9주차_최적화 문제 설정

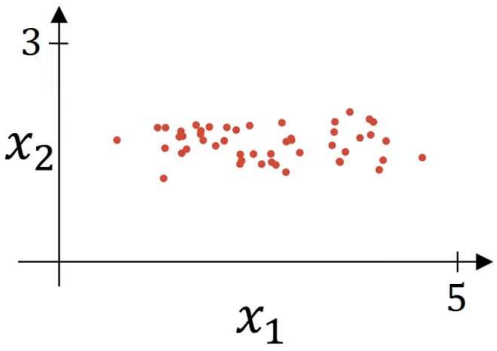
링크 https://velog.io/@pehye89/9주차-최적화-문제-설정

1 more property

💯 출석 퀴즈

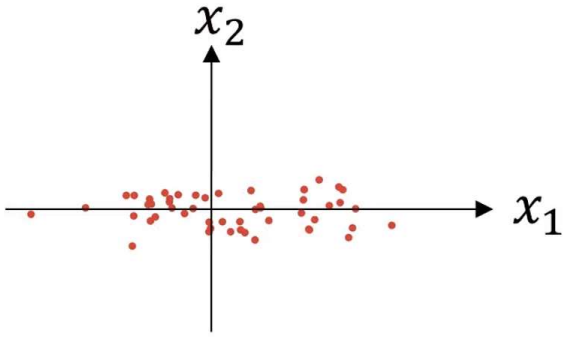
입력값의 정규화

정규화 : 신경망을 빠르게 하는 방법



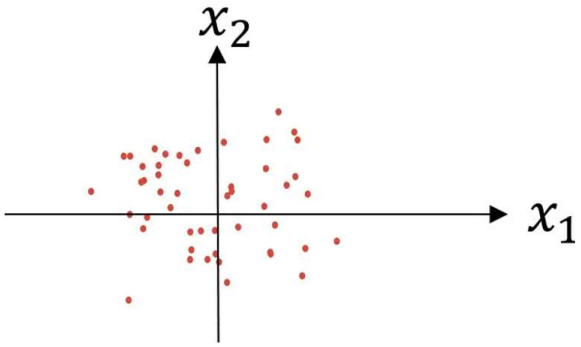
평균을 빼는 것

- 0의 평균을 갖게 될 때까지 훈련 세트를 이동하는
  - $\mu = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} x^{(i)}$
  - $x := x - \mu$



분산을 정규화하는 것

- 특성 $x1$이 특성 $x2$ 보다 더 높은 분산을 갖는다는 것을 알 수 있다.
  - $\sigma^2 = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} x^{(i)} \circ 2$
    - σ는 각 특성의 분산에 대한 벡터
  - $x := \frac{x}{\sigma^2}$



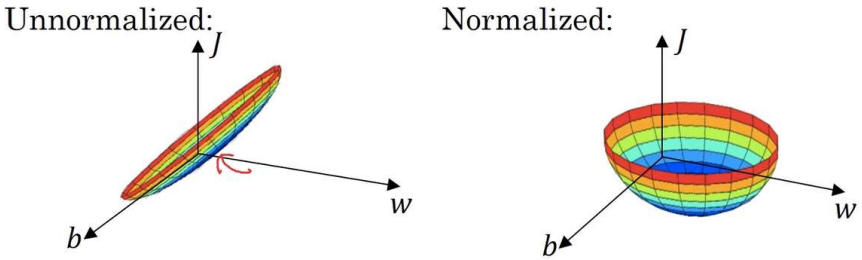
이렇게 한다면, $x1$와 $x2$의 분산이 모두 1이 된다.

만약 이 방법을 훈련 데이터를 확대하는데 사용한다면, 테스트 테스를 정규화할 때도 같은 μ와 σ를 사용해준다.

