10주차_최적화 알고리즘

링크 https://velog.io/@pehye89/Euron-10주차-최적화-알고리즘

1 more property

💯 출석퀴즈

미니 배치 경사하강법

1차적으로 훈련을 최적화하는 것은 벡터화가 있었다. 하지만 x가 오백만개가 있다면 벡터화를 해도 오래걸릴 수 있다. 만약 데이터가 많아진다면, 배치 경사 하강법보다 미니 배치 경사 하강법이 훨씬 더 효과적이다.

> 💡 **배치 경사 하강법** : 한번에 모든 훈련 샘플에 대해 훈련 후 경사 하강 진행
> **미니배치 경사 하강법** : 전체 훈련 샘플을 작은 훈련 세트인 미니배치로 나눈 후 미니배치 훈련 후 경사하강을 진행한다.

50000개에 X와 Y데이터를 1000개씩 나눠서 총 t개의 미니배치를 만들어준다.

$X = [x^{(1)}, x^{(2)}, x^{(3)}, \dots, x^{(m)}]$, where $m = 50000$
$X = [x^{(1)}, x^{(2)}, x^{(3)}, \dots, x^{(1000)} \mid x^{(1001)}, x^{(1002)}, \dots, x^{(2000)} \mid \dots \mid \dots., x^{(m)}]$
where $x^{\{1\}} = x^{(1)}, x^{(2)}, x^{(3)}, \dots, x^{(1000)}$ as the first mini-batch of X

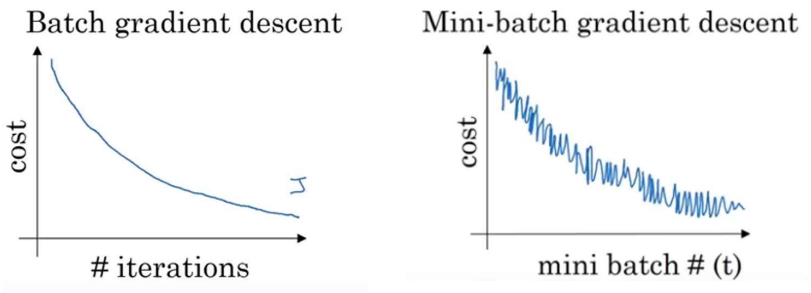
$Y = [y^{(1)}, y^{(2)}, y^{(3)}, \dots, y^{(m)}]$, where $m = 50000$
$Y = [y^{(1)}, y^{(2)}, y^{(3)}, \dots, y^{(1000)} \mid y^{(1001)}, y^{(1002)}, \dots, y^{(2000)} \mid \dots \mid \dots., y^{(m)}]$
where $y^{\{1\}} = y^{(1)}, y^{(2)}, y^{(3)}, \dots, y^{(1000)}$ as the first mini-batch of Y

미니 배치 하강법의 for loop

`for t=1, … ,5000` : ← 각 미니배치를 for loop을 통해 돌리는 것
`forward prop` on $x^{\{t\}}$
$z^{[1]} = W^{[1]}x^{\{t\}} + b^{[1]}$
$A^{[1]} = g^{[1]}(Z^{[1]})$
$\vdots$
$A^{[l]} = g^{[l]}(Z^{[l]})$
$J^{\{t\}} = \frac{1}{1000}\sum_{i=1}^{l} L(\hat{y}^{(i)}, y^{(i)}) + \frac{\lambda}{2*1000}\sum ||w^{[l]}||_F^2$
where these y's are from the mini-batch $X^{\{t\}}, Y^{\{t\}}$
`Back propagation` to compute gradience with respect to $J^{\{t\}}$
$W^{[l]} := W^{[l]} - \alpha dW^{[l]}$
$b^{[l]} := b^{[l]} - \alpha db^{[l]}$

위 for loop은 한 에포크이다. 하나의 에포크는 훈련세트를 한번 통과한 것을 의미한다.

