Introduction to neural network

Hyunjoong Kim

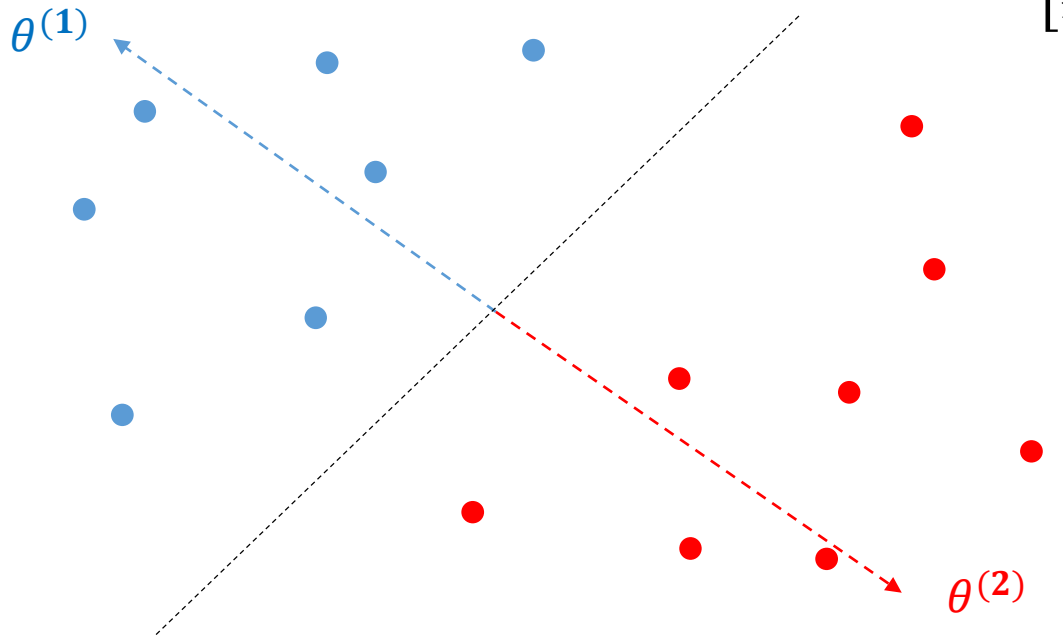
soy.lovit@gmail.com

github.com/lovit

XOR problem

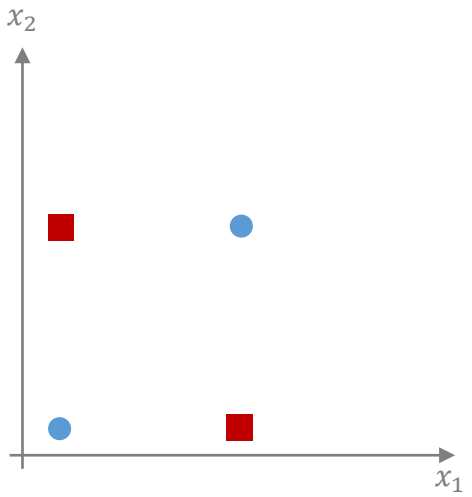
- Softmax regression 은 클래스별 대표벡터 $\theta^{(j)}$ 를 이용하여 데이터를 분류합니다.
- 하나의 직선 경계면으로 데이터가 분류될 때 "linear separable" 하다고 표현합니다.

$$y_\theta(x) = \begin{bmatrix} \frac{1}{1+\exp(-\theta^T x)} \\ \frac{\exp(-\theta^T x)}{1+\exp(-\theta^T x)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\exp(\theta^{(1)^T} x)}{\exp(\theta^{(1)^T} x)+\exp(\theta^{(2)^T} x)} \\ \frac{\exp(\theta^{(2)^T} x)}{\exp(\theta^{(1)^T} x)+\exp(\theta^{(2)^T} x)} \end{bmatrix}$$



XOR problem

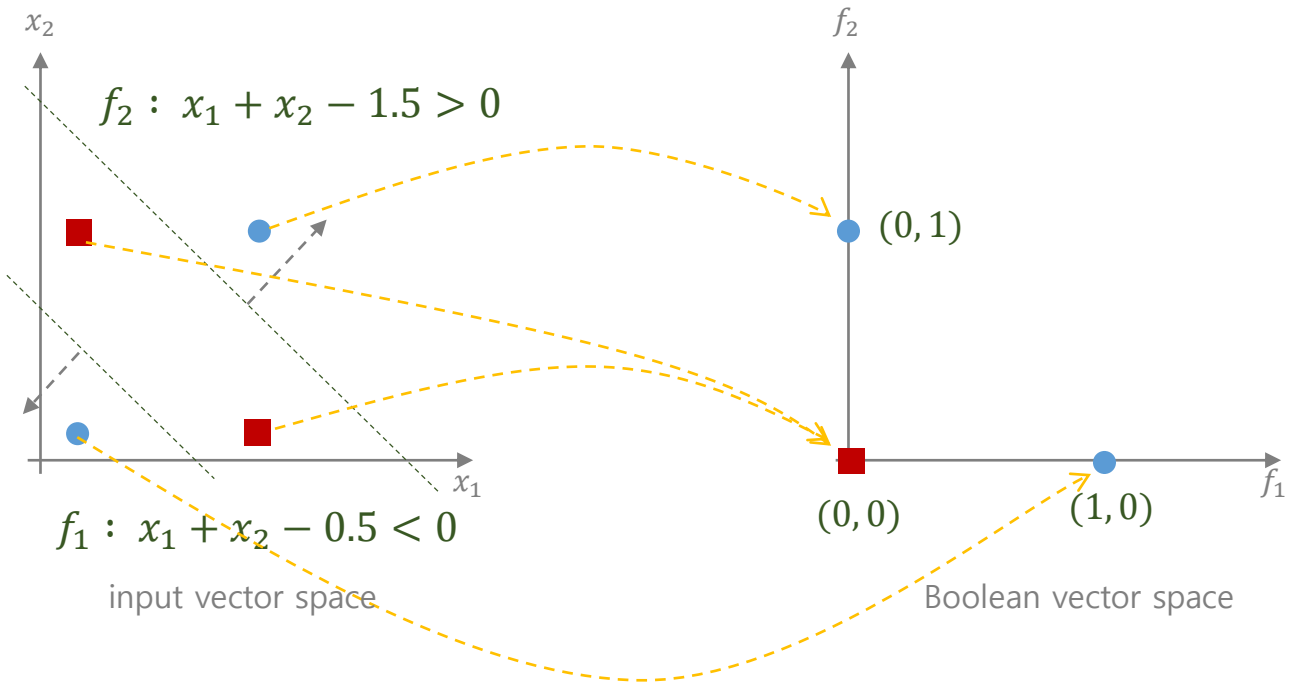
- 하나의 직선 경계면으로 분류되지 않는 데이터를 “linear inseparable” 이라 합니다.
  - 곡선 경계면을 이용하던지 (nonlinear classifiers)
  - 데이터의 벡터 표현 (representation) 을 선형으로 변환해야 합니다 (neural network).



input vector space

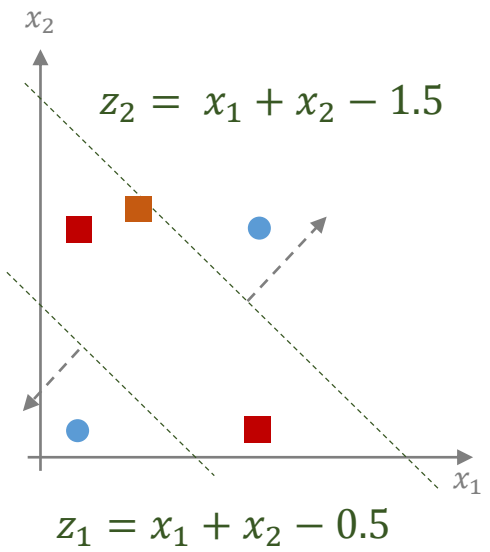
XOR problem

- 두 개의 직선을 이용하면 아래 데이터를 구분할 수 있습니다.
  - (0, 0) 은 빨간색, 그 외는 파란색으로 데이터를 구분할 수 있습니다.
  - Perceptron 은 Boolean 함수를 이용하여 데이터의 representation 을 변형합니다.

