Loss Function의 값을 가장 작게 하는 방향을 제시함.

3단계: 매개변수 갱신

• Gradient 방향으로 아주 조금 갱신함.

4단계: 반복

- 1~3단계를 반복함.
- -> Stochastic Gradient Descent(확률적 경사 하강법, SGD)



THANK YOU