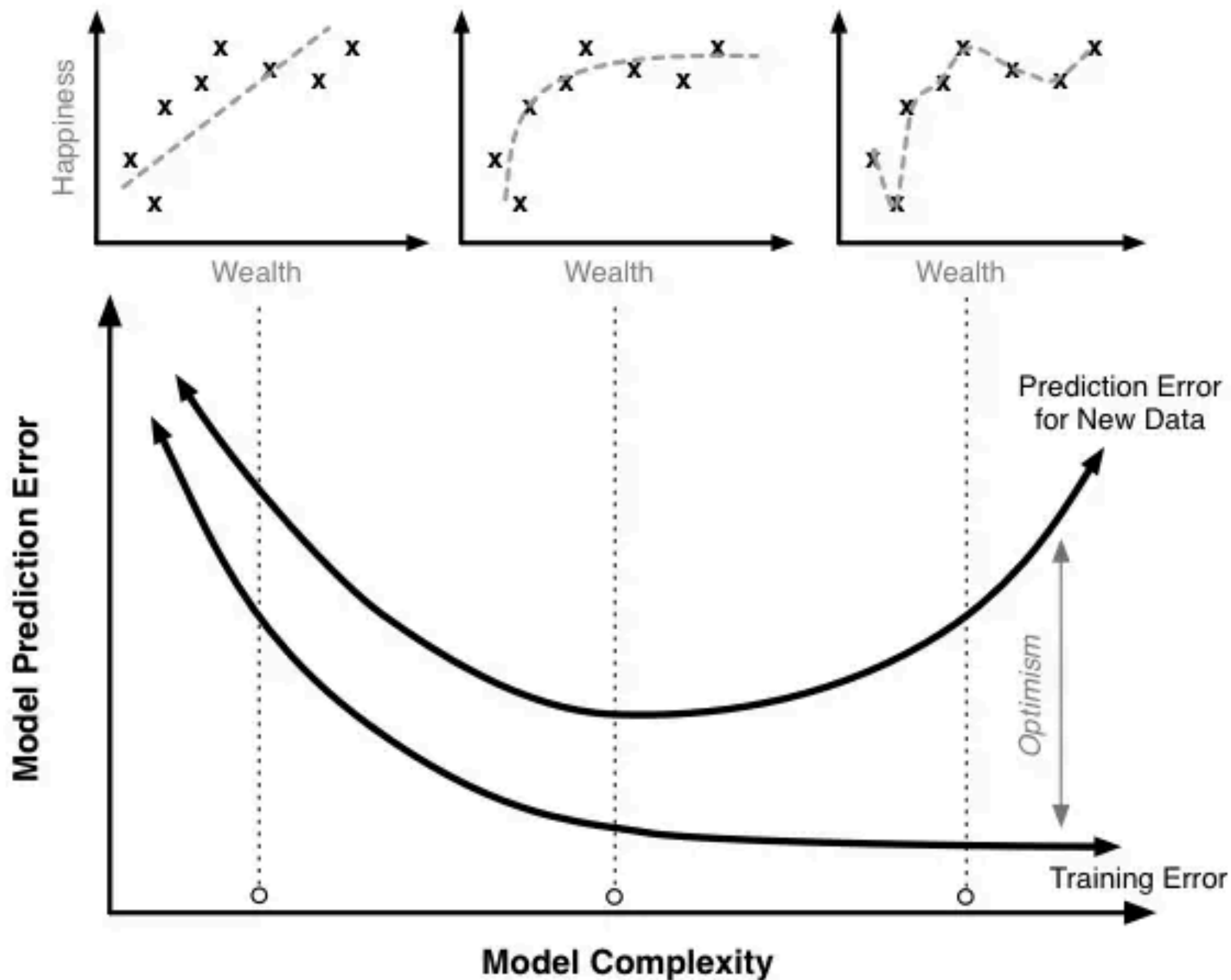


TECH TIPS FOR ML

OVER / UNDERFITTING



OVERFITTING

- **train error** 가 적은 경우, 학습이 진행됨에 따라 train error 와 test error 의 차이 (generalization error) 가 줄어들지 않거나 더 늘어나는 경우 오버피팅을 의심해볼 수 있음
- 데이터의 거시적 분포에 비해 모델이 너무 복잡하여, 불필요한 noise 분포에 영향을 받은 상태

UNDERFITTING

- **train error** 가 큰 경우
- 정의한 모델이 데이터의 거시적 분포를 충분히 표현하지 못하는 상태

DEAL WITH OVER / UNDERFITTING

- test dataset 은 모델의 **최종 성능 측정**을 위해서 단 한번 사용됨
- epoch 단위로 over/underfitting 상태를 감지하여 튜닝 기법을 활용하고 싶다
- 여러 모델간 성능 비교를 해가며 돌려보고 싶다

DATA SET

Training Dataset

Validation Dataset

Testing Dataset

TRAIN

VALIDATION

TEST

Train multiple Models

(e.g. Logistic Regression,
Decision Trees, KNN)

Validate Models

Tune Hyper parameters and
Select the Best Model
(e.g. Logistic Regression)