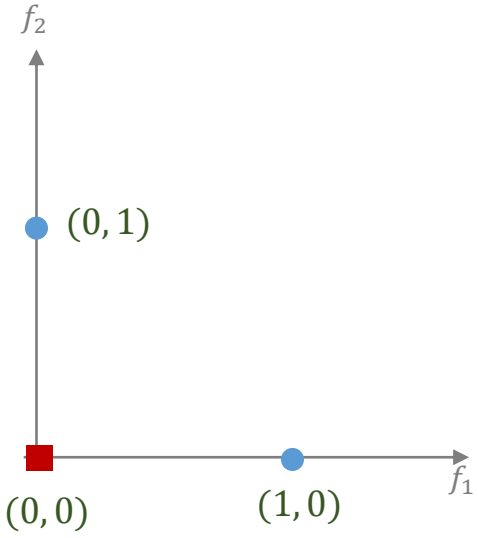


XOR problem

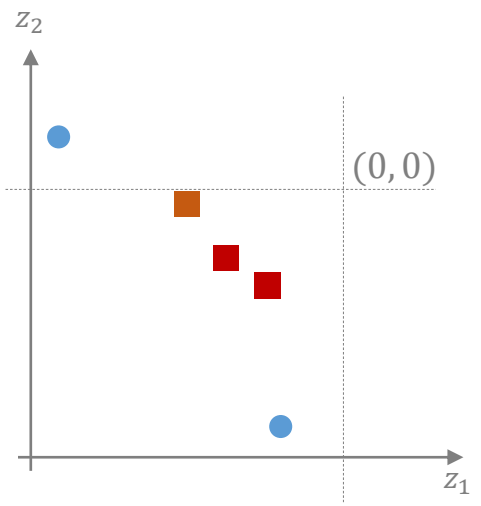
- 두 개의 직선을 이용하면 아래 데이터를 구분할 수 있습니다.
  - Boolean 함수는 지나치게 많은 정보를 잃어버립니다.
  - 선형 결합 (z_2) 은 더 풍부한 정보를 표현하지만, 범위가 $(-\infty, \infty)$ 이며, 복잡한 비선형 공간을 표현하기 어렵습니다.



input vector space



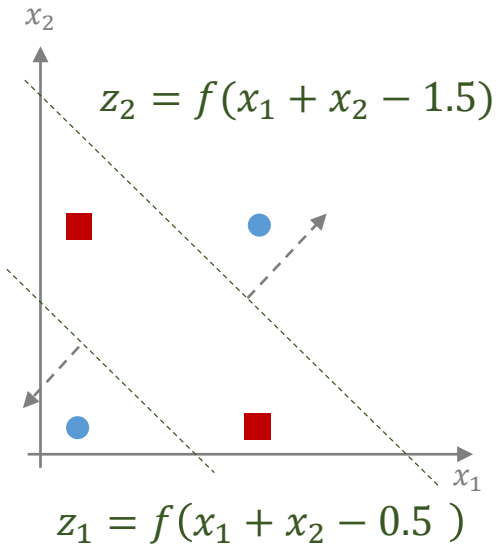
Boolean vector space

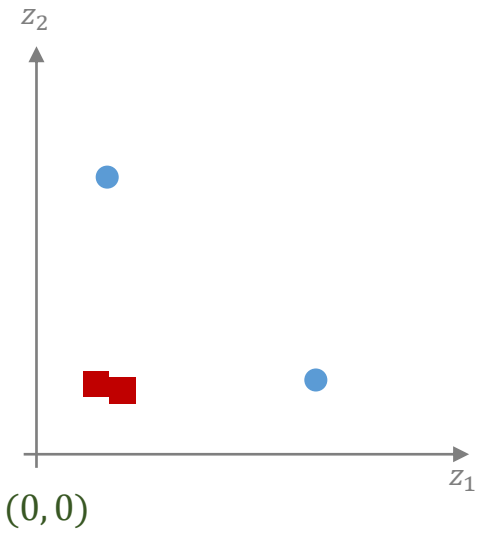


continuous vector space

XOR problem

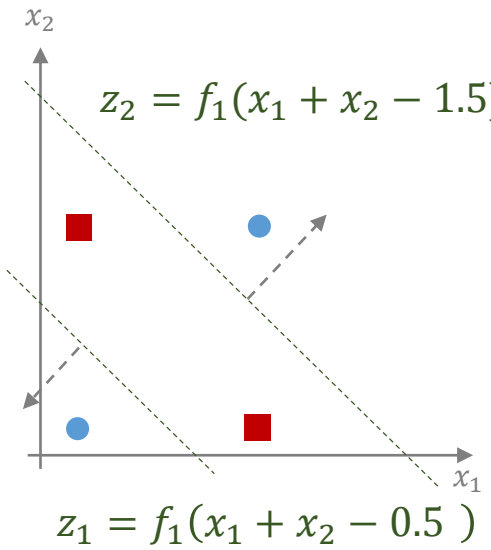
- 비선형 함수 (activation function, f) 를 이용하면 제한된 범위의 공간에서, 비선형 공간을 표현하는 새로운 representation 을 얻을 수 있습니다.
  - Sigmoid, $f(x) = \frac{1}{1+\exp(-x)}$ 함수가 이용될 수 있습니다.

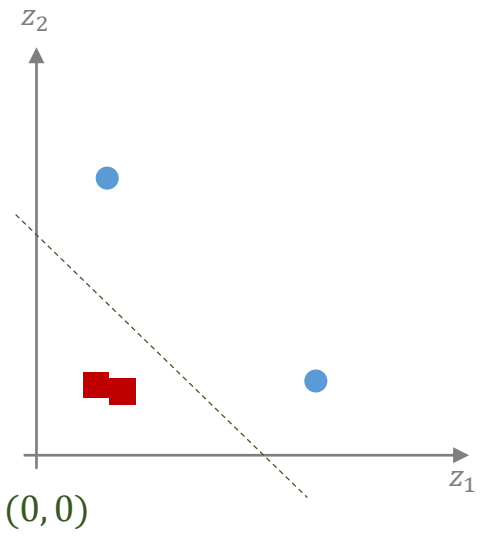




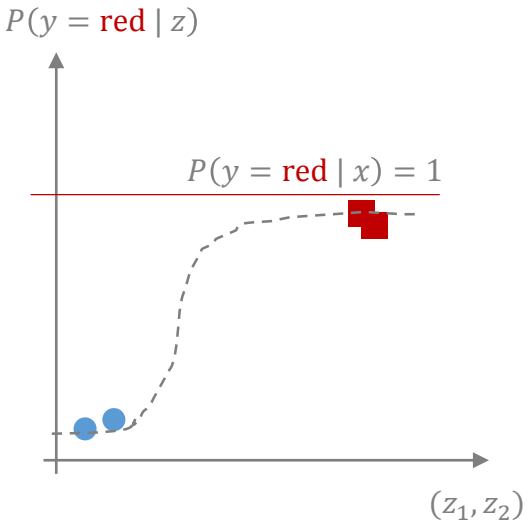
XOR problem

- f_1 을 이용하여 $x \rightarrow z$ 로 representation 을 변경한 뒤, z 에 의한 함수 $f_2(z)$ 를 이용하여 데이터를 분류 합니다.





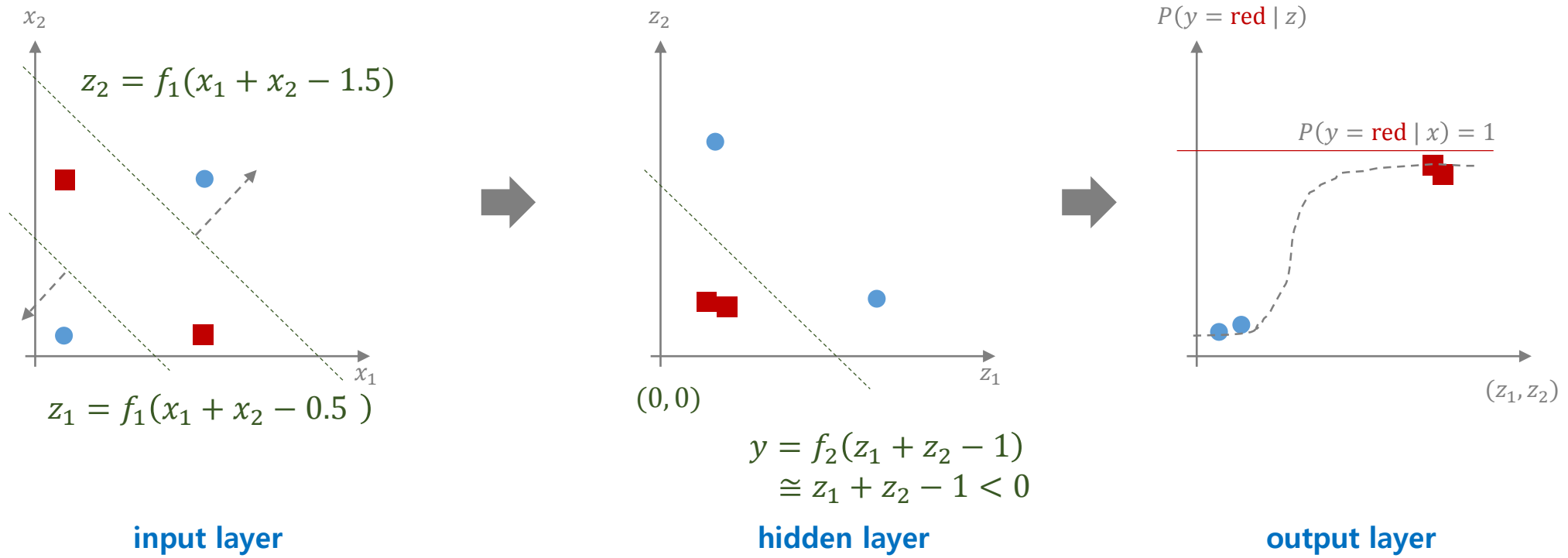
$$y = f_2(z_1 + z_2 - 1)$$
$$\cong z_1 + z_2 - 1 < 0$$



