Lecture 05 Deep Learning

Objetivo de la regularización: reducir overfitting

Generalmente se logra reduciendo la capacidad del modelo y/o reduciendo la varianza de las predicciones

Regularización

En el contexto del aprendizaje profundo, la regularización puede ser entendida como el proceso de agregar información o cambiar la función objetivo para prevenir overfitting

Técnicas de regularización comunes para redes neuronales profundas

- Early stopping
- Regularización L_1/L_2 (penalizaciones basadas en normas)
- Dropout

Regularization (mathematics)

From Wikipedia, the free encyclopedia

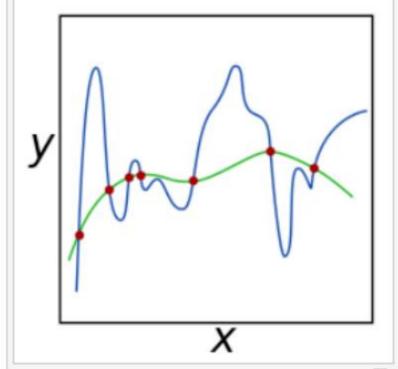


This article only describes one highly specialized aspect of its associated subject. Please help improve this article by adding more general information. The talk page may contain suggestions. (November 2020)

In mathematics, statistics, finance,^[1] computer science, particularly in machine learning and inverse problems, **regularization** is the process of adding information in order to solve an ill-posed problem or to prevent overfitting.^[2]

Regularization applies to objective functions in ill-posed optimization problems. The regularization term, or penalty, imposes a cost on the optimization function for overfitting the function or to find an optimal solution.

In machine learning, regularization is any modification one makes to a learning algorithm that is intended to reduce its generalization error but not its training error^[3]



The green and blue functions both incur zero loss on the given data points. A learned

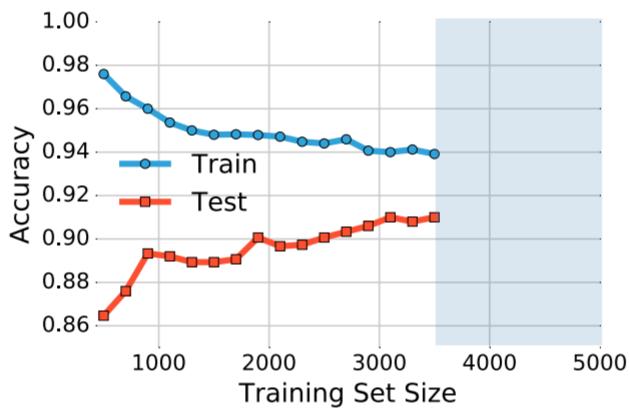
Agenda

- Mejora del rendimiento de la generalización
- Evitar overfitting con (1) más datos y (2) data augmentation
- Reducir la capacidad de la red e early stopping
- \bullet Agregar penalizaciones basadas en normas a la función de costo: L1 y L2
- Dropout



Primer paso para mejorar el rendimiento: enfocarse en el conjunto de datos en sí

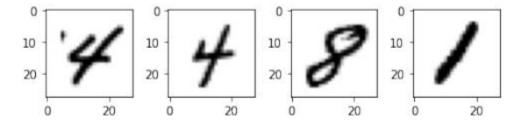
A menudo, la mejor forma de reducir el *overfitting* es obteniendo más datos



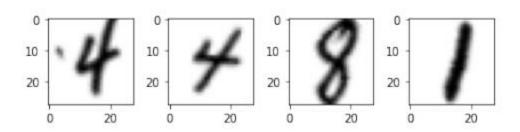
Softmax on MNIST subset (test set size is kept constant)