배치 경사 하강법과 미니배치 경사 하강법의 훈련

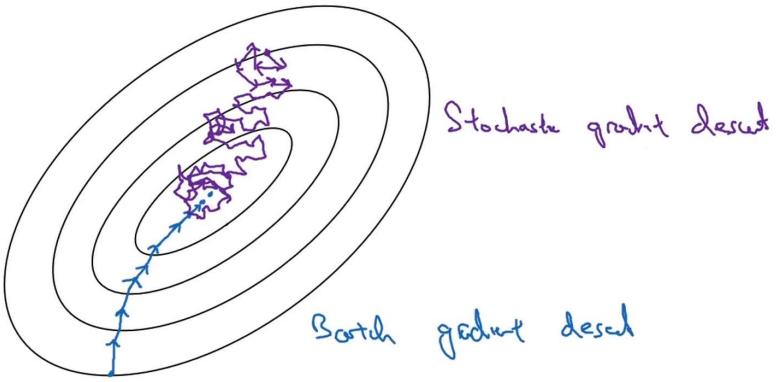


- 배치 경사 하강법에 경우, 모든 반복마다 비용함수의 값을 계속 작아져야한다. 만약 커지게 된다면 학습률이 너무 큰 것일 수도 있거나, 다른 문제가 있을 것이다.
- 미니배치 경사 하강법에 경우, 전체적이 흐름은 감소하나 약간의 노이즈가 발생할 것이다.

미니배치 경사 하강법에서 미니배치의 크기

두 극단적인 경우

- `size = m` 이라면, 배치 경사 하강법과 같다.
- `size = 1` 이라면, 확률적 경사하강법 (Stochastic Gradient Descent)이며, 각각의 샘플이 하나의 미니배치가 된다.
- 실제로는 미니배치의 사이즈는 1과 m의 사이가 될 것이다.



만약 **배치 경사 하강법(size=m)**을 사용한다면,

- 매우 큰 훈련 세트를 모든 반복에서 진행하게 되는 것이다
- 그렇기 때문에 한 반복에서 너무 오래 걸리는 것이다

만약 **확률적 경사 하강법(size=1)**을 사용한다면,

- 하나의 샘플만 처리한 후 진행할 수 있어서 매우 간단하며, 노이즈도 작은 학습률을 사용해서 줄일 수 있다
- 하지만 훈련 세트의 데이터를 하나씩 돌리기 때문에, 벡터화를 통해 얻는 강점을 다 잃게 된다

그렇기 때문에 **1과 m 사이에 사이즈**가 가장 빠른 학습을 제공할 수 있다. 그렇게 된다면,

- 벡터화의 강점을 활용할 수 있고
- 전체 훈련 세트가 다 진행되기를 기다리지 않고 빠르게 진행할 수 있게된다

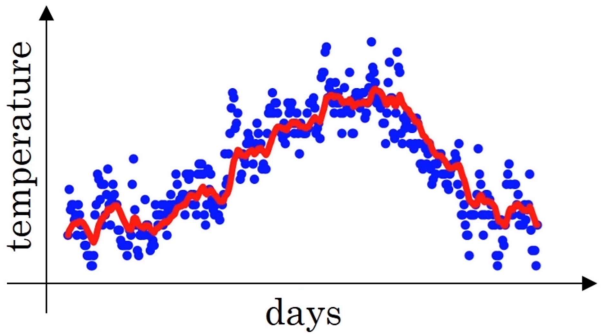
그렇다면 어떻게 적당한 값을 정할 수 있나?

- **훈련 데이터셋이 작다** : 그냥 배치 경사 하강법을 사용한다
- **만약 데이터가 크다면** : 64, 128, 256, 512 중 하나의 값이 좋다.
  - 컴퓨터 메모리의 접근 방식을 생각해보면, 2의 제곱인 값을 사용했을 때 가장 효과적이다.
  - 또한 모든 $X^{\{t\}}$와 $Y^{\{t\}}$가 CPU와 GPU 메모리에 맞는 사이즈인지를 확인해야한다. 맞지 않은 사이즈를 사용한다면 성능이 급격히 안좋아질 수 있다.

지수 가중 이동 평균

런던의 날씨 데이터다. 아래의 θ들은 1월 1일부터 1년 동안 관측된 런던시의 일별 기온이며, 옆 그래프에 있는 파란 점이 이 값들이다.