XOR problem

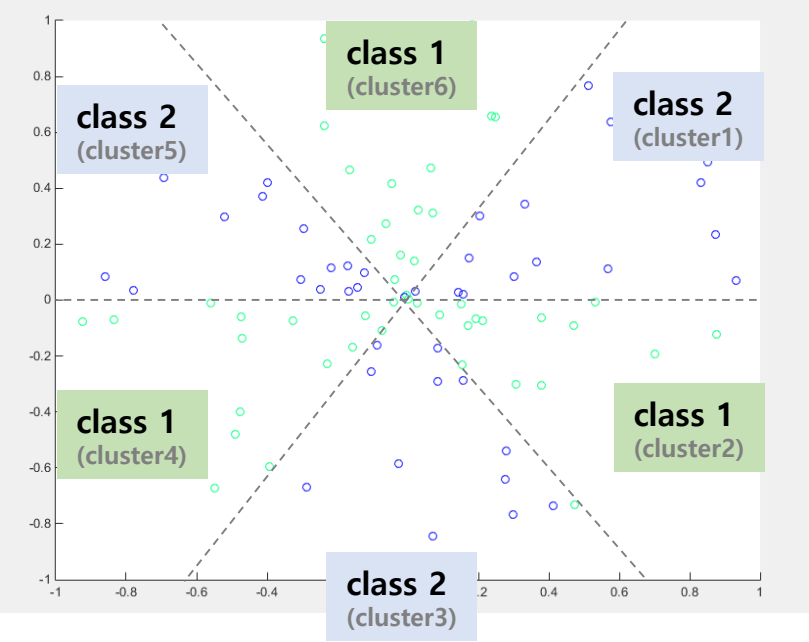
- 이러한 판별 모델을 feed-forward neural network 라 합니다.
  - 패러매터들을 weights 라 부루기도 합니다.
  - $h_1 = f_1(A_1 x + b_1)$

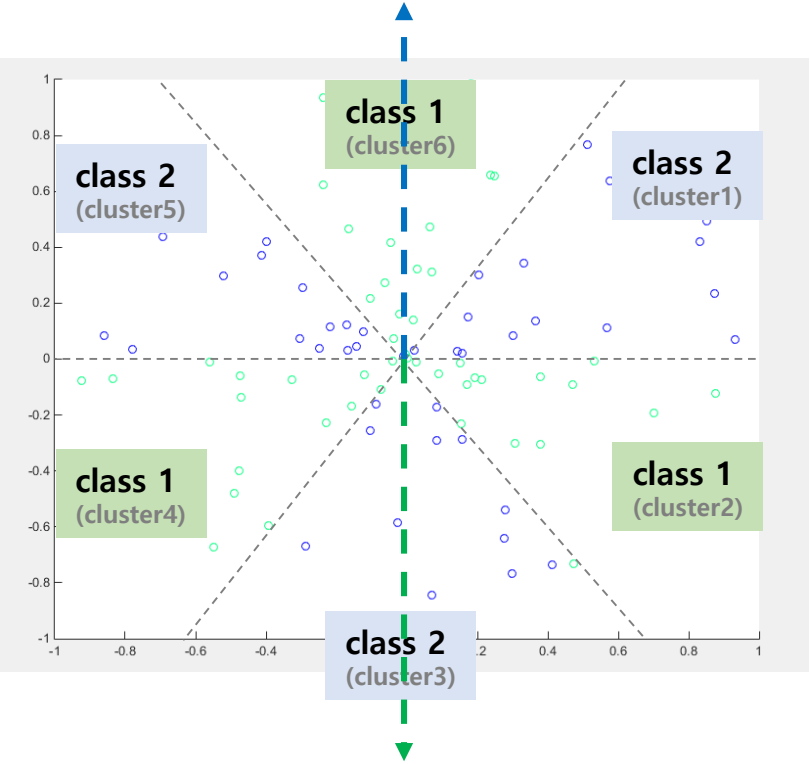
    $\hat{y} = f_2(A_2 h_1 + b_2) = f_2(A_2 f_1(A_1 x + b_1) + b_2)$



Feed-forward Neural Network

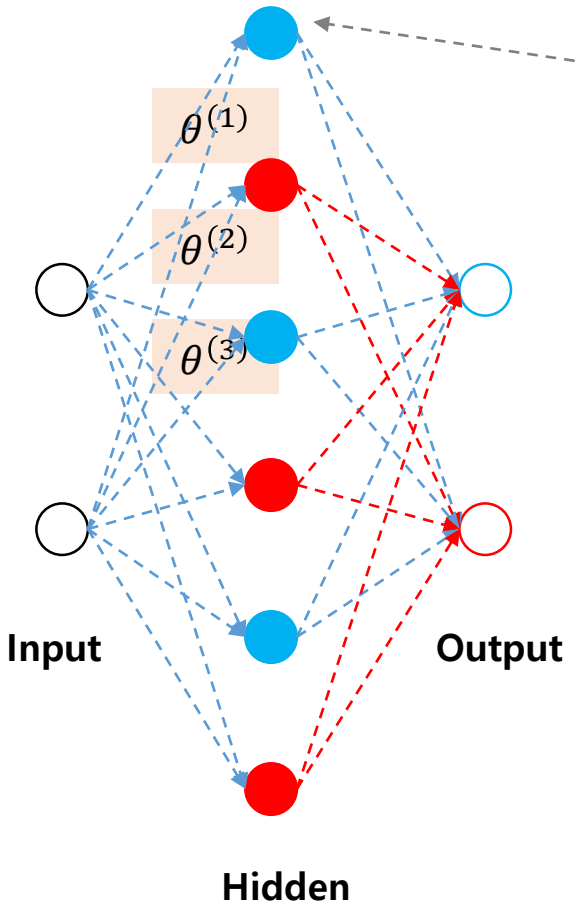
- 이러한 방법은 공간이 복잡하여도 잘 작동합니다. 2 개의 클래스에 속한 데이터가 6개의 지역으로 나뉘어 분포한 데이터입니다.
- Logistic regression 은 두 개의 대표벡터만 학습하기 때문에 분류를 할 수 없습니다.

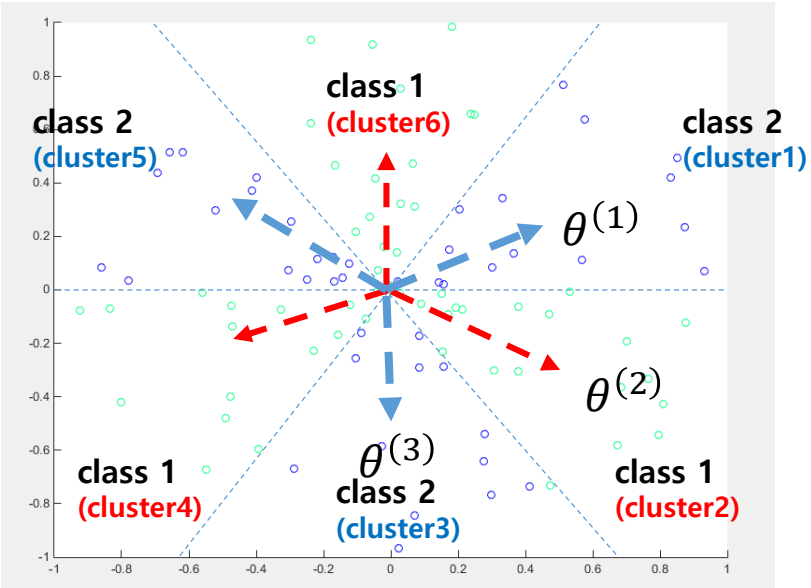




Feed-forward Neural Network

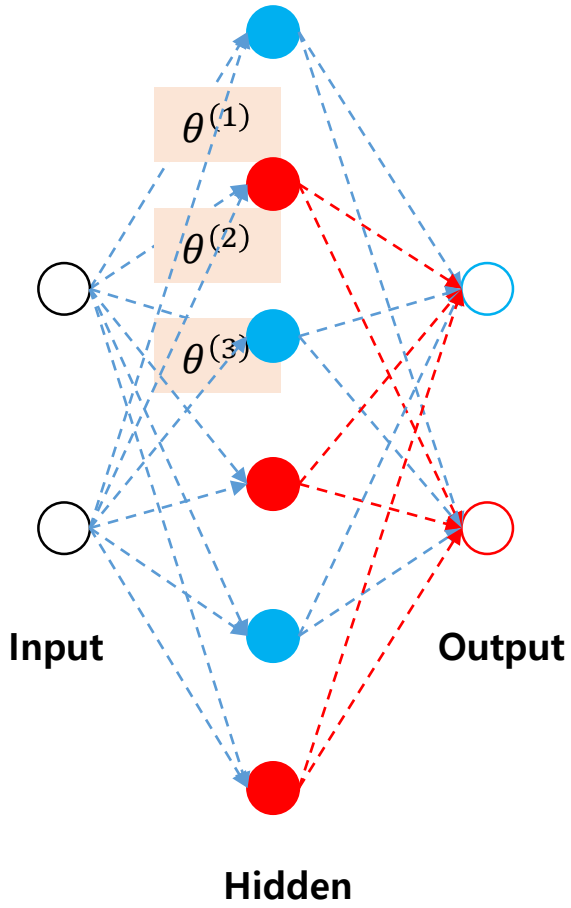
- 각 지역별로 하나의 대표벡터를 두고, $z_j = \frac{1}{1+\exp(-x^T\theta_j)}$ 로 변형해 봅니다.