Evaluate Model

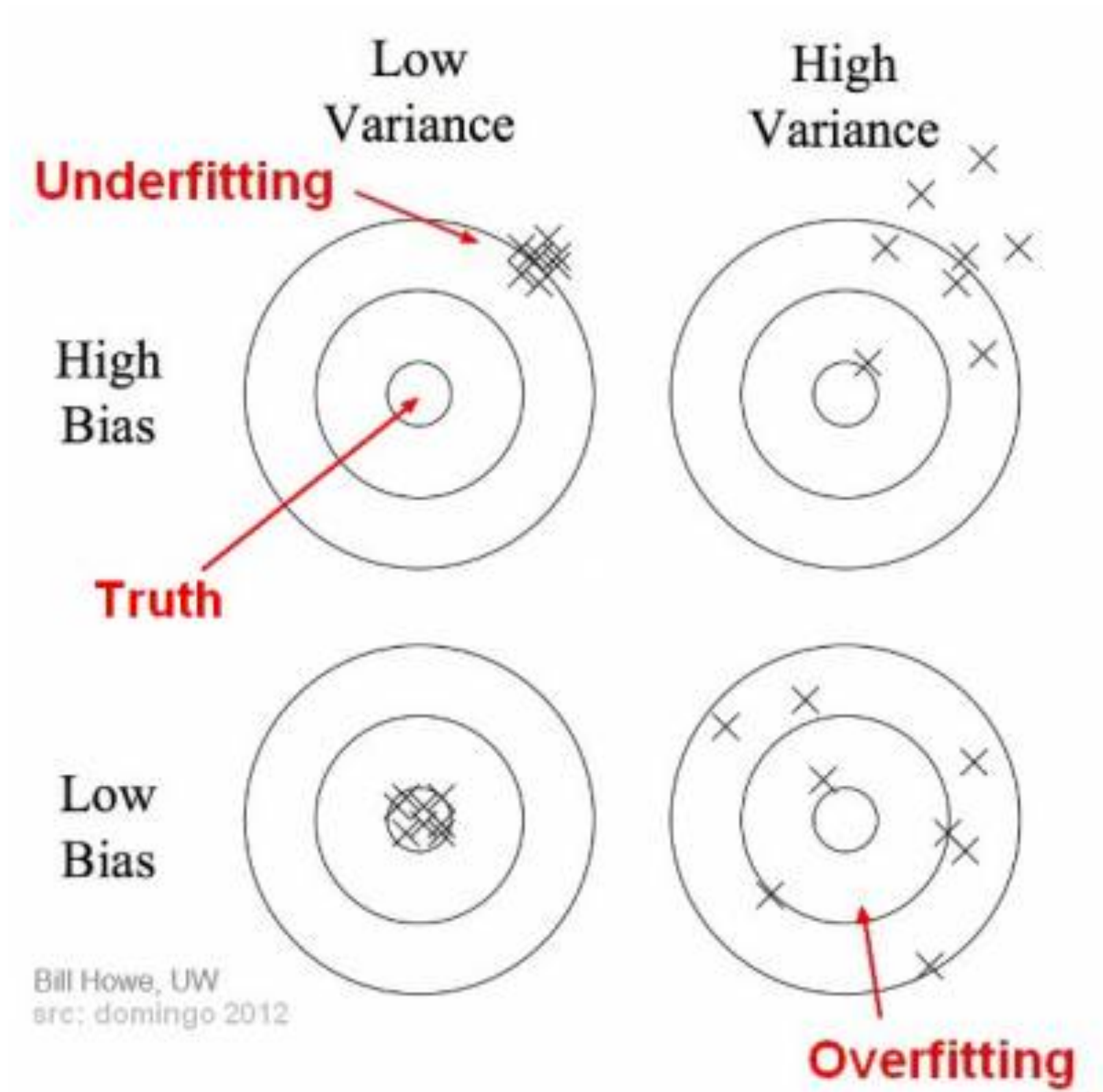
Evaluate the model based on various
metrics
(e.g. Confusion Matrix to evaluate the final
performance of the selected Logistic
Regression Model)

NOTATE ERROR FUNCTION WITH BIAS, VARIANCE

- x : data, y : ground truth, $\hat{f}(x)$: predicted
- $Bias[\hat{f}(x)] = E[\hat{f}(x) - f(x)]$
- $Var[\hat{f}(x)] = E[\hat{f}(x)^2] - E[\hat{f}(x)]^2$
- $E[(y - \hat{f}(x))^2] = Bias[\hat{f}(x)]^2 + Var[\hat{f}(x)] + \sigma^2$

$$y' = f(x') + \epsilon', \epsilon' \sim N(0, \sigma^2)$$

$$\begin{aligned}
 \text{MSE} &= \mathbb{E}(y' - \hat{f}(x'))^2 \\
 &= \mathbb{E}(y' - f(x') + f(x') - \hat{f}(x'))^2 \\
 &= \mathbb{E}(\epsilon' + (f(x') - \hat{f}(x')))^2 \\
 &= \mathbb{E}(\epsilon'^2 + 2\epsilon'(f(x') - \hat{f}(x')) + (f(x') - \hat{f}(x'))^2) \\
 &= \mathbb{E}(\epsilon'^2) + 2\mathbb{E}(\epsilon'(f(x') - \hat{f}(x')))) + \mathbb{E}(f(x') - \hat{f}(x'))^2 \\
 &= \sigma^2 + \mathbb{E}(f(x') - \hat{f}(x'))^2 \\
 &= \sigma^2 + (\mathbb{E}(f(x') - \hat{f}(x')))^2 + \text{Var}(f(x') - \hat{f}(x')) \\
 &= \text{irreducible noise} + \text{bias}^2 + \text{variance}
 \end{aligned}$$