Data augmentation en PyTorch a través de TorchVision

Original



Randomly Augmented



```
# Note transforms.ToTensor() scales input images
# to 0-1 range
training transforms = torchvision.transforms.Compose([
    torchvision.transforms.Resize(size=(32, 32)),
    torchvision.transforms.RandomCrop(size=(28, 28)),
    torchvision.transforms.RandomRotation(degrees=30, interpolation=PIL.Image.BILINEAR),
    torchvision.transforms.ToTensor(),
    torchvision.transforms.Normalize(mean=(0.5,), std=(0.5,)),
    # normalize does (x_i - mean) / std
    # if images are [0, 1], they will be [-1, 1] afterwards
test transforms = torchvision.transforms.Compose([
    torchvision.transforms.ToTensor(),
    torchvision.transforms.Resize(size=(32, 32)),
    torchvision.transforms.CenterCrop(size=(28, 28)),
    torchvision.transforms.Normalize(mean=(0.5,), std=(0.5,)),
# for more see
# https://pytorch.org/docs/stable/torchvision/transforms.html
train_dataset = datasets.MNIST(root='data',
                               train=True,
                               transform=training_transforms,
                               download=True)
test_dataset = datasets.MNIST(root='data',
                              train=False,
                              transform=test_transforms)
```

```
# Note transforms.ToTensor() scales input images
# to 0-1 range
training transforms = torchvision.transforms.Compose([
    torchvision.transforms.Resize(size=(32, 32)),
    torchvision.transforms.RandomCrop(size=(28, 28)),
    torchvision.transforms.RandomRotation(degrees=30, interpolation=PIL.Image.BILINEAR),
    torchvision.transforms.ToTensor(),
    torchvision.transforms.Normalize(mean=(0.5,), std=(0.5,)),
    # normalize does (x_i - mean) / std
    # if images are [0, 1], they will be [-1, 1] afterwards
1)
                                              Use (0.5, 0.5, 0.5) for RGB images
test transforms = torchvision.transforms.Compo
    torchvision.transforms.ToTensor(),
    torchvision.transforms.Resize(size=(32, 32)),
    torchvision.transforms.CenterCrop(size=(28, 28)),
    torchvision.transforms.Normalize(mean=(0.5,), std=(0.5,)),
1)
# for more see
# https://pytorch.org/docs/stable/torchvision/transforms.html
train_dataset = datasets.MNIST(root='data',
                               train=True,
                               transform=training_transforms,
                               download=True)
test_dataset = datasets.MNIST(root='data',
                              train=False,
                              transform=test transforms)
```

Reducir la capacidad de la red e Early stopping o parada anticipada

Paso 1: separar el conjunto de datos en 3 partes (siempre recomendado)

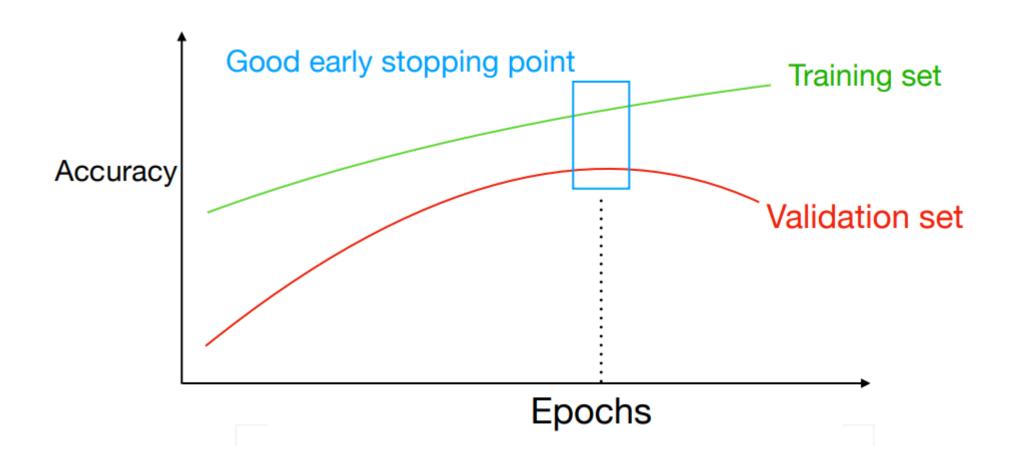
- Usar los datos de test solo una vez al final (para una estimación no sesgada del rendimiento de generalización)
- Usar la precisión de validación para el ajuste

Dataset

Training Validation Test dataset dataset

Paso 2: parada anticipada (no es muy común actualmente)

• Reducir *overfitting* mediante la observación de la brecha de precisión de entrenamiento/validación y luego parar en el punto "correcto"