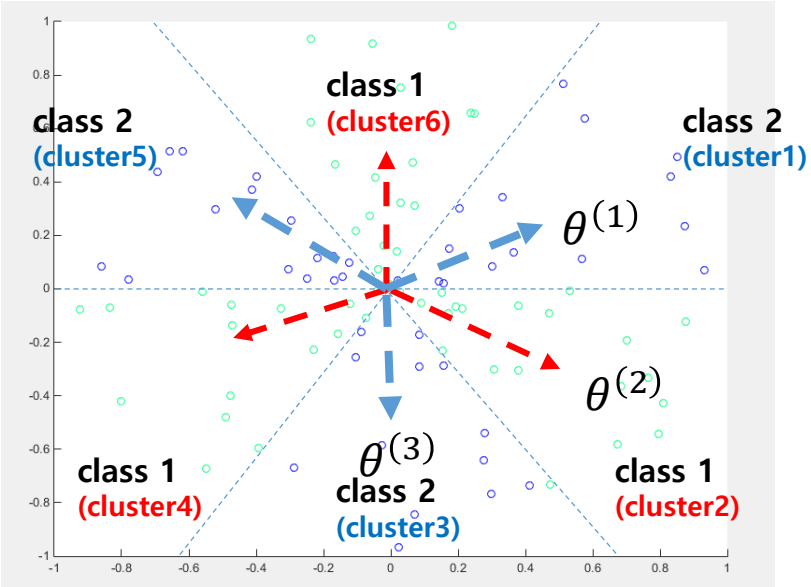
Feed-forward Neural Network

- Sigmoid, $f = \frac{1}{1+\exp(-x)}$ 는 데이터를 Boolean vector 처럼 변형시킵니다.



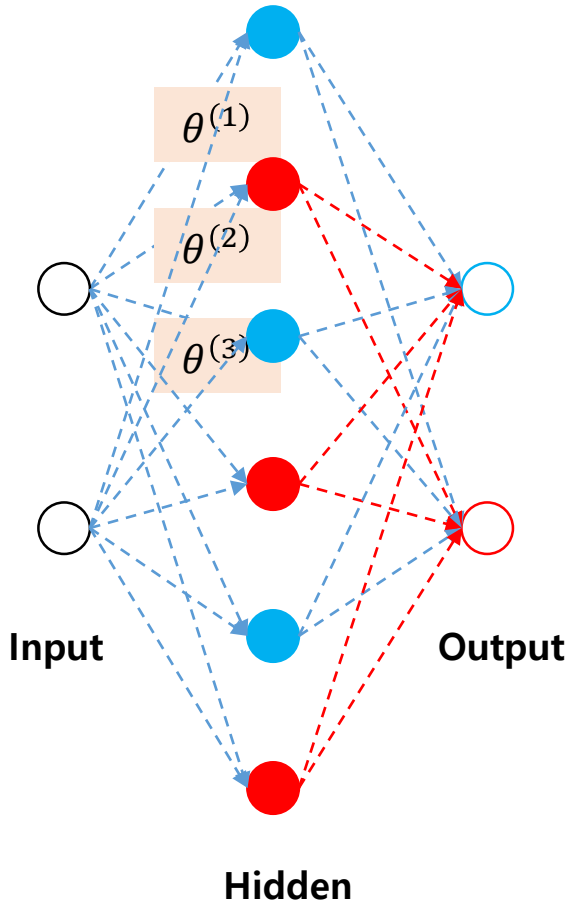
Hidden to output parameters

$$h^{(1)} = [1, \quad 0.3, \quad 0.1, \quad 0.03, \quad 0.1, \quad 0.3]$$



Feed-forward Neural Network

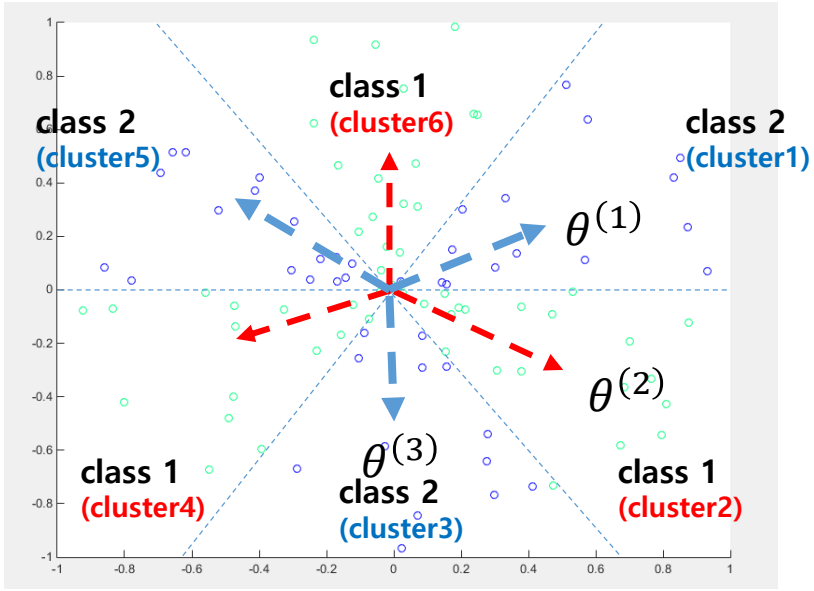
- 6 차원으로 변한 데이터는 linear separable 입니다.



Hidden to output parameters

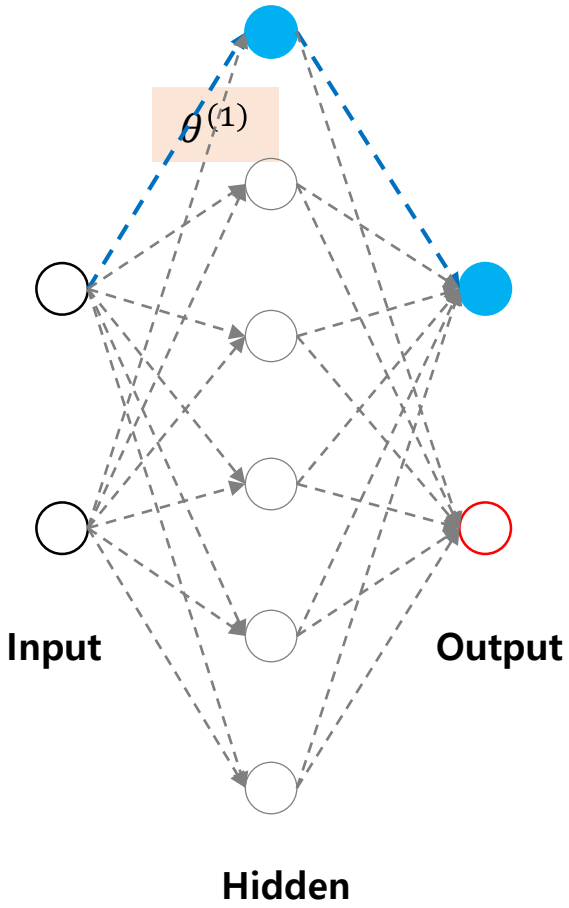
$$h^{(1)} = [1, \quad 0.3, \quad 0.1, \quad 0.03, \quad 0.1, \quad 0.3]$$