REGULARIZATION

- loss function 에 제약조건을 부여해 overfitting 을 해결하려는 기법
- weight update 에 직접적인 영향을 줌

REGULARIZATION

L1 Regularization

$$\text{Cost} = \sum_{i=0}^N (y_i - \sum_{j=0}^M x_{ij} W_j)^2 + \lambda \sum_{j=0}^M |W_j|$$

L2 Regularization

$$\text{Cost} = \underbrace{\sum_{i=0}^N (y_i - \sum_{j=0}^M x_{ij} W_j)^2}_{\text{Loss function}} + \lambda \underbrace{\sum_{j=0}^M W_j^2}_{\text{Regularization Term}}$$

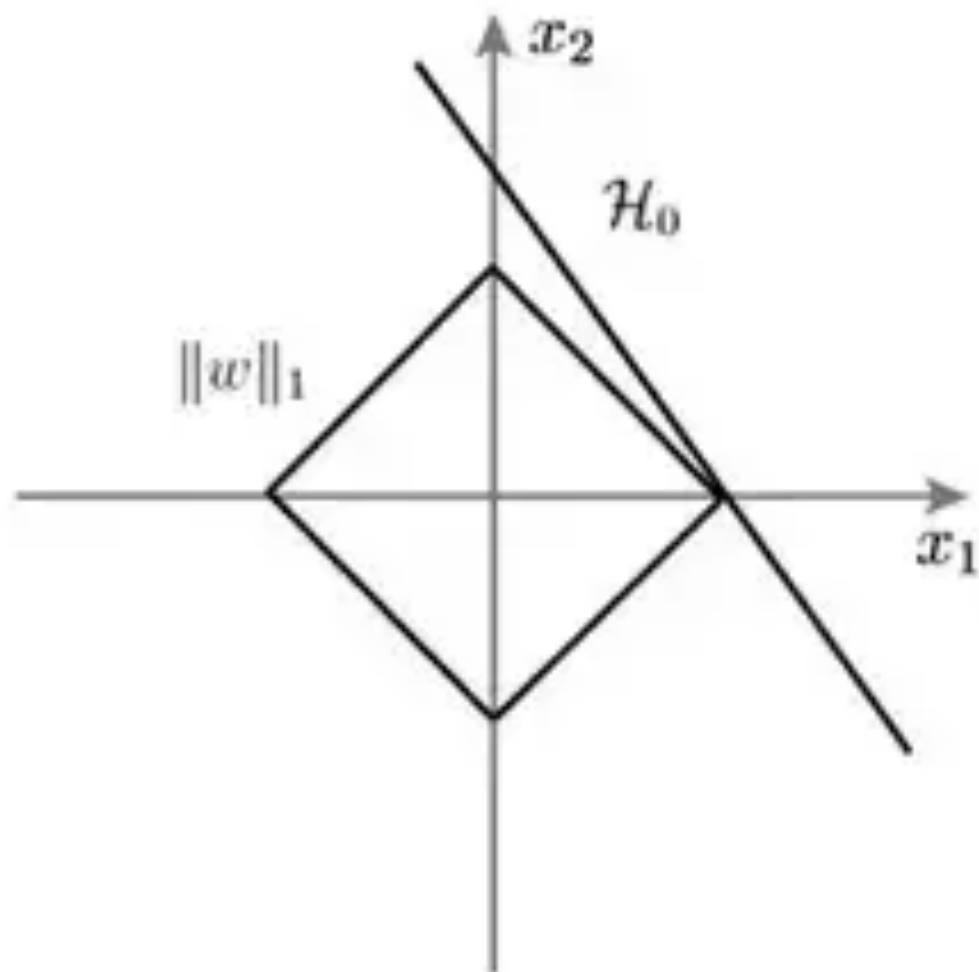
REGULARIZATION

L1 VS L2

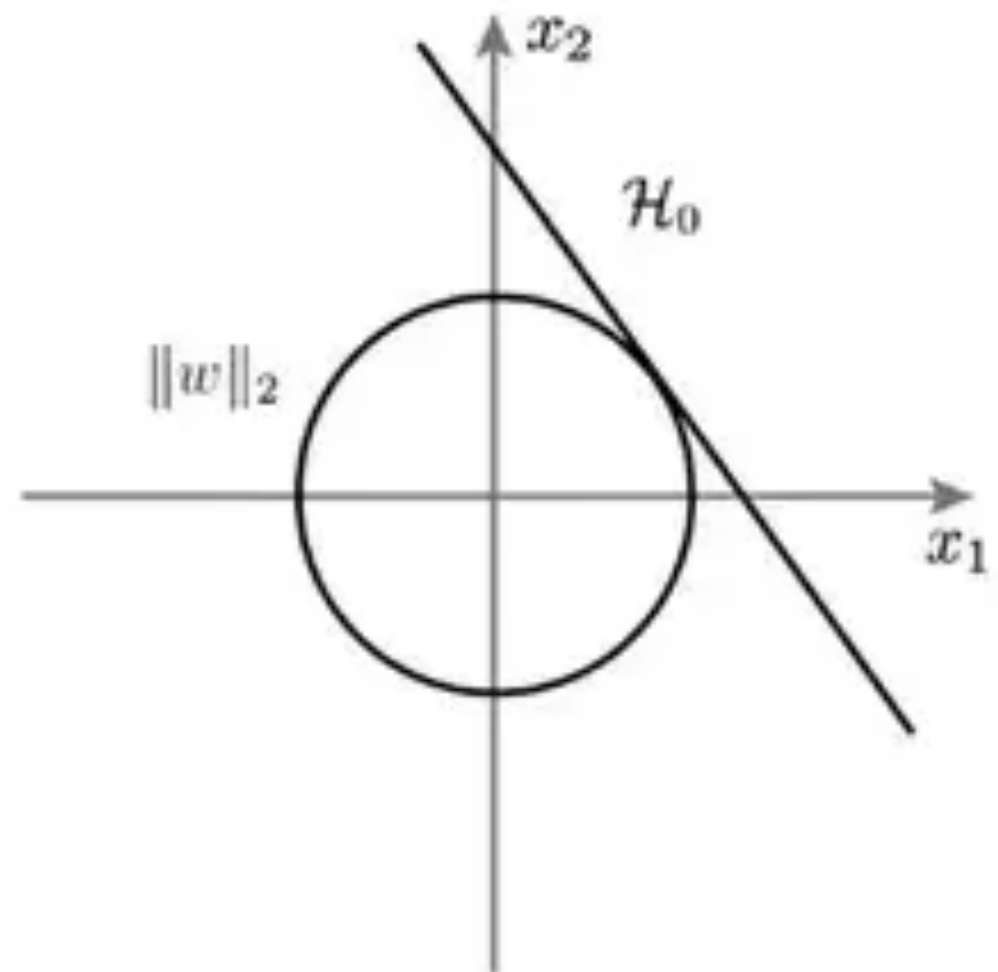
- L1 방식의 경우 특정 weight 가 **정확히 0이 될 가능성**이 높음 - 입력 데이터의 해당 feature 가 무시됨
- L2 의 경우 제곱의 특성으로 0에 가깝더라도 특성을 거의 살리는 특징이 있음

