Section3: 過学習

1. 要点まとめ

過学習とは、モデルが学習データに過剰に適合してしまい未知のデータに対する性能（汎化性能）が低下してしまう現象を指す。過学習が発生する原因としては以下が挙げられる。

- 情報量が少ない入力に対してニューラルネットワークが大きい（自由度が高い（パラメータやノードが多いetc.））。

過学習の主な対策としては以下がある。

- L1/L2正則化
- ドロップアウト

1.1 L1/L2正則化

パラメータ（重み）の大きさが大きすぎると、一部のデータに対して極端な反応を示してしまうため、過学習の原因となる。そこで、誤差関数に正則化項を加算することでパラメータ（重み）の大きさを制限するのがL1/L2正則化である。計算式は以下。

$$\underset{w}{argmin}\ (E_n(w) + \frac{1}{p}\lambda||x||_p)$$

$$||x||_p = ||W^{(1)}||_p + ... + ||W^{(k)}||_p$$

$$||W^{(k)}||_p = (|W_1^{(k)}|^p + ... + ||W_n^{(k)}|^p)^{\frac{1}{p}}$$

$$※k = \text{レイヤ数} - 1$$

- p=1の場合、L1正則化（ラッソ回帰）
- p=2の場合、L2正則化（リッジ回帰）

これは、以下の制約条件付きの最適化問題と等価であり、これをラグランジュ未定乗数法で解く式が上式となる。重みのpノルム$||x||_p$に制約がかけられているため、重みを一定以内に抑えることができ、過学習抑制効果が得られる。

$$\underset{w}{argmin}\ E_n(w)$$

$$subject\ to\ ||x||_p < C\ (※C = const)$$

1.2 ドロップアウト

ドロップアウトとは、ノードをランダムに削減することでニューラルネットワークの自由度を抑制する手法である。シンプルだが効果は高く、よく用いられる手法となっている。

2. 実装演習

2_5_oberfiting.ipynbの「weight decay - L2」のコードにおいて、weight_decay_lambdaの値を0.05～0.55の間で0.1きざみで変化させた際の学習結果を確認する。

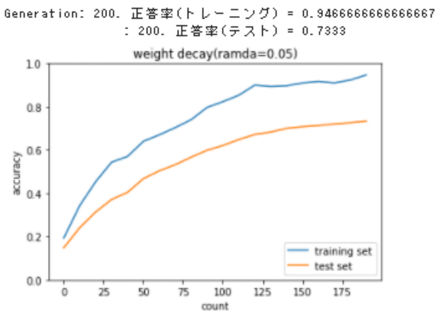
```
# MultiLayerNetのコードは掲載省略

(x_train, d_train), (x_test, d_test) = load_mnist(normalize=True)

print("データ読み込み完了")

# 過学習を再現するために、学習データを削減
x_train = x_train[:300]
d_train = d_train[:300]

iters_num = 200
train_size = x_train.shape[0]
batch_size = 100
learning_rate=0.01
plot_interval=10

# 正則化強度設定 ======================================
weight_decay_lambdas = np.arange(0.05,0.56,0.1,dtype = 'float64')
# =================================================

for weight_decay_lambda in weight_decay_lambdas:

  train_loss_list = []
  accuracies_train = []
  accuracies_test = []

  network = MultiLayerNet(input_size=784,
                          hidden_size_list=[100, 100, 100, 100, 100, 100],
                          output_size=10)
  hidden_layer_num = network.hidden_layer_num

  for i in range(iters_num):
      batch_mask = np.random.choice(train_size, batch_size)
      x_batch = x_train[batch_mask]
      d_batch = d_train[batch_mask]

      grad = network.gradient(x_batch, d_batch)
      weight_decay = 0

      for idx in range(1, hidden_layer_num+1):
          grad['W' + str(idx)] = network.layers['Affine' + str(idx)].dW +
weight_decay_lambda * network.params['W' + str(idx)]
          grad['b' + str(idx)] = network.layers['Affine' + str(idx)].db
          network.params['W' + str(idx)] -= learning_rate * grad['W' + str(idx)]
          network.params['b' + str(idx)] -= learning_rate * grad['b' + str(idx)]
          weight_decay += 0.5 * weight_decay_lambda *
```

```
np.sqrt(np.sum(network.params['W' + str(idx)] ** 2))

        loss = network.loss(x_batch, d_batch) + weight_decay
        train_loss_list.append(loss)

        if (i+1) % plot_interval == 0:
            accr_train = network.accuracy(x_train, d_train)
            accr_test = network.accuracy(x_test, d_test)
            accuracies_train.append(accr_train)
            accuracies_test.append(accr_test)

            print('Generation: ' + str(i+1) + '. 正答率(トレーニング) = ' +
str(accr_train))
            print('                : ' + str(i+1) + '. 正答率(テスト) = ' +
str(accr_test))


  lists = range(0, iters_num, plot_interval)
  plt.plot(lists, accuracies_train, label="training set")
  plt.plot(lists, accuracies_test,  label="test set")
  plt.legend(loc="lower right")

  graph_title="weight decay(ramda=" + str(weight_decay_lambda) + ")"
  plt.title(graph_title)
  plt.xlabel("count")
  plt.ylabel("accuracy")
  plt.ylim(0, 1.0)
  # グラフの表示
  plt.show()
```