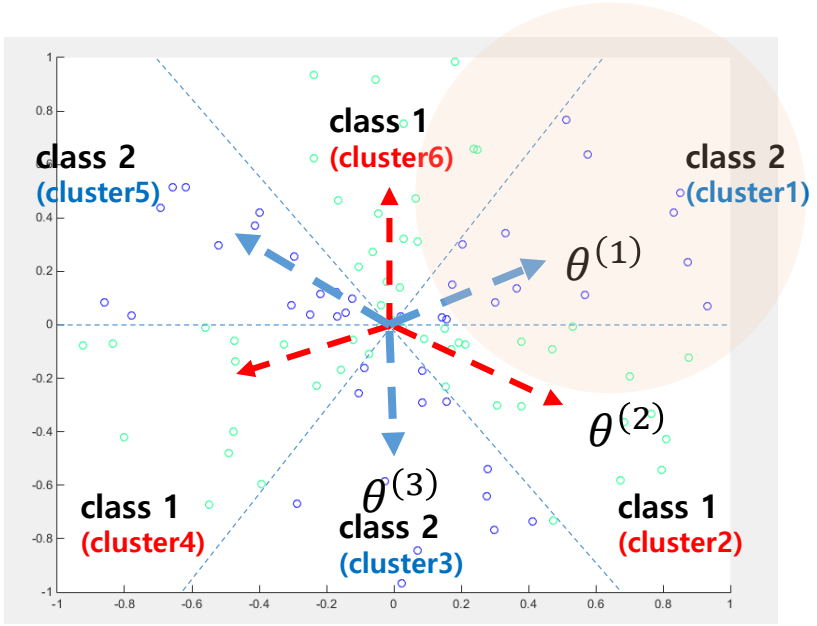
$$\theta^{h \to o_1} = [1, \quad -1, \quad 1, \quad -1, \quad 1, \quad -1]$$



Feed-forward Neural Network

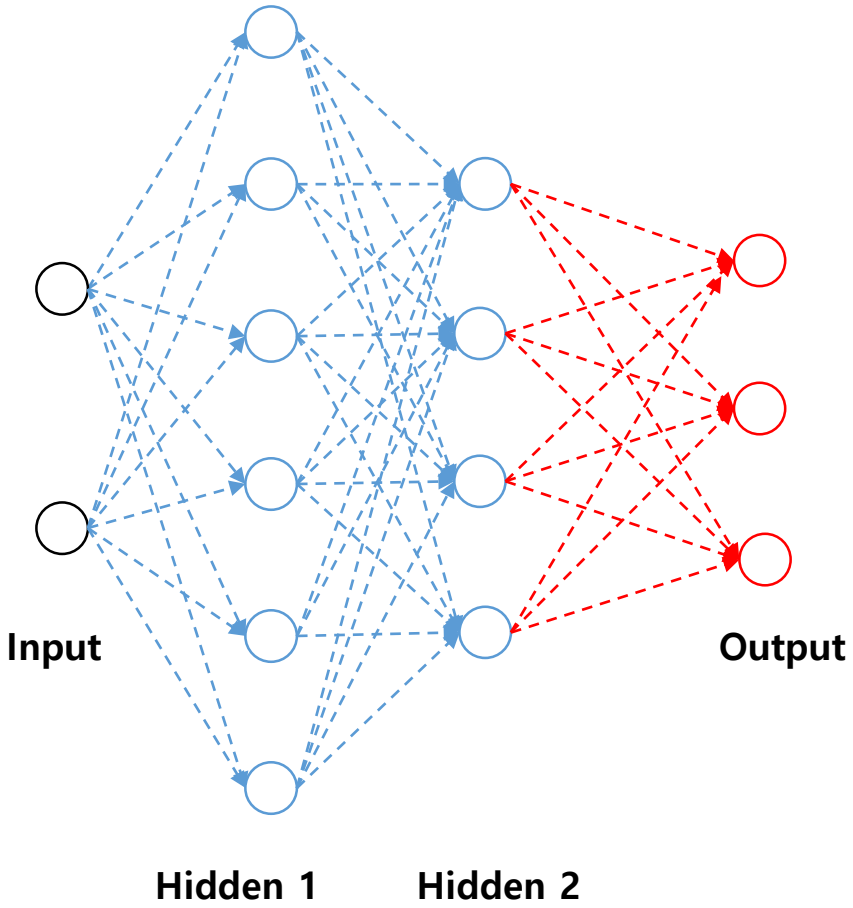
- 하나의 hidden unit 은 한 지역을 표현합니다. 군집화와 비슷합니다.
  - Cluster 1에 속하면 파란색 클래스일 가능성이 높습니다.





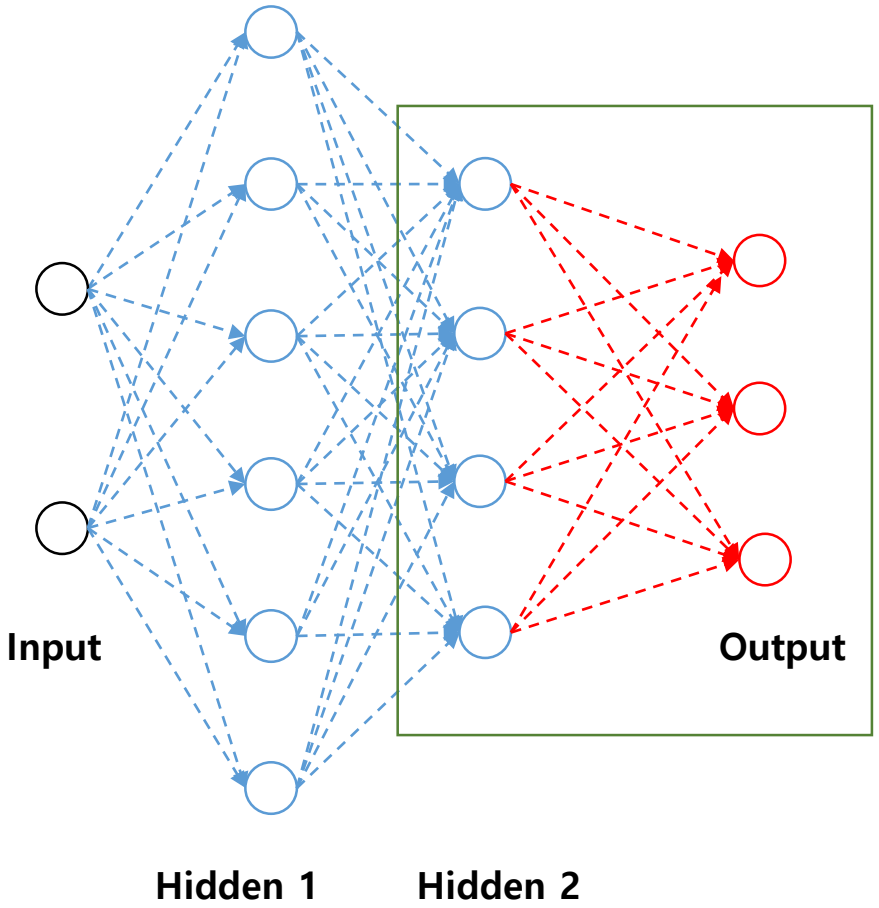
Feed-forward Neural Network

- 여러 개의 hidden layers 는 여러번의 공간 변형을 통하여 문제를 linear separable 하게 변형하는 것입니다. (2차원 데이터 → 6 → 4 차원 hidden, 3 classes 분류)



Feed-forward Neural Network

- 여러 개의 hidden layers 는 여러번의 공간 변형을 통하여 문제를 linear separable 하게 변형하는 것입니다. (2차원 데이터 → 6 → 4 차원 hidden, 3 classes 분류)



Hidden 2 의 4차원이 linear separable 하다면,
Softmax (hidden2 → output) 은 잘 작동합니다.

Components

- 뉴럴 네트워크를 구성할 때에는 대표적으로 다음을 결정해야 합니다.
  - loss (objective) : 모델의 성능 측정 기준
  - structure : hidden layers 개수, units 크기, activation functions
  - optimizer : 모델 학습 방법
  - initializer : 패러매터 초기화 방법
  - training style

[Components] : loss (objective) | structure | activation | optimizer | initializer | training style

Loss function (objective)

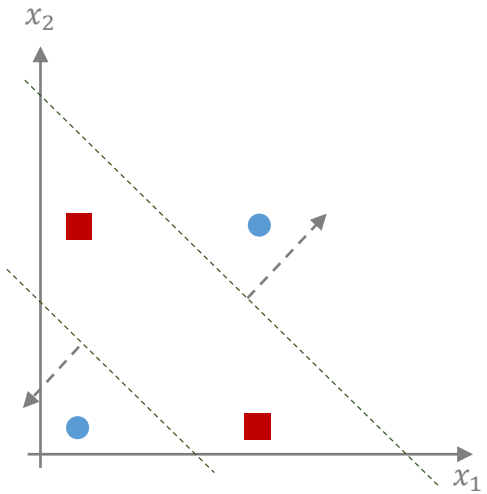
- 문제에 따라 다양한 "모델 품질 평가 기준"이 존재합니다.
  - 앞서 살펴본 기준들이 이용될 수 있습니다.
  - Regression 문제는 다음의 기준들이 있습니다.
    - Mean Squared Error : $\frac{1}{2n}\sum(y - \hat{y})^2$
    - Mean Absolute Percentage Error : $\frac{1}{n}\sum_i \frac{|\widehat{y_i} - y_i|}{|y_i|}$
    - etc ...