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

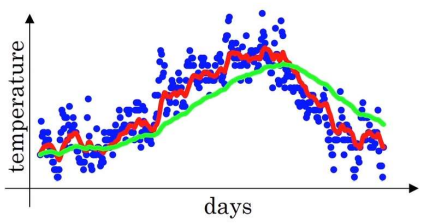


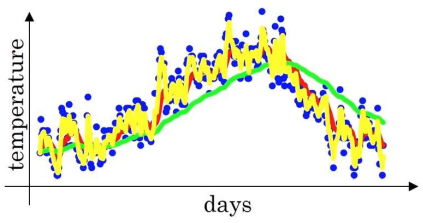
만약 이 계산을 모든 데이터에 대해 하게 된다면, 일별 기온의 **지수가중평균**을 얻게 된다. 이 값들을 그래프로 그린 것이 저 빨간 선이다.

$$v_0 = 0$$
$$v_1 = 0.9v_0 + 0.1\theta_1$$
$$v_2 = 0.9v_1 + 0.1\theta_2$$
$$\vdots$$
$$v_t = 0.9v_{t-1} + 0.1\theta_t$$

이 식을 일반화 한것이 $v_t = \beta v_{t-1} + (1-\beta)\theta_t$ 이며, 위 예시에서 $\beta = 0.9$이다.

- $\beta = 0.9$ 일 때, 이 값은 10일의 일별 기온의 평균이 될 것이다. (빨간색 그래프)
- $\beta = 0.98$ 일 때, 이 값은 약 50일의 일별 기온의 평균이 될 것이다. (초록색 그래프)
  - $\frac{1}{1-0.98} = 50$ 이기 때문에 그렇다.
  - 즉, β **값이 더 클 수록 곡선이 더 부드러워지고**, 이는 더 많은 날짜의 기온의 평균을 이용하기 때문에 그렇다.
  - 그러나 그렇기 때문에, 더 넓은 범위에 값들을 염두에 두고 있기 때문에, 그래프가 올바른 값에서 더 멀어진다 (right shifted).
  - 그렇기에 기온이 바뀔 경우 **지수가중평균 공식이 더 느리게 적용**된다. 즉 지연되는 기간이 더 큰다.
    - 이것은 β값이 커진다는 것은, 전 값, 즉 v_{t-1}값에 더 큰 가중치를 두고 현재 값인 θ_t 값에 더 작은 가중치를 두고 있다는 의미이기 때문이다.
    - 그렇기 때문에 현재 데이터(기온)이 변화한다면, 그 변화에 더 느리게 적응하게 되는 것이다.
- $\beta = 0.5$ 일 때, 이 값은 약 2일의 일별 기온의 평균이 될 것이다. (노란색 그래프)
  - 더 적은 데이터의 평균을 구했기 때문에 더 많은 노이즈와 이상치에 더 민감한 값이 만들어진다.
  - 하지만 데이터의 변화에 더욱 민감한 데이터가 된다.



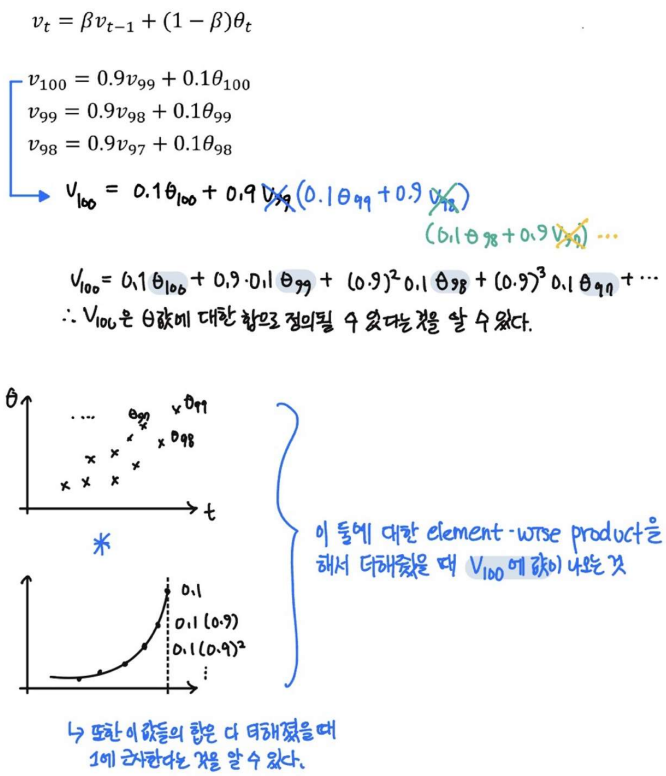


> 💡 최근의 데이터에 더 많은 영향을 받는 데이터들의 평균 흐름을 계산하기 위해 지수 가중 이동 평균을 구합니다. 지수 가중 이동 평균은 최근 데이터 지점에 더 높은 가중치를 줍니다.