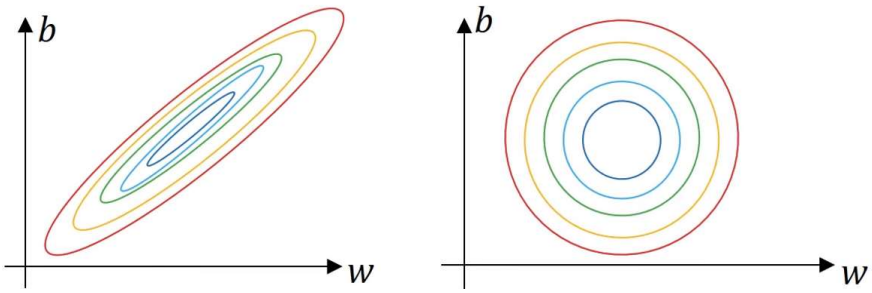
훈련 샘플과 테스트 샘플 모두 같은 값으로 정규화되어야한다.

> 💡 평균을 0으로, 분산을 1로 만들어준다.

그렇다면 입력 특성들을 왜 정규화를 시켜야하나?



만약 정규화되지 않은 입력특성으로 비용함수를 계산하게 된다면, 이렇게 구부러진 활처럼 가늘고 긴 모양의 비용함수가 나오게 된다.



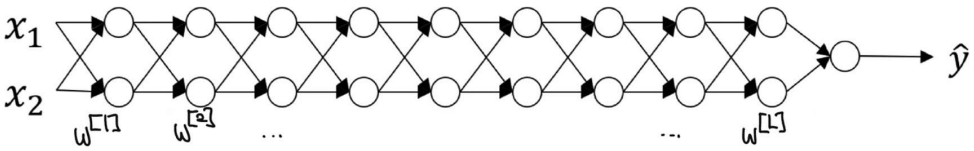
만약 정규화하지 않는다면, 각 x들의 scale이 다르다. 예를 들어, $x1 = \{1, \dots, 1000\}$이고, $x2 = \{0, \dots, 1\}$이라면, 위 형태의 가늘고 긴 모양의 비용함수가 나오게 된다. 그렇게 된다면, 매우 작은 학습률을 사용하고, 앞뒤로 왔다갔다 하기 위해 **더 많은 단계가 필요**하게 된다.

하지만 만약 정규화를 시켜준다면, 더 대칭의 형태를 갖는 비용함수를 구할 수 있게 되고, 그렇게 된다면 더 **빠르게 경사 하강법을 계산하여** 최소값을 구할 수 있게 될 것이다.

> 💡 특성들이 비슷한 크기를 가질 때, 비용함수가 더 둥글고 최적화하기 쉬운 모습이 된다.

경사의 소실과 폭발

신경망이 깊어질 수록, 미분값/기울기가 아주 작아지거나 커질 수 있다. 이걸 경사의 소실 또는 폭발이라고 한다. 만약 기하급수적으로 작아진다면, 훈련 자체를 어렵게할 수 있다.



$g(z) = z$ 선형활성화 함수

$b^{[l]} = 0$

$\hat{y} = w^{[l]} w^{[l-1]} \cdots w^{[3]} w^{[2]} w^{[1]} x$

$z^{[1]} = w^{[1]} x$

$a^{[1]} = g(z^{[1]}) = z^{[1]}$

$a^{[2]} = g(z^{[2]}) = g(w^{[2]} a^{[1]}) = w^{[2]} w^{[1]} x$

$a^{[3]} = g(z^{[3]}) = w^{[3]} w^{[2]} w^{[1]} x$

만약 $w^{[l]}$의 값이 1보다 조금 큰 값이고 L이 매우 큰 값이라면 (즉, 더 깊은 신경망일수록), $\hat{y}$은 기하급수적으로 커질 것이고, 만약 1보다 작은 값이라면 $\hat{y}$ 값이 기하급수적으 작아질 것이다. (현대의 신경망들은 대부분 150개의 층을 갖는다.)