Loss function (objective)

- 문제에 따라 다양한 "모델 품질 평가 기준"이 존재합니다.
  - Classification 문제는 다음의 기준들이 있습니다.
    - Negative Log-Likelihood : $\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{K} I(y_i = j)\left(-x_i^T\beta_j + \log\sum_{j`}^{K}\exp\left(x_i^T\beta_{j`}\right)\right)$
      - cross entropy loss 라 불립니다.
    - Hinge loss
    - Kullback-Leibler Divergence (KL divergence)
    - etc …

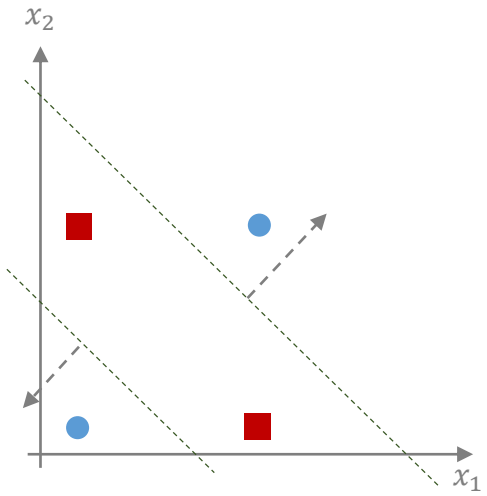
Structure

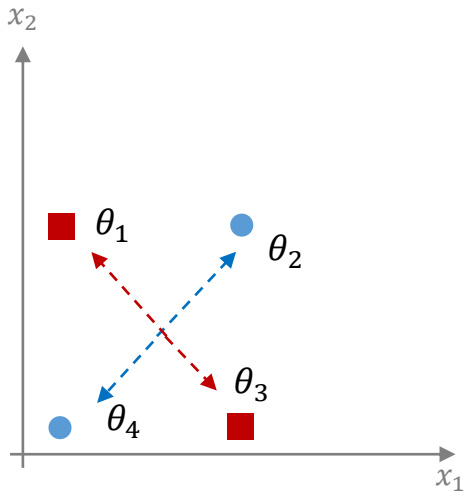
- 예시 데이터는 2 차원이기 때문에 적절한 hidden layers/units 을 설정할 수 있지만, 실제 데이터는 고차원이기 때문에 이를 정의하기 어렵습니다.

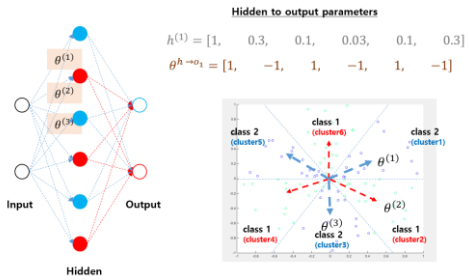


Structure

- 4 차원 hidden 이 2 차원 hidden 보다 학습이 잘 이뤄질 수 있습니다.
  - 하지만 hidden layers/units 이 지나치게 크면 과적합이 일어날 수 있습니다.
  - 데이터가 충분할 경우, 성능 평가를 통하여 모델 구조를 설정해야 합니다.

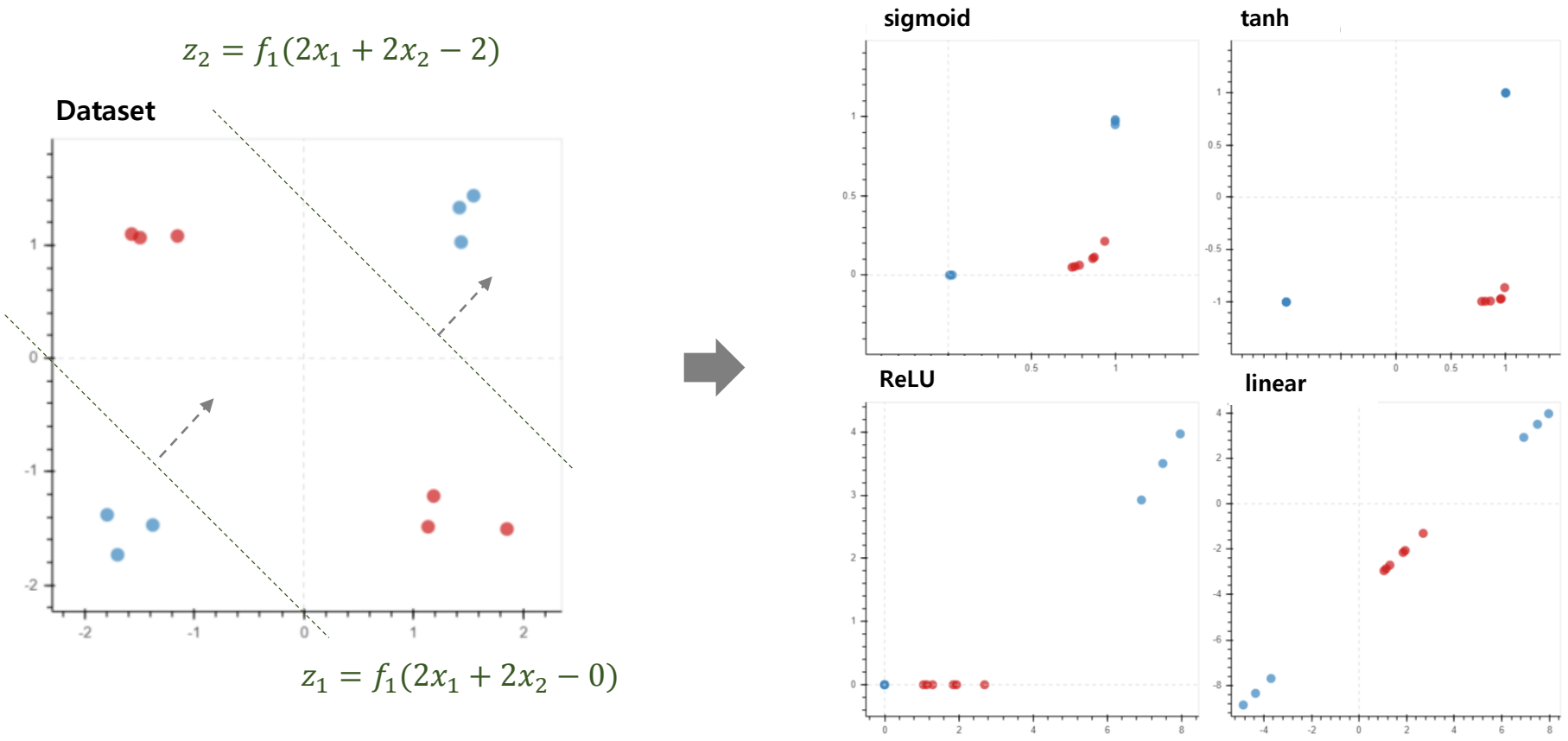






Activation functions

- 활성함수 (activation functions) 에 따라서 hidden vector 의 분포가 달라집니다.



Activation functions

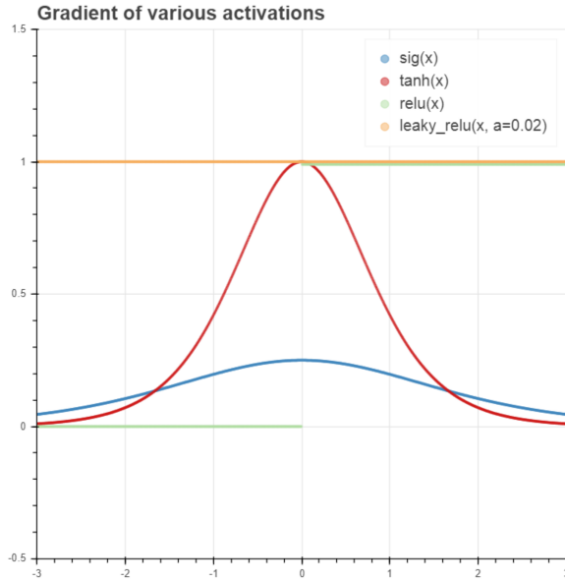
- 대표적으로 많이 이용되는 활성함수입니다.