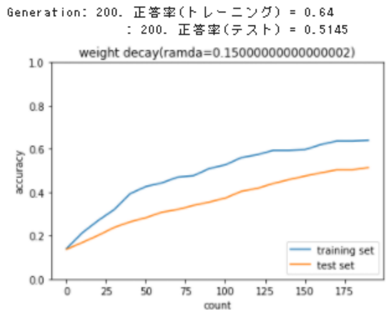
実行結果は以下。

- 正解率は、weight_decay_lambdaが大きくなるほど低下している。
- ただ、学習データの正解率（青線）と、検証データの正解率（オレンジ）の差は逆に小さくなっており、weight_decay_lambdaを大きくすることで学習データに過剰に適合する現象が抑制されていることが見て取れる。

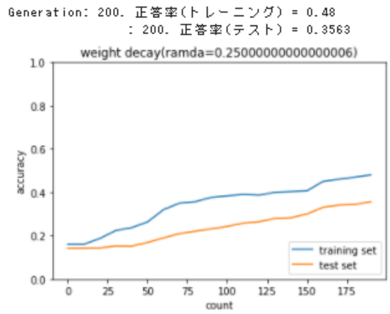
0.05



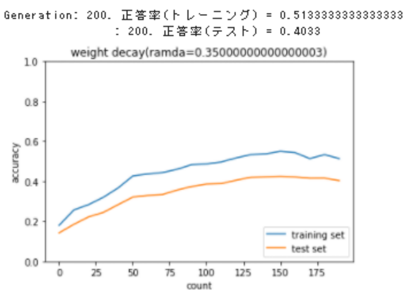
0.15



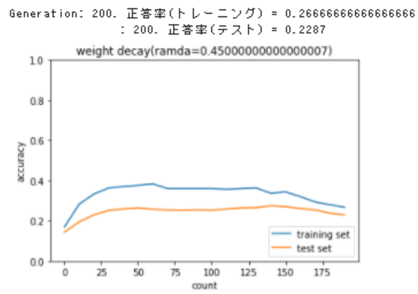
0.25



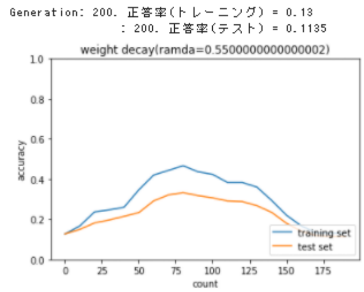
0.35



0.45



0.55

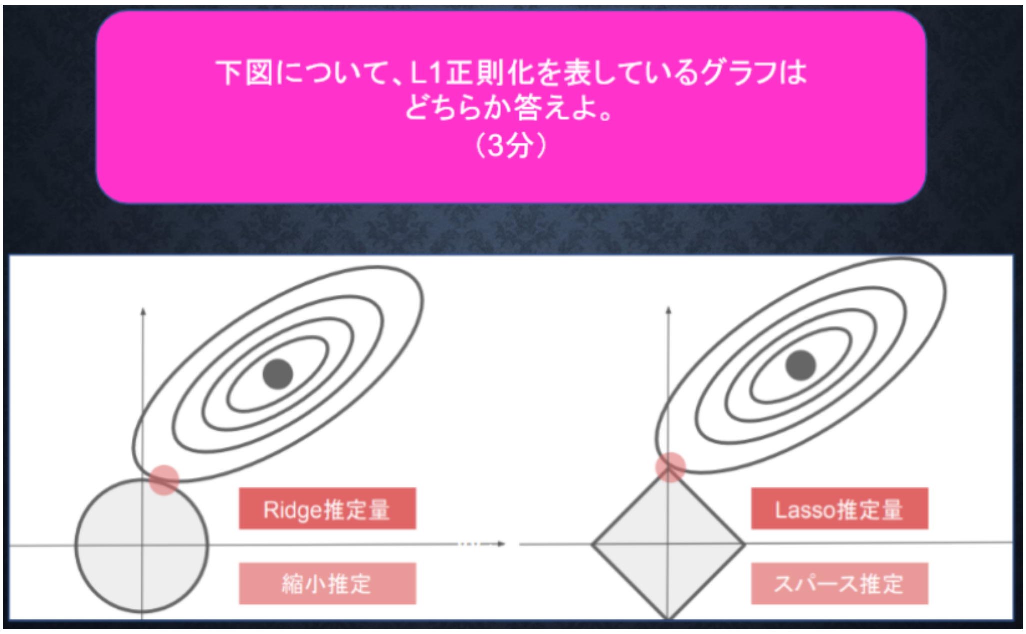


3. 確認テスト

機械学習で使われる線形モデル(線形回帰,主成分分析…etc)の正則化は、
モデルの重みを制限することで可能となる。
前述の線形モデルの正則化手法の中にリッジ回帰という手法があり、
その特徴として正しいものを選択しなさい。

(a)ハイパーパラメータを大きな値に設定すると、すべての重みが限りなく0に近づく
(b)ハイパーパラメータを0に設定すると、非線形回帰となる。
(c)バイアス項についても、正則化される
(d)リッジ回帰の場合、隠れ層に対して正則化項を加える

「(d) リッジ回帰の場合、隠れ層に対して正則化項を加える」が正しい。



右のグラフ（「Lasso推定量」）がL1正則化を表すグラフ

5. L2 パラメータ正則化

深層学習において、過学習の抑制・汎化性能の向上のために正則化が用いられる。そのひとつに、L2 ノルム正則化（Ridge, Weigh Decay）がある。以下は L2 正則化を適用した場合に、パラメータの更新を行うプログラムである。あるパラメータ param と正則化がないときにそのパラメータに伝播される誤差の勾配 grad が与えられたとする。
最終的な勾配を計算する（え）にあてはまるのはどれか。ただし rate は L2 正則化の係数を表すとする。

```
def ridge(param, grad, rate):
    """