> 💡 $w > 1$: 경사의 소실
> $w < 1$: 경사의 폭팔

if $w^{[l]} = \begin{bmatrix} 1.5 & 0 \\ 0 & 1.5 \end{bmatrix}$, then $\hat{y} = w^{[l]} \begin{bmatrix} 1.5 & 0 \\ 0 & 1.5 \end{bmatrix}^{l-1} x = (1.5)^{L-1} x$

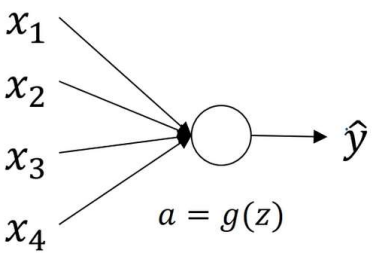
if $w^{[l]} = \begin{bmatrix} 0.5 & 0 \\ 0 & 0.5 \end{bmatrix}$, then $\hat{y} = w^{[l]} \begin{bmatrix} 0.5 & 0 \\ 0 & 0.5 \end{bmatrix}^{l-1} x = (0.5)^{L-1} x$

> 💡 $w^{[l]}$값이 단위행렬*(identity matrix : 주각대선의 원소가 모두 1이며, 나머지 원소가 모두 0인 정사각 행렬)*보다 큰 값이라면 경사의 폭발, $w^{[l]}$값이 단위행렬보다 작은 값이라면 경사의 소실이 생긴다.

심층 신경망의 가중치 초기화

경사의 폭발이나 소실을 완전하게 해결할 수는 없지만, 많은 도움을 주는 해결법은 신경망에 대한 무작위의 초기화를 더 신중하게 선택하는 것이다.

우선 단일 뉴런에 대한 예제를 알아보자.




```
z = w1x1 + w2z2 + ... + wnxn
```

z의 값이 너무 크거나 작아지지 않기 위해서는, n의 값이 클수록 w값이 작아져야한다.

w값을 작아지게 하기 위해서는 w의 분산을 $\frac{1}{n}$ 값으로 설정해주면 된다.

만약 ReLU 활성화 함수를 사용한다면, w의 분산을 $\frac{2}{n}$으로 설정해준다.

```
w[l] = np.random.randn(w.shape) + np.sqrt(2/n[l-1])
```

경사의 폭발이나 소실을 완전히 해결하지는 못하지만, 각각의 가중치 행렬 w값을 1보다 너무 커지거나 작아지지 않게 설정하여 너무 빨리 폭발하거나 소실하지 않게 한다.

만약 ReLU가 아닌 tanh 활성화 함수를 사용한다면, 세이비어 초기화 *xavier initialization*, $\sqrt{\frac{1}{n^{[l-1]}}}$ 또는 $\sqrt{\frac{2}{n^{[l-1]}+n^{[l]}}}$으로 w의 분산을 설정해준다.

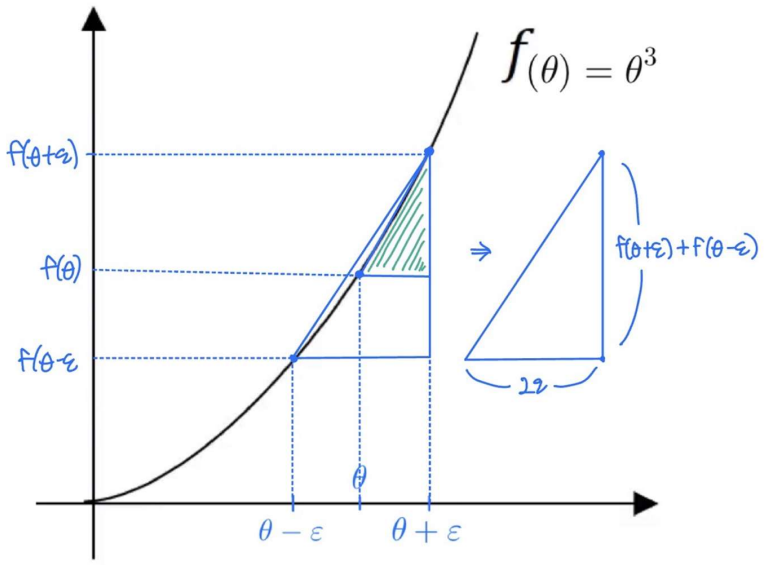
이 모든 식들은 가중치 행렬 초기화를 위한 시작점을 제공한다. 이와 같은 분산을 원한다면 분산 매개변수는 또 다른 하이퍼파라미터가 된다. 가끔 이 하이퍼파라미터를 조정하는 것이 도움이 될 때가 있지만, 다른 하이퍼파라미터를 튜닝하는 것에 비해 중요한 것은 아니라고 한다.