Name	$f(x)$	$f(x)'$	range
Sigmoid	$f(x) = \frac{1}{1+\exp(-x)}$	$f(x) \times \big(1 - f(x)\big)$	$(0, 1)$
Hyper-tangent (tanh)	$f(x) = \frac{\exp(x) - \exp(x)}{\exp(x) + \exp(x)}$	$1 - f(x)^2$	$(-1, 1)$
Rectified Linear Unit (ReLU)	$f(x) = \max(0, x)$	$f(x)' = \begin{cases} 1 & \text{if } x > 0 \\ 0 & \text{if } x \leq 0 \end{cases}$	$(0, \infty)$
Leaky ReLU	$f(x) = \begin{cases} \max(0, x) & \text{if } x > 0 \\ ax & \text{if } x \leq 0 \end{cases}$	$f(x)' = \begin{cases} 1 & \text{if } x > 0 \\ a & \text{if } x \leq 0 \end{cases}$	$(-\infty, \infty)$

Activation functions

- 처음에는 sigmoid $f(x) = \frac{1}{1+\exp(-x)}$ 함수가 자주 이용되었습니다. 그러나 gradient 가 잘 전달되지 않아 여러 층의 hidden layers 가 쌓이면 학습이 어려웠습니다.
- 이를 해결하기 위하여 tanh $f(x) = \frac{\exp(x)-\exp(-x)}{\exp(x)+\exp(-x)}$, ReLU $f(x) = \max(0, x)$,

  Leaky-ReLU $f(x) = \begin{cases} \max(0,x) & \text{if } x > 0 \\ ax & \text{if } x \leq 0 \end{cases}$ 등이 이용되었습니다.

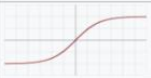
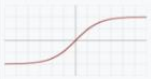
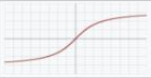
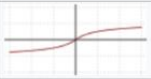
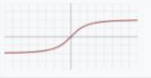
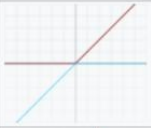


Activation functions

- 처음에는 sigmoid $f(x) = \frac{1}{1+\exp(-x)}$ 함수가 자주 이용되었습니다. 그러나 gradient 가 잘 전달되지 않아 여러 층의 hidden layers 가 쌓이면 학습이 어려웠습니다.
- 이를 해결하기 위하여 tanh $f(x) = \frac{\exp(x)-\exp(-x)}{\exp(x)+\exp(-x)}$, ReLU $f(x) = \max(0, x)$,

  Leaky-ReLU $f(x) = \begin{cases} \max(0,x) & \text{if } x > 0 \\ ax & \text{if } x \leq 0 \end{cases}$ 등이 이용되었습니다.
- 최근에는 tanh, (leaky) ReLU 들이 자주 이용되며, 특정 네트워크에서 잘 작동하는 활성함수가 있기도 합니다 (CNN + ReLU).

Activation functions

Name	Plot	Equation	Derivative (with respect to x)	Range	Order of continuity
Identity		$f(x) = x$	$f'(x) = 1$	$(-\infty, \infty)$	C^∞
Binary step		$f(x) = \begin{cases} 0 & \text{for } x < 0 \\ 1 & \text{for } x \geq 0 \end{cases}$	$f'(x) = \begin{cases} 0 & \text{for } x \neq 0 \\ ? & \text{for } x = 0 \end{cases}$	$\{0, 1\}$	C^{-1}
Logistic (a.k.a. Sigmoid or Soft step)		$f(x) = \sigma(x) = \frac{1}{1+e^{-x}}$ [1]	$f'(x) = f(x)(1 - f(x))$	$(0, 1)$	C^∞
TanH		$f(x) = \tanh(x) = \frac{(e^x - e^{-x})}{(e^x + e^{-x})}$	$f'(x) = 1 - f(x)^2$	$(-1, 1)$	C^∞
SQNL[10]		$f(x) = \begin{cases} 1 & : x > 2.0 \\ x - \frac{x^2}{4} & : 0 \leq x \leq 2.0 \\ x + \frac{x^2}{4} & : -2.0 \leq x < 0 \\ -1 & : x < -2.0 \end{cases}$	$f'(x) = 1 \mp \frac{x}{2}$	$(-1, 1)$	C^2
ArcTan		$f(x) = \tan^{-1}(x)$	$f'(x) = \frac{1}{x^2+1}$	$\left(-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right)$	C^∞
ArSinH		$f(x) = \sinh^{-1}(x) = \ln\left(x + \sqrt{x^2+1}\right)$	$f'(x) = \frac{1}{\sqrt{x^2+1}}$	$(-\infty, \infty)$	C^∞
ElliotSig[11][12] Softsign[13][14]		$f(x) = \frac{x}{1+\lvert x\rvert}$	$f'(x) = \frac{1}{(1+\lvert x\rvert)^2}$	$(-1, 1)$	C^1
Inverse square root unit (ISRU)[15]		$f(x) = \frac{x}{\sqrt{1+\alpha x^2}}$	$f'(x) = \left(\frac{1}{\sqrt{1+\alpha x^2}}\right)^3$	$\left(-\frac{1}{\sqrt{\alpha}}, \frac{1}{\sqrt{\alpha}}\right)$	C^∞
Inverse square root linear unit (ISRLU)[15]		$f(x) = \begin{cases} \frac{x}{\sqrt{1+\alpha x^2}} & \text{for } x < 0 \\ x & \text{for } x \geq 0 \end{cases}$	$f'(x) = \begin{cases} \left(\frac{1}{\sqrt{1+\alpha x^2}}\right)^3 & \text{for } x < 0 \\ 1 & \text{for } x \geq 0 \end{cases}$	$\left(-\frac{1}{\sqrt{\alpha}}, \infty\right)$	C^2
Rectified linear unit (ReLU)[16]		$f(x) = \begin{cases} 0 & \text{for } x \leq 0 \\ x & \text{for } x > 0 \end{cases}$	$f'(x) = \begin{cases} 0 & \text{for } x \leq 0 \\ 1 & \text{for } x > 0 \end{cases}$	$[0, \infty)$	C^0
Bipolar rectified linear unit (BReLU)[17]		$f(x_i) = \begin{cases} ReLU(x_i) & \text{if } i \bmod 2 = 0 \\ -ReLU(-x_i) & \text{if } i \bmod 2 \neq 0 \end{cases}$	$f'(x_i) = \begin{cases} ReLU'(x_i) & \text{if } i \bmod 2 = 0 \\ ReLU'(-x_i) & \text{if } i \bmod 2 \neq 0 \end{cases}$	$(-\infty, \infty)$	C^0