Agregar una penalización contra la complejidad Regularización L_1 y L_2

- Regularización- $L_1 \rightarrow \text{Regresión LASSO}$
- Regularización- $L_2 \to \text{Regresión Ridge (Regularización de Tikhonov)}$

Básicamente, una "restricción a la magnitud de los pesos" o una "penalización contra la complejidad"

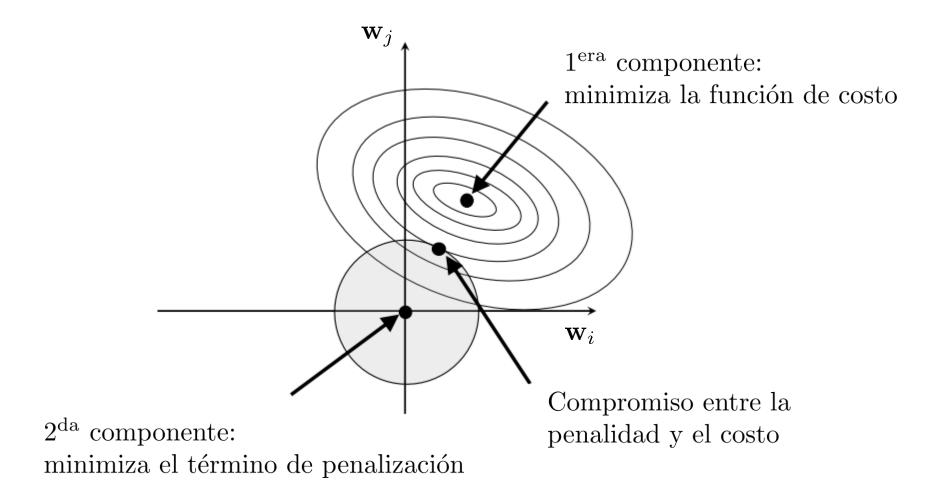
Regularización L₂ para modelos lineales (e.g. regresión logística)

$$\operatorname{Cost}_{\mathbf{w},\mathbf{b}} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \mathcal{L}(y^{[y]}, \hat{y}^{[i]})$$

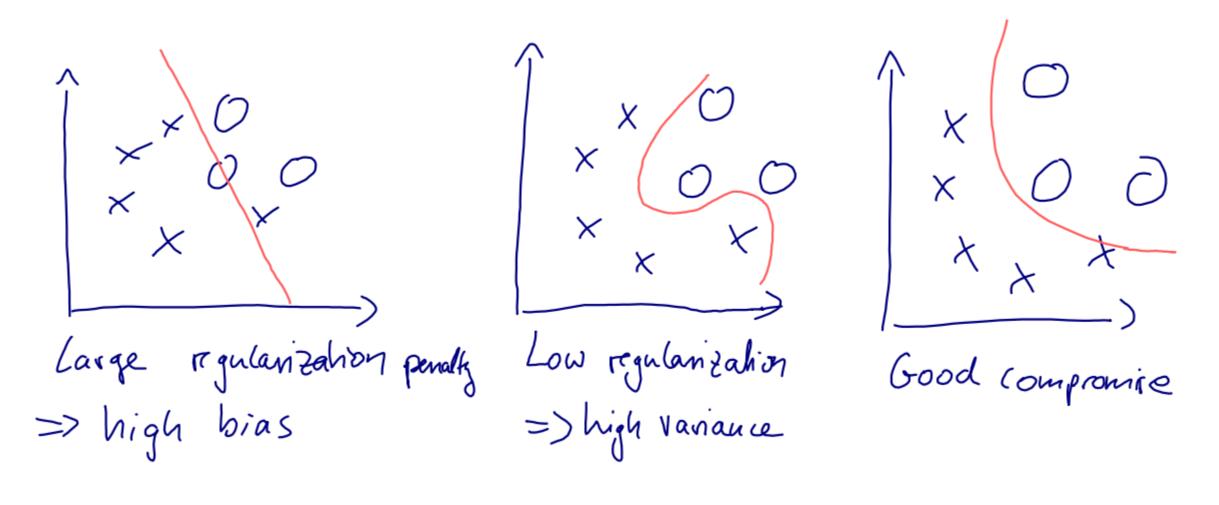
$$\operatorname{L2-Regularized-Cost}_{\mathbf{w},\mathbf{b}} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \mathcal{L}(y^{[y]}, \hat{y}^{[i]}) + \frac{\lambda}{n} \sum_{j} w_{j}^{2}$$

Donde: $\sum_{i} w_{i}^{2} = ||\mathbf{w}||_{2}^{2}$ y λ es un hiperparámetro.