    param: target parameter
    grad: gradients to param
    rate: ridge coefficient
    """
    grad += rate * （え）
```

（1） np.sum(param**2)
（2） np.sum(param)
（3） param**2
（4） param

(4) param

L2正則化における最適化対象関数は、$E(w)+rate||param||^2$だが、これをwで微分すると$\frac{E(w)}{dw}+2 \cdot rate \cdot param$となる。

つまり、微分値$\frac{E(w)}{dw}(=grad)$に加算する値は、$rate \cdot param$となる (2はrateに吸収）ため、答えは(4)となる。

6. L1 パラメータ正則化

以下は L1 ノルム正則化（Lasso）を適用した場合に、パラメータの更新を行うプログラムである。あるパラメータ param と正則化がないときにそのパラメータに伝播される誤差の勾配 grad が与えられたとする。
最終的な勾配を計算する（お）にあてはまるのはどれか。ただし rate は L1 正則化の係数を表すとする。

```
def lasso(param, grad, rate):
    """
    param: target parameter
    grad: gradients to param
    rate: lasso coefficient
    """
    x = （お）
    grad += rate * x
```

(1) np.maximum(param, 0)
(2) np.minimum(param, 0)
(3) np.sign(param)
(4) np.abs(param)

(3) np.sign(param)

L1正則化における最適化対象関数は、$E(w) + rate||param||$だが、これをwで微分すると$\frac{E(w)}{dw} + rate \cdot sign(param)$となる (※$sign(x) = 1(x > 0)\ or\ 0(x = 0)\ or\ -1(x < 0)$）。

つまり、微分値$\frac{E(w)}{dw}(= grad)$に加算する値は、$rate \cdot sign(param)$となるため、答えは(3)となる。