Deep Learning for Time Series Forecasting

2022.07.22.

김동현

CONTENTS

Book

<Deep Learning from Scratch 1>
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 :** $E = \frac{1}{2}\sum_k (y_k - t_k)^2$
  - y_k : NN의 출력(추정한 값)
  - t_k : 정답 레이블
  - k : 데이터의 차원 수

```
[5]: # 4.2.1. 오차제곱합(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, 0] # One-Hot Encoding
```

```
[7]: # 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]
     sum_squares_error(np.array(y), np.array(t))

[7]: 0.09750000000000003
```

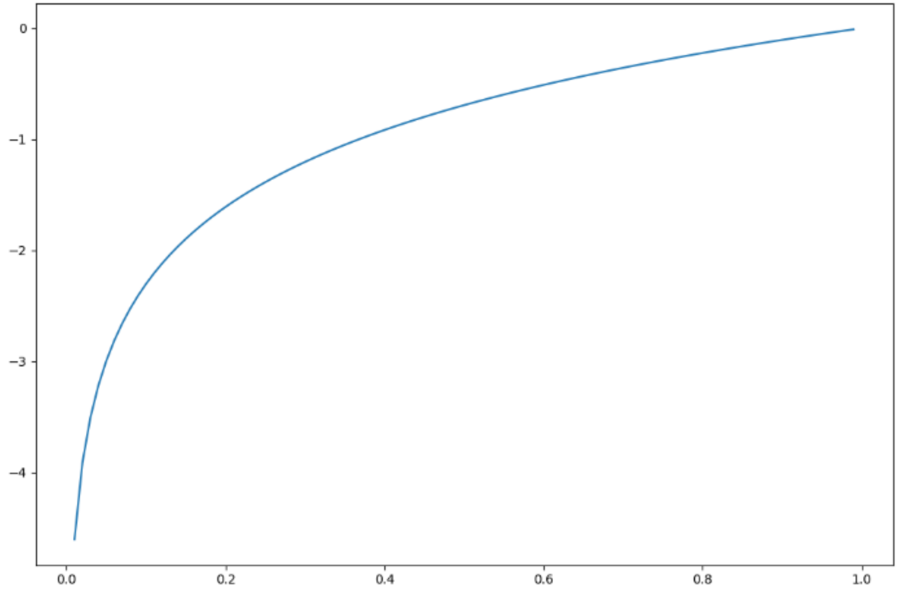
```
[8]: # Example 2 : '7'일 확률이 가장 높다고 추정함(0.6)
     y = [0.1, 0.05, 0.1, 0.0, 0.05, 0.1, 0.0, 0.6, 0.0, 0.0]
     sum_squares_error(np.array(y), np.array(t))

[8]: 0.5975
```

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. 교차 엔트로피 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, 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 :** $\frac{df(x)}{dx} = \lim_{h \to 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$

```
[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]: 0.1999999999990898
```

```
[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]: 7.999999999999119
```

04. Gradient

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

```
[22]: def numerical_gradient(f, x):
          h = 1e-4 # 0.0001
          grad = np.zeros_like(x) # x와 형상이 같은 배열을 생성

          for idx in range(x.size):
              tmp_val = x[idx]
              # f(x+h) 계산
              x[idx] = tmp_val + h
              fxh1 = f(x)

              # f(x-h) 계산
              x[idx] = tmp_val - h
              fxh2 = f(x)

              grad[idx] = (fxh1 - fxh2) / (2*h)
              x[idx] = tmp_val # 값 복원

          return grad
```

```
[19]: # Example #
      def function_2(x):
          return x[0]**2 + x[1]**2

[27]: numerical_gradient(function_2, np.array([3.0, 4.0]))
[27]: array([6., 8.])

[28]: numerical_gradient(function_2, np.array([0.0, 2.0]))
[28]: array([0., 4.])

[29]: numerical_gradient(function_2, np.array([3.0, 0.0]))
[29]: array([6., 0.])
```