따라서 이 공식은 지수가중평균을 구현하기 위한 공식이다. 이 학습 알고리즘의 하이퍼파라미터를 학습함으로서 이를 통해 가장 효과적인 모델을 구현할 수 있게 한다.

위 β들 중에서는 빨강색 그래프, 즉 $\beta = 0.9$ 일 때 가장 데이터를 잘 표현하는 그래프라는 것을 알 수 있다.

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



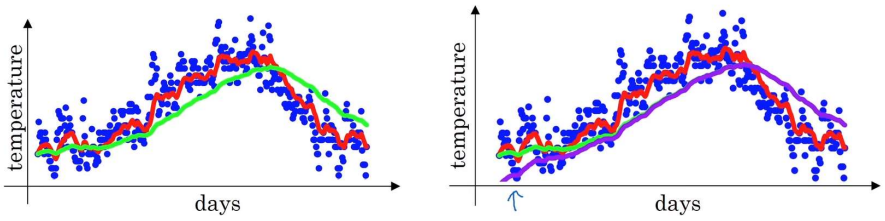
구현

이 식의 구현은, 단 한 줄의 코드로 구현할 수 있기 때문에 간단하다. 또한 `v` 값을 계속 업데이트 해 나가면서 덮어쓰기 때문에 메모리 적인 차원에서도 효율적이다.

```
v_theta = 0 v_theta := beta * v_theta + (1-beta)*theta[1] #덮었는 것 # for loop으로 구현한다면 v = 0 for theta_t in theta: v = beta * v + (1-beta)*theta_t
```

편향 보정

아래 왼쪽에 보이는 초록색 그래프는 위에서 보았던 $\beta = 0.98$인 경우의 그래프이다. 하지만 실제로 위의 구현방법으로 구현한다면 초록색 그래프가 아닌 오른쪽에 보라색 그래프가 나오게된다. 이 보라색 그래프는 시작 지점에서의 값이 초록색 값보다 더 낮은 값에서 시작한다는 것을 알 수 있다.



낮은 값에서 시작되는 이유는 첫 v_0 값이 0으로 초기화하기 때문이다

- $v_1 = \beta * 0 + (1-\beta)\theta_1$ 가 되기 때문에, 첫 v_0에 대한 부분이 없어지기 때문에 낮은 값에서 시작하게 되어 첫 번째 값을 잘 추정할 수 없게 되는 것이다.

그렇기 때문에 이를 해결하기 위해 v_t를 계산할 때, 편향 보정을 해주어 $1-\beta^t$로 나눠줘서 초기값에서 추정값과 실제값이 비슷할 수 있게 한다.

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

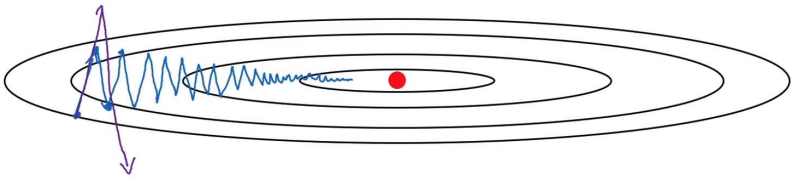
t가 커질수록, 편향 보정의 의미가 없어지기 때문에, 위 오른쪽 그래프에서 보이다시피, **t가 커질수록 두 그래프들이 겹쳐지며 큰 차이가 없어진다**. 그렇기에 보통 머신러닝에서 대부분 구현하지는 않지만, 이 초기 단계가 신경쓰인다면 편향보정이 도음이 될 것이다.

Momentum 알고리즘

거의 항 일반 경사 하강법보다 더 빠른 성능을 가진다.

> 💡 경사에 대한 지수가중평균을 계산하여 가중치를 업데이트하는 것이다.