REGULARIZATION

A L1 regularization



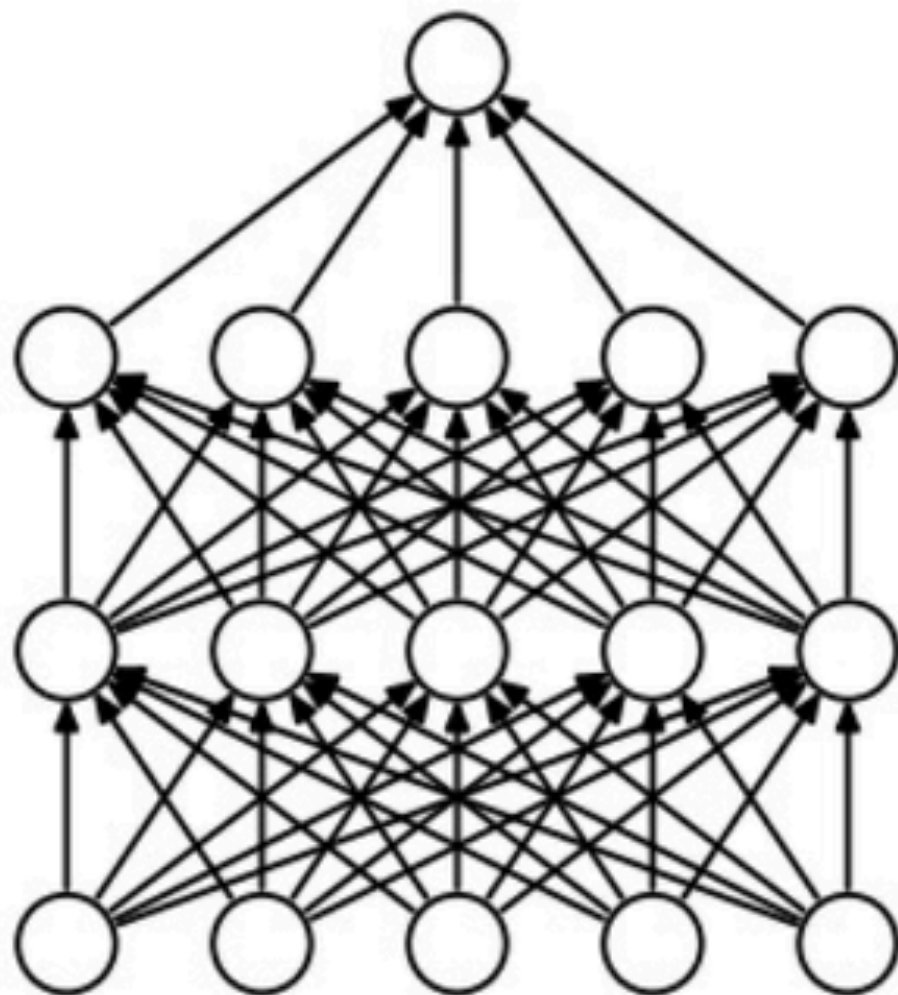
B L2 regularization



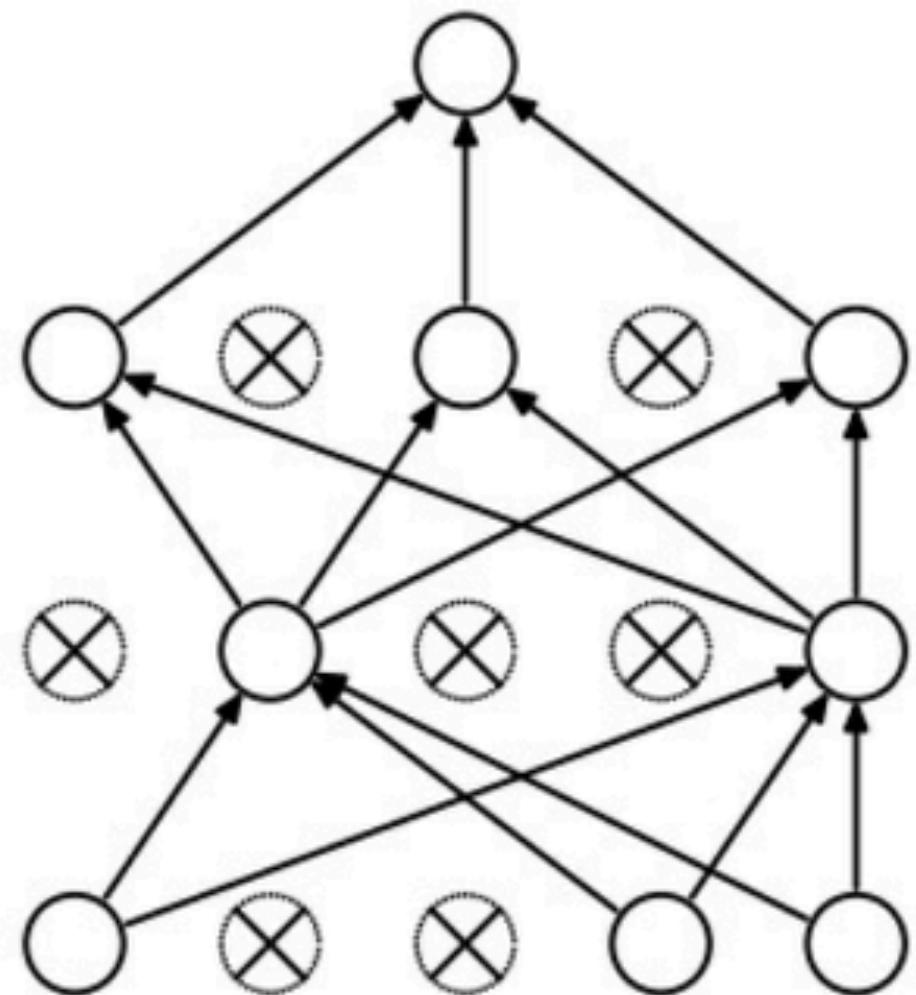
DROPOUT

- **training 과정에**, 임의의 비율(p)의 neuron 들을 disable 하는 방법
- test(predict) 단계에서는 train 단계에 비해 neuron 들이 전달 받는 값이 커지지 않도록 $(1-p)$ 를 곱하여 전달

DROPOUT



(a) Standard Neural Net



(b) After applying dropout.

Figure 1: Taken from the paper "Dropout: A Simple Way to Prevent Neural Networks from Overfitting"

DATA AUGMENTATION

- 데이터 뱅킹(?)
- 이미지의 경우 scale, rotate, translate, crop 과 같은 처리시 다른 픽셀데이터 패턴을 동일 label 의 데이터로 확보하는 효과를 기대할 수 있다.
- pytorch 의 경우 torchvision 라이브러리에 편리한 내장 기능이 제공됨

DATA AUGMENTATION

- tensorflow 에서도 기본적인 image transform 기능 제공
- <https://www.wouterbulten.nl/blog/tech/data-augmentation-using-tensorflow-data-dataset/>

WEIGHT INITIALIZATIONS

- 정답을 모르는데, 빠르고 정확한 train 에 도움이 되도록 weight 초기화를 잘할 수 있을까?
- 데이터가 여러 layer 를 거쳐 가더라도 그 activation 의 result 가 일정한 범위 안에 있도록 잡아주는 초기화값 사용이 좋다고 함