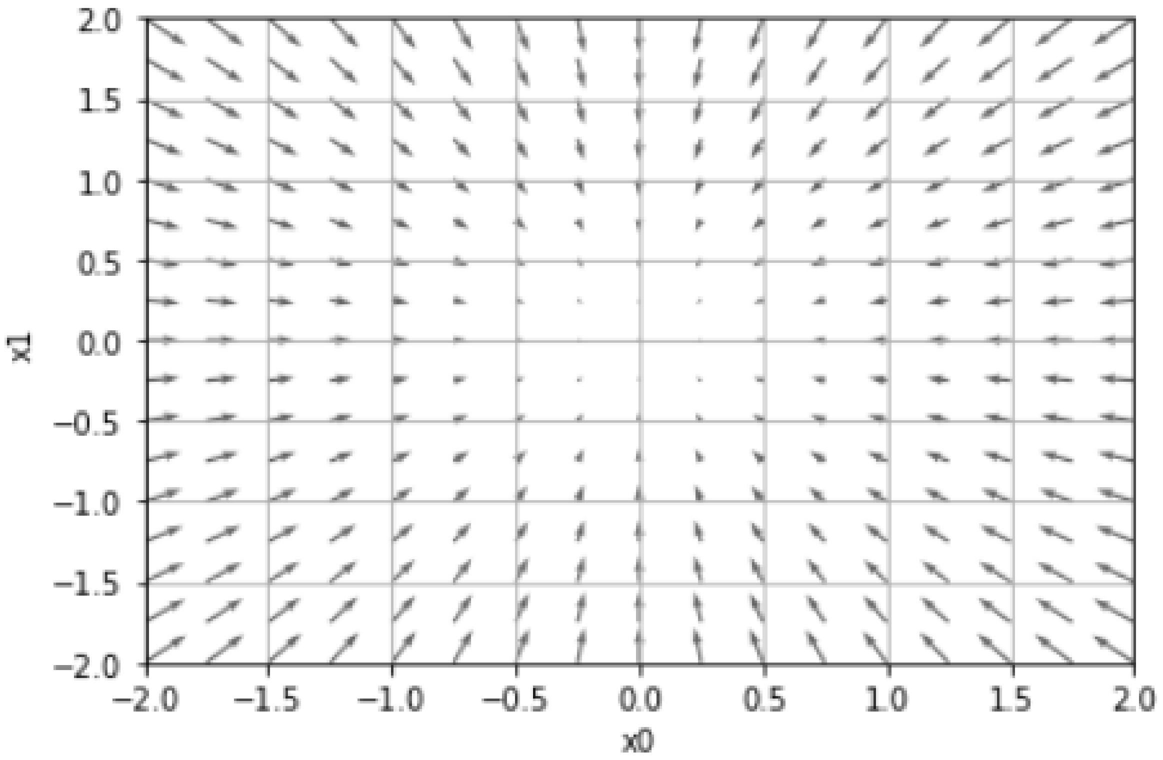
-> 해석적 해 : [$2x_0$, $2x_1$]

- 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?



<그림> $f(x_0, x_1) = x_0^2 + x_1^2$의 기울기

04. Gradient

04-1. Gradient Method

- 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.

04. Gradient

04-1. Gradient Method

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

04. Gradient
04-1. Gradient Method

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

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

 - η : 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]: # 학습률이 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]: # 학습률이 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).

04. Gradient

04-1. Gradient Method

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
04-2. 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

04-2. Gradient in 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

04-2. Gradient in NN

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

[[-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)) # 최댓값의 인덱스

[-0.96213824 -0.56730469  0.01917572]
2

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

[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
04-2. Gradient in 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 $0.1h$만큼 증가
- $\frac{\partial L}{\partial w_{23}}$은 대략 -0.4 -> w_{23}을 h만큼 늘리면 Loss Function의 값은 $0.4h$만큼 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 Gradient를 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