Interpretación geométrica de la Regularización L₂



Efectos de las sanciones normativas en la frontera de decisión



Regularización L₂ para redes neuronales

L2-Regularized-Cost_{**w**,**b**} =
$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \mathcal{L}(y^{[y]}, \hat{y}^{[i]}) + \frac{\lambda}{n} \sum_{l}^{L} ||\mathbf{w}^{(l)}||_{F}^{2}$$
Suma sobre las capas

Donde: $||\mathbf{w}^{(l)}||_F^2 = \sum_i \sum_j \left(w_{i,j}^{(l)}\right)^2$ es la norma de Frobenius al cuadrado.

Regularización L₂ para redes neuronales

Actualización para el gradiente descendente regular:

$$w_{i,j} := w_{i,j} - \eta \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial w_{i,j}}$$

Actualización para el gradiente descendente con regularización L2:

$$w_{i,j} := w_{i,j} - \eta \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial w_{i,j}} \middle| + \frac{2\lambda}{n} w_{i,j} \right)$$

Regularización L₂ para redes neuronales en PyTorch

```
# regularize loss
L2 = 0.
for name, p in model.named_parameters():
    if 'weight' in name:
        L2 = L2 + (p**2).sum()

cost = cost + 2./targets.size(0) * LAMBDA * L2

optimizer.zero_grad()
cost.backward()
```

Regularización L₂ para redes neuronales en PyTorch

Automáticamente,

```
## Apply L2 regularization
optimizer = torch.optim.SGD(model.parameters(),
                        lr=0.1,
                       weight_decay=LAMBDA)
for epoch in range(num epochs):
   #### Compute outputs ####
   out = model(X_train_tensor)
   #### Compute gradients ####
   cost = F.binary cross entropy(out, y train tensor)
   optimizer.zero grad()
   cost.backward()
```

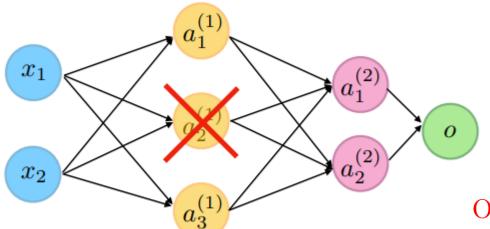
Dropout

Artículos de investigaciones originales:

Hinton, G. E., Srivastava, N., Krizhevsky, A., Sutskever, I., & Salakhutdinov, R. (2012). Improving neural networks by preventing co-adaptation of feature detectors. arXiv preprint arXiv:1207.0580.

Srivastava, N., Hinton, G., Krizhevsky, A., Sutskever, I., & Salakhutdinov, R. (2014). Dropout: a simple way to prevent neural networks from overfitting. The Journal of Machine Learning Research, 15(1), 1929-1958.

Dropout en pocas palabras: eliminación de nodos



Originalmente, la probabilidad de eliminación era de 0.5, pero actualmente es común encontrar valores de 0.2 - 0.8

Dropout en pocas palabras: eliminación de nodos

¿Comó se eliminan nodos eficientemente?

Muestreo de Bernoulli (durante el entrenamiento):

- p := probabilidad de eliminación
- v := muestra aleatoria de una distribución uniforme en el rango [0,1]
- $\forall i \in v : u_i := 0 \text{ si } u_i$
- $a := a \odot v \ (p \times 100\% \text{ de las activaciones } a \text{ será } 0)$

Después del entrenamiento, durante la "inferencia", se deben escalar las activaciones a través de: $a:=a\bigcirc(1-p)$

¿Por qué es necesario?

¿Preguntas?