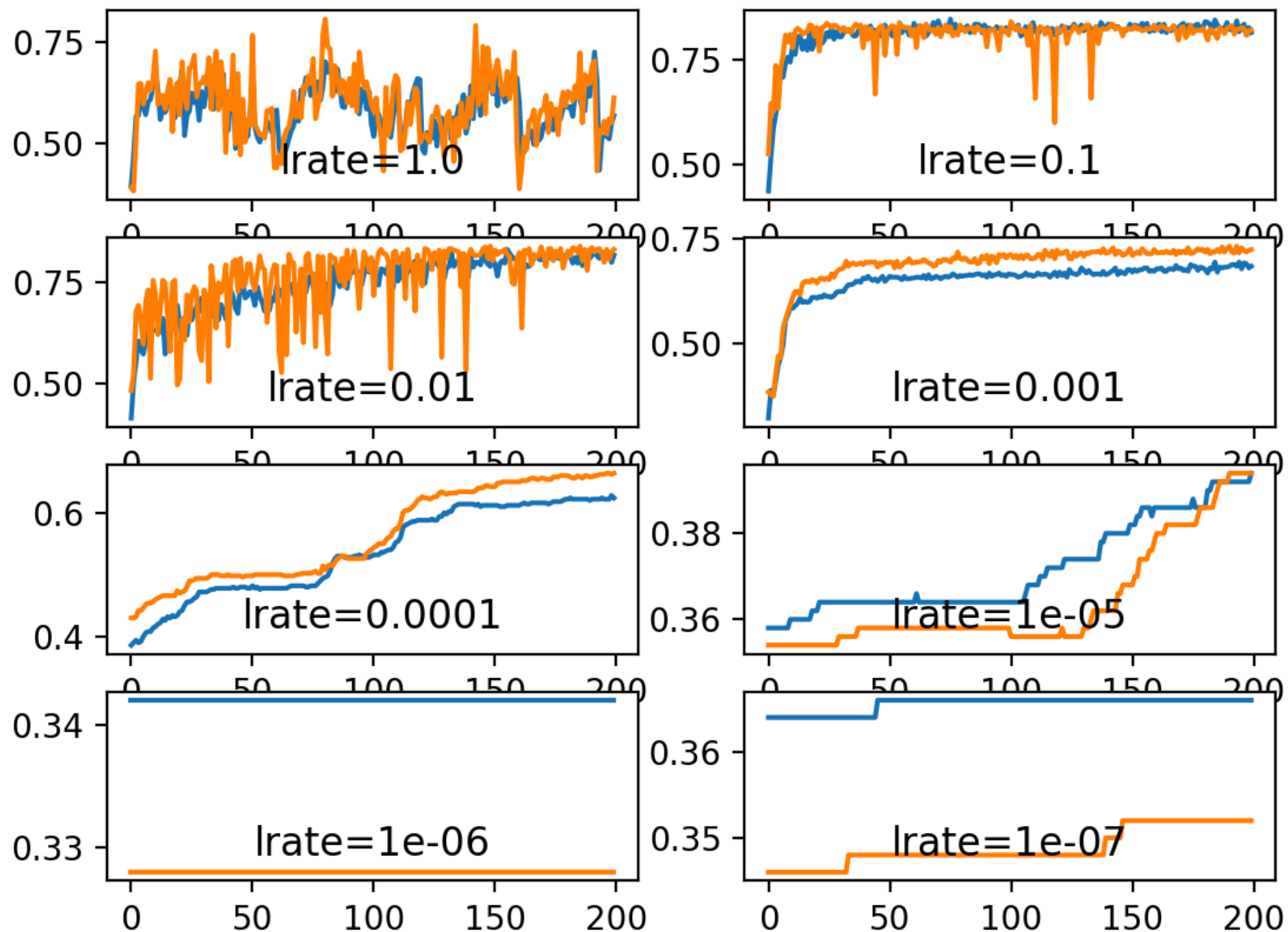
WEIGHT INITIALIZATIONS

- Xavier : sigmoid, tanh 같은 continuous function 에 적합
- He : ReLU 를 위한 특별한 방법

WEIGHT INITIALIZATIONS

- 참고 자료(Thanks to SooDevv)
- https://github.com/SooDevv/deep-learning-from-scratch2/blob/master/ch5_RNN/weight_initialization.ipynb

LEARNING RATE



DECAYING LEARNING RATE

- 초기에 높게 하고 점점 감소시키는 전략을 일반적으로 사용
 - 조건에 맞게 $0 < \text{gamma} < 1$ 을 만족하는 gamma 를 곱함
- 일반적인 decay 방법
 - step decay : n epoch 마다 gamma 를 곱함
 - exponential decay : 매 epoch 마다 gamma 를 곱함