경사 검사

> 💡 경사 검사는 경사 하강법을 통해 계산한 기울기, 즉 $d\theta$와 근사오차 $d\theta_{approx}$를 비교(=유클리드 거리 계산을 통해)해서 경사 하강법이 정상적으로 작동하였는지 확인하는 것이다.

기울기의 수치 근사

경사 검사를 통해 역전파를 맞게 구현했는지 확인할 수 있다. 경사 검사를 하기 위해서는 경사의 계산을 수치적으로 근사하는 방법을 알아보자



- 더 작은 초록색 삼각형의 넓이를 구하는 것보타, 더 큰 삼각형의 넓이를 구하는 것이 기울기의 수치를 근하는데 더 효과적이다.
- 이 큰 삼각형은 마치 2개의 작은 삼각형들을 고려하는 것과 같다. 즉, 한쪽만의 차이를 사용하지 않고 양쪽의 차이를 이용한다.

큰 삼각형의 넓이

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

$$\frac{(0.01)^3-(0.99)^3}{0.02} = 3.0001 \approx 3$$

$$g(\theta) = 3\theta^2 = 3$$

- 근사 오차 approximate error = 0.001
- 만약 한쪽 차이인 $\theta+\epsilon$ 만 사용했을 때는 근사오차가 3.0301이고 오차가 0.03이 되었다.

도함수의 공식적인 정의는 아래와 같다.

$$f'(\theta) = \lim_{\varepsilon\to 0}\frac{f(\theta+\varepsilon)-f(\theta-\varepsilon)}{2\varepsilon}$$

그렇다면 0이 아닌 ε값에 대해서 근사 오차는 $O(\varepsilon^2)$이다.

하지만 만약 작은 삼각형, 즉 한쪽의 차이만 고려한다면 이 값이 아닌 $\frac{f(\theta+\varepsilon)-f(\theta)}{\varepsilon}$으로 계산하는 것이데, 이렇게 된다면 근사 오차는 $O(\varepsilon)$이 된다.

이 빅오노테이션은 안에 있는 값에 상수를 곱해준다는 것인데, 매우 작은 값인 ε을 제곱하는것이 그냥 ε보다 더 작은 값이 될 것이다.

- 예를 들어 $\varepsilon = 0.01$ 이라면, 각각의 근사오차는 $O(\varepsilon^2) = 0.0001$이 되고 $O(\varepsilon) = 0.01$이 될 것이므로, **근사 오차가 더 줄어드는 양쪽 차이를 사용하는 것이 더 정확하다**.

경사 검사의 구현

- 경사 검사를 위해서 $W^{[1]}, b^{[1]}, \ldots, W^{[L]}, b^{[L]}$의 차원을 변경하여 하나의 벡터 θ로 연결한다. (concatenate)
- 그래서 비용함수 $J(W^{[1]}, b^{[1]}, \ldots, W^{[L]}, b^{[L]})$가 W와 b에 대한 함수가 아닌, θ에 대한 함수 $J(\theta)$로 바뀐다.
- 역전파의 도함수들 $dW^{[1]}, db^{[1]}, \ldots, dW^{[L]}, db^{[L]}$를 같은 방법으로 차원을 바꿔 (reshape) 하나의 벡터 $d\theta$로 바꿔준다.
- 여기서 중요한 질문은 : $d\theta$가 과연 $J(\theta)$의 기울기인가? (=맞게 계산 되었는가? 역전파에서의 계산 오류는 없었는가?)