만약 경사 하강법을 구현한다면, 아래 파랑색 그래프같이 최적값을 찾게 될 것이다. 그렇기 때문에 가로(horizontal)로는 더 빠른 학습을, 새로(vertical)로는 더 느린 학습이 되어야 더 효율적일 것이다 .



Momentum의 구현

On iteration t:

Compute dW, db on current mini-batch:

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

이것은 $v_\theta = \beta v_\theta + (1-\beta)\theta_t$ 와 비슷하다.

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

$w := w - \alpha V_{dw}$

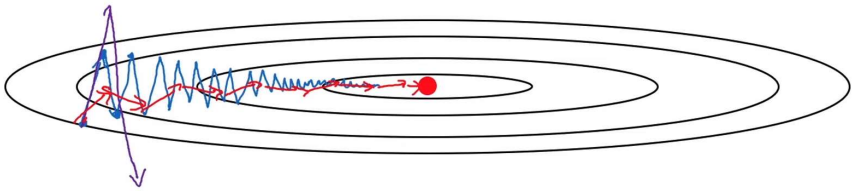
$b := b - \alpha V_{db}$

where the hyperparameters are α and β

이것은 매 단계의 경사 하강 정도를 부드럽게 만들어준다.

- 수직 방향에서는 경사의 평균을 구한다면, 양수와 음수를 평균하기 때문에 평균이 0이 된다.
- 반면에 수평 방향에서는, 모든 도함수가 오른쪽을 가르키고 있기 때문에 평균은 여전히 큰 값을 가질 것이다.

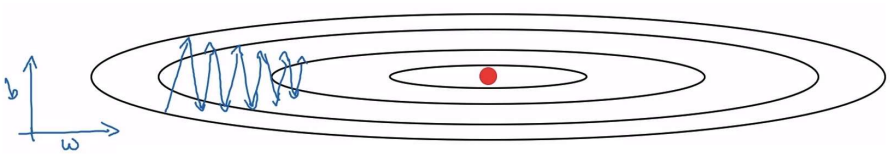
그렇기 때문에 아래 빨간 그래프처럼 수직 방향에서는 훨씬 더 작은 진동이 있고, 수평 방향에서는 더 빠르게 학습하는 모습을 볼 수 있다.



RMSProp (Root Means Square Propagation)

아래 경사하강법을 구현한 그래프를 다시 사용해보자. RMSProp을 설명하기 위해 b를 세로축, w를 가로축으로 설정하여 최적화시킨다.

- w : 가로축은 빠르게 구현
- b : 세로축은 느리게 구현



On iteration t:

Compute dW, db on current mini-batch:

$S_{dw} = \beta_2 S_{dw} + (1-\beta_2)dW^2$

지수가중평균을 유지하기 위해 v가 아닌 s를 사용해준다

여기서의 제곱은 요소별 제곱을 나타냄다. 즉, 도함수의 제곱을 지수가중평균 하는 것이다.

나중에 Adam 최적화 알고리즘을 설명할 때 Momentum 구현에서 사용한 β와 헷갈리지 않도록 β_2를 사용해준다.

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

$w := w - \alpha \frac{dW}{\sqrt{S_{dw}}}$

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

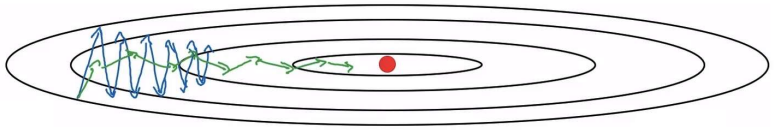
S의 제곱근으로 나눠준다

그렇기에 이 dW, db 값들이 **0에 수렴하는 값이 되지 않게 주의**해야한다.

우리가 위 구현에서 바라는 것은, W는 최대화되고, b는 최대화되는 것이다. 즉, 위 구현법에 의하면 S_{dW}는 최소화, S_{db}는 최대화하여 나눠주는 것이다.

- w는 작은 값으로 나눠진 큰 값을 값을 빼서 상대적으로 큰 값으로 **빠르게 업데이트** 된다
- b는 큰 값으로 나눠진 값을 빼서 상대적으로 더 작은 값으로 **천천히 업데이트**가 된다

미분값이 큰 곳에서는 큰 값으로 나눠주기 때문에 기존 학습률 보다 작은 값으로 업데이트 되기 때문에 더 효과적이다.