NORMALIZATION

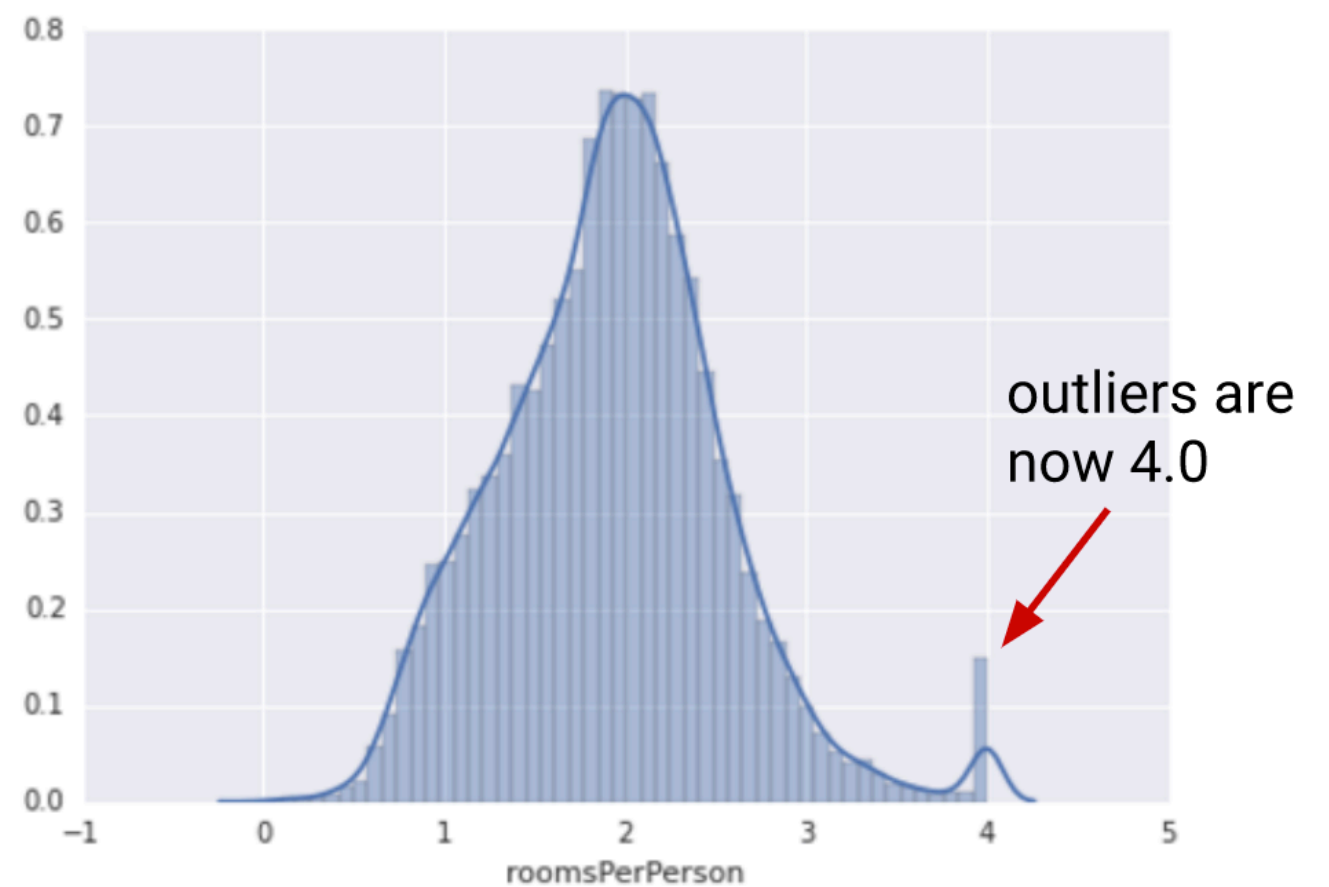
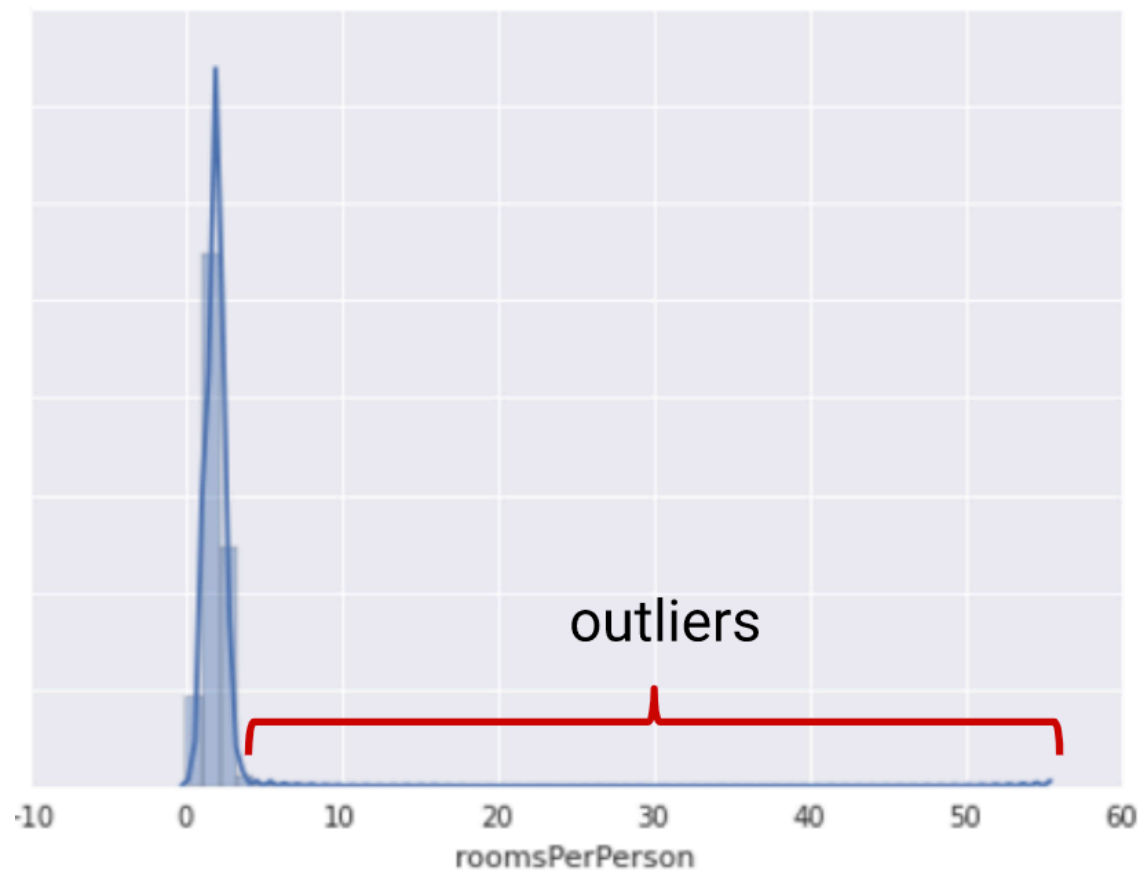
- 입력 데이터가 가질 여러 범위나 분포도를 일정한 범위로 조정하여 학습에 유리하게 함

NORMALIZATION

- Standardization : $z = \frac{x - \mu}{\sigma}$
- min-max : $z = \frac{x - \min(x)}{\max(x) - \min(x)}$

FEATURE CLIPPING

Same feature, capped to a max of 4.0



<https://developers.google.com/machine-learning/data-prep/transform/normalization>

BATCH NORMALIZATION

- 일반적인 Normalization 로 해결되지 않는 단점
 - internal covariate shift
- 신경망 내부 layer 간에 전달되는 데이터의 범위를 일정하게 하고자 하는 목적

BATCH NORMALIZATION

Input: Values of x over a mini-batch: $\mathcal{B} = \{x_{1\dots m}\}$;