구현 방법

$J(\theta) = J(\theta_1, \theta_2, \theta_3, \ldots)$으로 확장시키는 것이 가능하다. 그렇기 때문에 경사 검사를 구현하기 위해 loop를 사용한다.

`for each i :`

$$d\theta_{approx}[i] = \frac{J(\theta_1,\theta_2,\ldots,\theta_i+\varepsilon,\ldots)-J(\theta_1,\theta_2,\ldots,\theta_i-\varepsilon,\ldots)}{2\varepsilon} \approx d\theta[i] = \frac{\partial J}{\partial \theta_i}$$

이 $d\theta_{approx}$, 즉 근사 오차 값을 모든 i에 대해 계산하면, 이 근사오차의 차원과 도함수 $d\theta$의 차원이 θ의 차원과 같게 될 것이다. 그리고 이제 이 두 값이 근사적으로 같은지 확인해야한다.

유클리드 거리를 통해 이 두 벡터가 근서적으로 같은지 정의할 수 있다.

$$\frac{||d\theta_{approx} - d\theta||_2}{||d\theta_{approx} + d\theta||_2}$$

분모는 위 벡터를 정규화 시켜주고, 또 분자의 벡터가 아주 크거나 작을 때를 대비해 이 식을 비율로 바꿔준다.

실제로 구현할 때, $\varepsilon = 10^{-7}$으로 설정해준다. 그리고 이 범위에서의 유클리드 거리가

- 10^{-7}이거나 더 작은 값이 나온다면 잘 근사되었을 것이다.
- 10^{-5}이면 좋을 가능성이 크지만 벡터의 원소의 크기를 한번 더 확인해 너무 큰 값이 없는지, 원소들의 차이가 너무 크지 않은지 확인할 필요가 있을 것이다.
- 10^{-3}이거나 더 큰 값이 나오면 버그가 있을 가능성이 매우 크기 때문에 θ의 개별적인 원소들을 확인해서 근사오차와 도함수의 차이가 심한 원소를 추적해서 미분의 계산이 잘못되지 않았는지 확인해야할 것이다.

경사 검사 구현을 위해 주의할 점

1. 훈련에서 경사 검사를 사용하지 않고 디버깅을 위해서만 사용한다.
    - 모든 i에 대해 계산하는 것은 너무 느릴 수 있다.
2. 만약 경사 검사의 알고리즘이 실패 했다면, 어느 원소 부분에서 실패했는지를 확인하여 버그를 확인한다.
    - 만약 근사오차와 도함수의 차이가 크게 나왔다면, 각 원소들을 확인해 큰 차이가 나게 하는 원소가 무엇인지를 확인해본다. 역전파에서 해당 원소의 도함수 계산이 잘못되었을 가능성이 크다.
3. 정규화를 하는 것을 잊으면 안된다.
4. 경사 검사는 드롭아웃과 같이 적용할 수 없다.
    - 드롭아웃을 사용할 때는 명확한 J를 계산할 수 없다. 비용함수 J는 어떤 반복에서든지 삭제될 수 있는 기하급수적으로 큰 노드의 부분집합으로 정의된다. 만약 드롭아웃을 사용하면 매번 다른 부분집합의 노드를 랜덤하게 삭제하기 때문에 비용함수 J를 계산하는 것이 매우 어려워진다.
    - 그렇기 때문에 드롭아웃을 하지 않고 알고리즘이 작동하는지 우선 확인하고 드롭아웃을 켜는 방법을 사용해야한다.
5. 흔한 일은 아니지만, 랜덤 초기화에서의 W와 b가 0에 가까울 때 경사 하강법의 구현이 맞게 된 경우가 있다.
    - 이 경우 경사 하강법이 진행될 수록 오차가 커질 수 있다. 이런다면 경사 하강법이 0에 가까울 때만 맞는 것일 수도 있다.
    - 이런 경우 랜덤 초기화에서 경사 검사를 진행하고, 훈련을 조금 더 시킨 후 경사 검사를 다시 해보는 방법이 있다.