가로축과 세로축으로 W와 b로 나누는 것은 단순히 설명을 위한 것이고, 실제로는 W와 b가 고차원의 벡터이기 때문에 완전히 같지는 않다.

Adam (Adaptive Moment Estimation)

Momentum과 RMSProp을 합친 최적화 알고리즘이다

초기화

$V_{dw} = 0,\ S_{dw} = 0$

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

구현

On iteration t:

Compute dW, db on current mini-batch:

 # "Momentum" β_1

$V_{dw} = \beta_1 V_{dw} + (1-\beta_1)dW$; $V_{db} = \beta_1 V_{db} + (1-\beta_1)db$

 # "RMSProp" β_2

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

 # 편향 보정

$V_{dW}^{corrected} = \frac{V_{dW}}{(1-\beta_1^t)}$; $V_{db}^{corrected} = \frac{V_{db}}{(1-\beta_1^t)}$

$S_{dW}^{corrected} = \frac{S_{dW}}{(1-\beta_2^t)}$; $S_{db}^{corrected} = \frac{S_{db}}{(1-\beta_2^t)}$

$w := w - \alpha \frac{V_{dW}^{corrected}}{\sqrt{S_{dw}}}$

$b := b - \alpha \frac{V_{db}^{corrected}}{\sqrt{S_{db}}}$

하이퍼파라미터들

대부분 베타값들과 엡실론 값들은 기본값들을 활용하고, α 값만 보정하곤 한다.

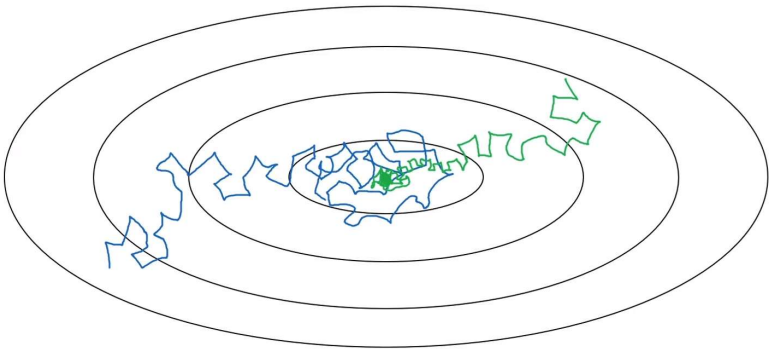
- α : needs to be tuned
- β_1 : $0.9 \qquad (dw)$
- β_2 : $0.999 \quad (dw^2)$
- ε : 10^{-8}

학습률 감쇠 Learning Rate Decay

학습 알고리즘의 성능을 높히는 방법 중 하나는, 시간에 따라천천히 학습률을 감쇠시키는 것에 있다. 하지만 학습률 감쇠는 α를 조정하는데 도음이 되긴 하지만 모델의 성능을 최적화하기 위한 다른 방법들에 비해 우선순위가 낮다.

왜 학습률 감쇠를 구현해야하나?

만약 작은 미니배치에서 학습한다면, J값이 최소값을 향해 가겠지만, **수렴하지 않고 그 최소값 근처를 배회한다**. 하지만 α값을 천천히 감소시켜준다면, **최소값에 가까워질수록 더 좁은 범위**에서 배회할 것이다. 즉, 초반에는 더 큰 학습률로 학습시키고, 최소값에 가까워질수록 더 촘촘하게 학습할 수 있게 하는 것이다.



파랑색 그래프가 일반 미니배치 경사 하강법이며, 초록색 그래프가 학습률 감쇠를 적용한 모양이다.

- 1 epoch : 1 pass through the data

다양한 학습률 감쇠 방법

- $\alpha = \frac{1}{1+decay\ rate*epoch\ number}\alpha_0$
- Exponential Decay : $\alpha = 0.95^{epoch\ number}\alpha_0$
- $\alpha = \frac{k}{\sqrt{epoch\ number}}\alpha_0$ or $\alpha = \frac{k}{\sqrt{t}}\alpha_0$
- Discrete Staircase : 각 단계별로 α를 다르게 설정하는 것
- Manual Decay : 각 학습률을 직접 조정하는 것 (적은 수의 모델들을 훈련시킬 때 가끔 사용한다)