Parameters to be learned: γ, β

Output: $\{y_i = \text{BN}_{\gamma, \beta}(x_i)\}$

$$\mu_{\mathcal{B}} \leftarrow \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m x_i \quad // \text{ mini-batch mean}$$

$$\sigma_{\mathcal{B}}^2 \leftarrow \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (x_i - \mu_{\mathcal{B}})^2 \quad // \text{ mini-batch variance}$$

$$\hat{x}_i \leftarrow \frac{x_i - \mu_{\mathcal{B}}}{\sqrt{\sigma_{\mathcal{B}}^2 + \epsilon}} \quad // \text{ normalize}$$

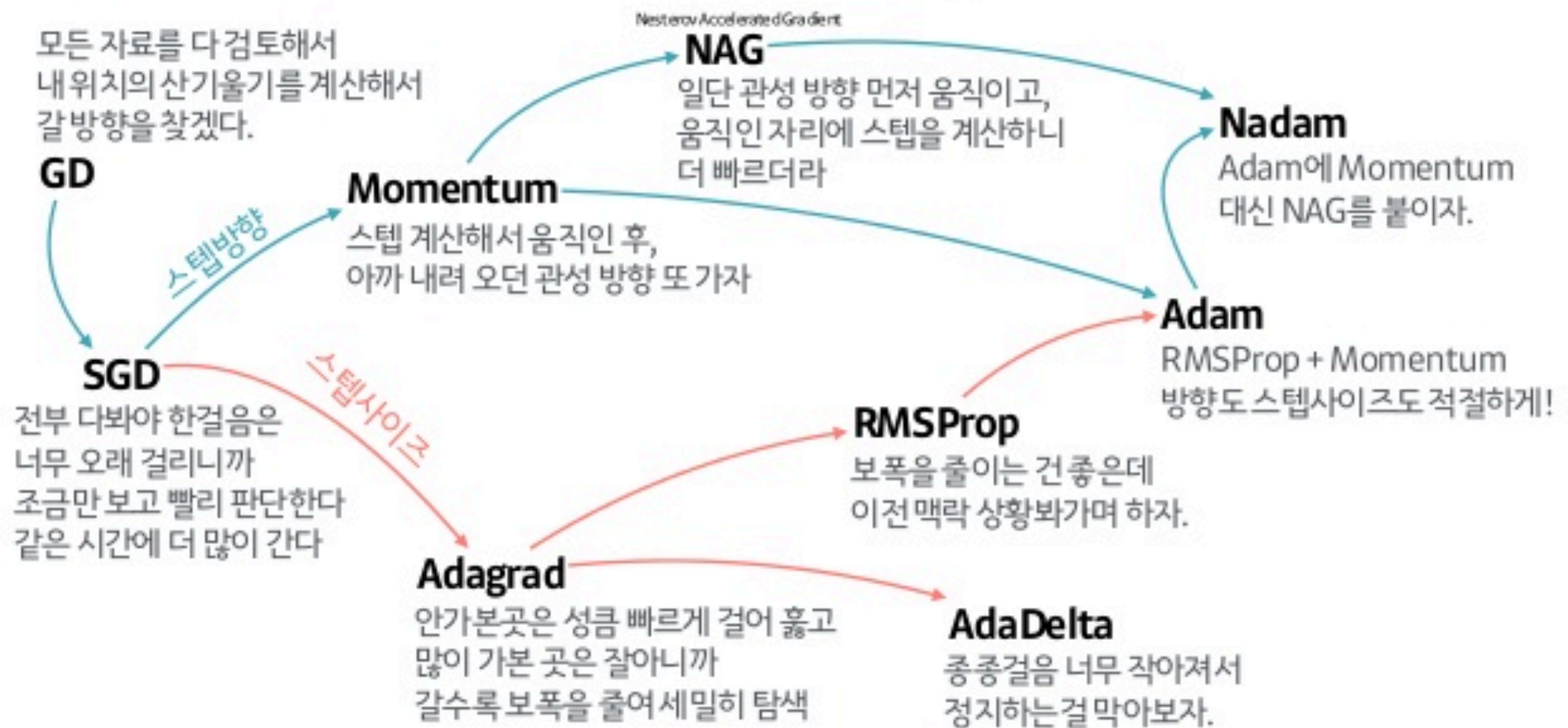
$$y_i \leftarrow \gamma \hat{x}_i + \beta \equiv \text{BN}_{\gamma, \beta}(x_i) \quad // \text{ scale and shift}$$

BATCH NORMALIZATION

- DenseNet 사용 사례
 - Conv -> Batchnorm -> Activation
 - hidden layer 마다 적용하여, 다음 layer 로 전달되는 값의 범위를 일정하게 하는 효과

VARIATIONS OF GRADIENT DESCENT

산 내려오는 작은 오솔길 찾기(Optimizer)의 발달 계보



<https://sacko.tistory.com/m/42>

<http://shuuki4.github.io/deep%20learning/2016/05/20/Gradient-Descent-Algorithm-Overview.html>

REFERENCES

- <https://3months.tistory.com/118>
- <https://bywords.tistory.com/entry/%EB%B2%88%EC%97%AD-%EC%9C%A0%EC%B9%98%EC%9B%90%EC%83%9D%EB%8F%84-%EC%9D%B4%ED%95%B4%ED%95%A0-%EC%88%98-%EC%9E%88%EB%8A%94-biasvariance-tradeoff>
- <https://zhangyuqing.github.io/2019/06/ml-summary-series-2---bias-variance-tradeoff/>
- <https://reniew.github.io/13/>
- <https://gomguard.tistory.com/184>