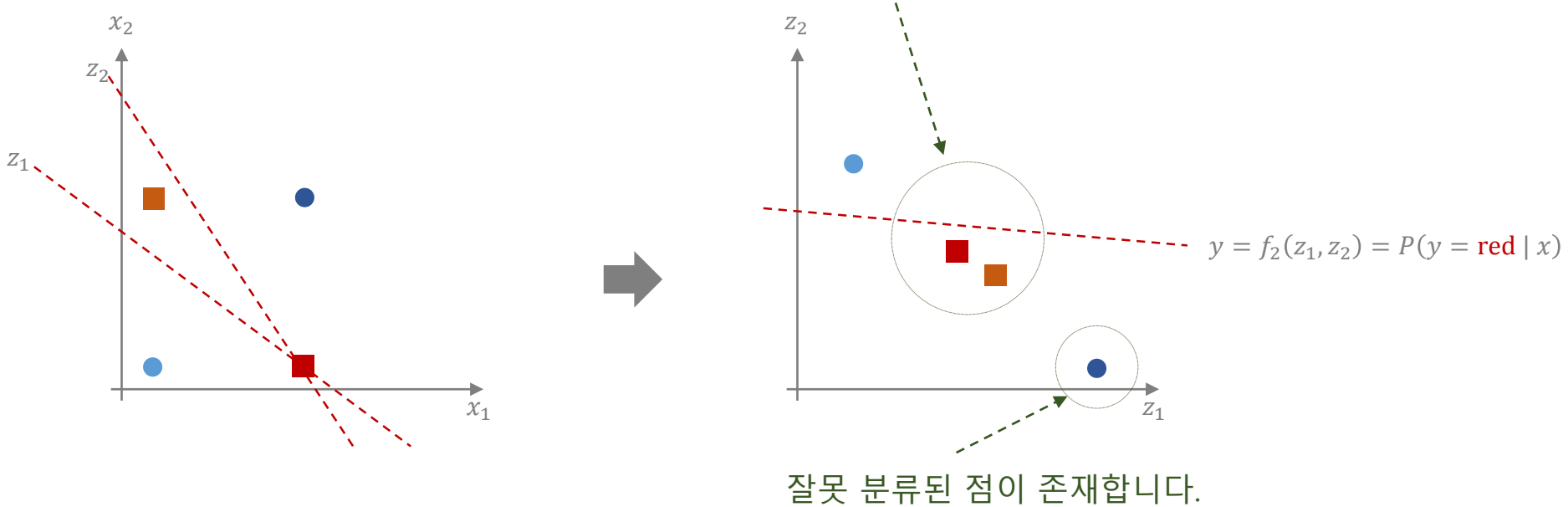
더 많은 활성함수는 위키피디아를 참고하세요

https://en.wikipedia.org/wiki/Activation_function

Training

$z = f_1(A_1 x + b_1)$

$\hat{y} = f_2(A_2 z + b_2) = f_2(A_2 f_1(A_1 x + b_1) + b_2)$

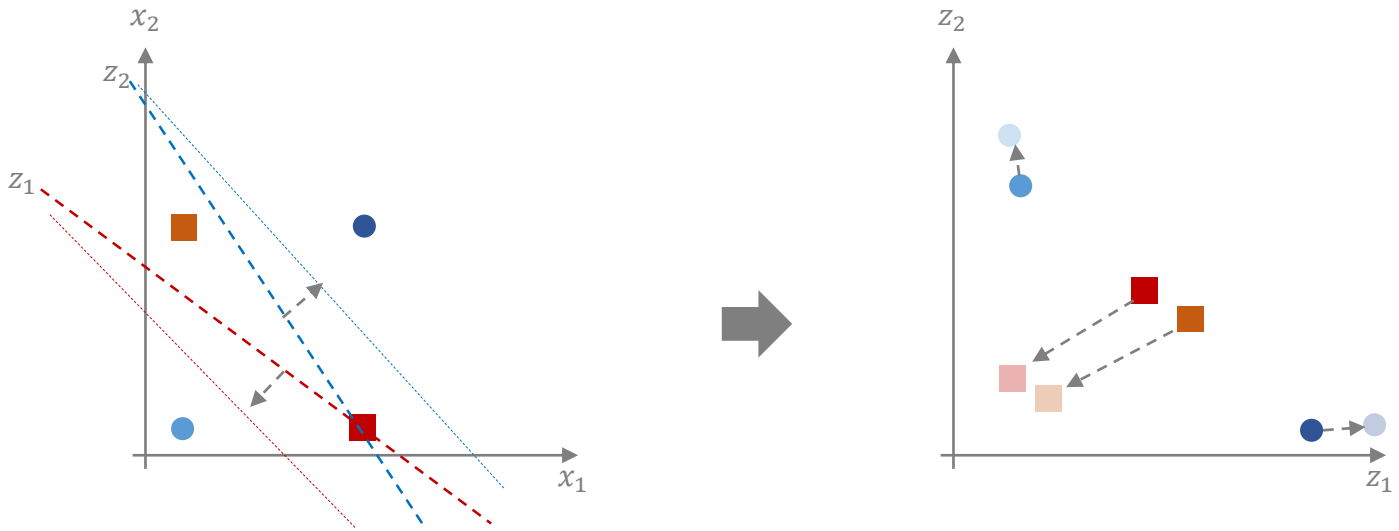


Training

$z = f_1(\boldsymbol{A_1}x + \boldsymbol{b_1})$

$\hat{y} = f_2(A_2 z + b_2) = f_2(A_2 f_1(A_1 x + b_1) + b_2)$

각 점의 z 좌표가 수정되도록 $\boldsymbol{A_1}, \boldsymbol{b_1}$ 을 업데이트 합니다.

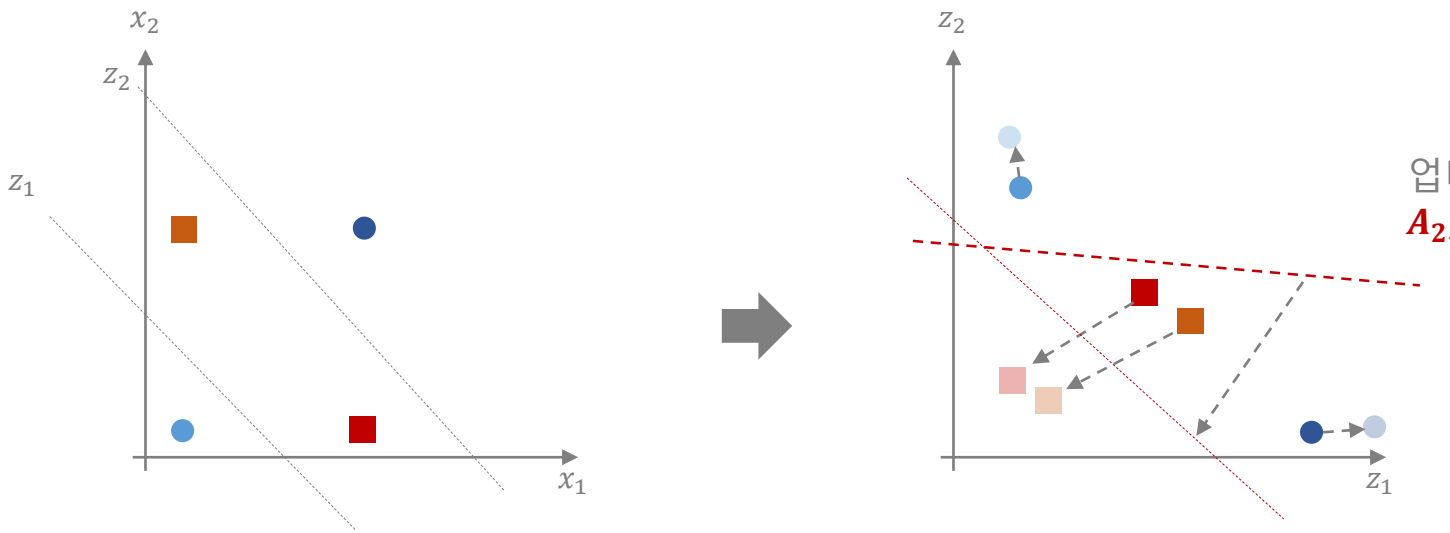


분류가 잘되도록 각 점의 z 좌표를 수정합니다
(representation 을 수정합니다)

Training

$z = f_1(A_1 x + b_1)$

$\hat{y} = f_2(\boldsymbol{A_2} z + \boldsymbol{b_2}) = f_2(A_2 f_1(A_1 x + b_1) + b_2)$



업데이트 된 z 좌표를 이용하여 분류가 잘 되도록 $\boldsymbol{A_2}, \boldsymbol{b_2}$ 를 업데이트 합니다.

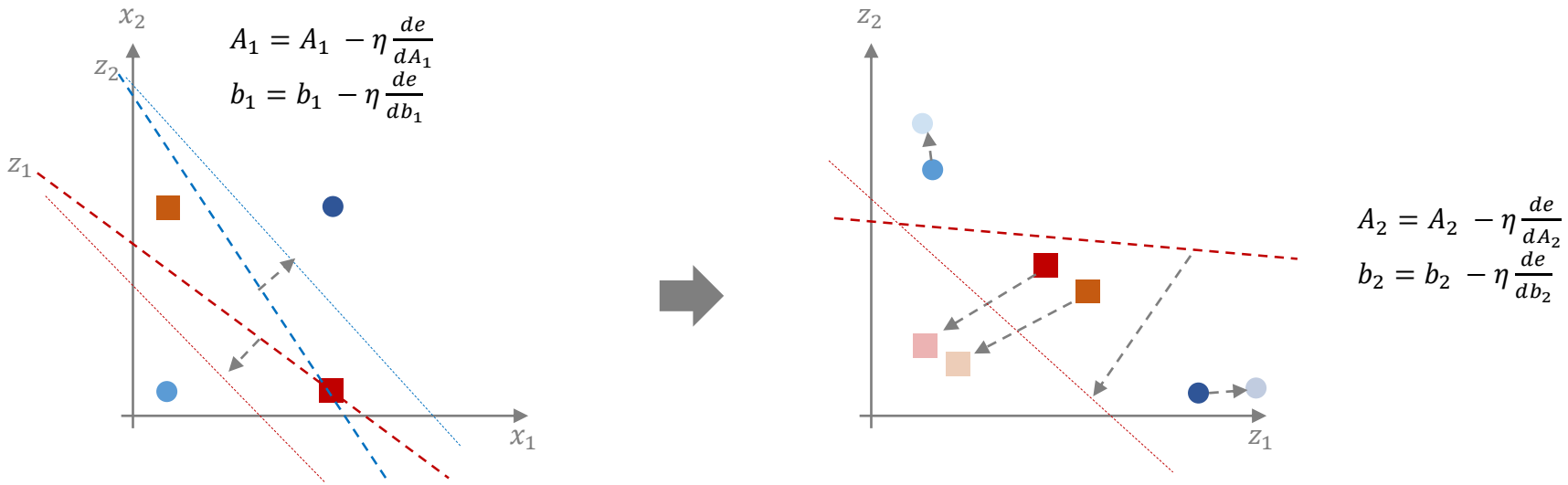
Training

$z = f_1(\boldsymbol{A_1}x + \boldsymbol{b_1})$

$\hat{y} = f_2(\boldsymbol{A_2}z + \boldsymbol{b_2}) = f_2(A_2 f_1(A_1 x + b_1) + b_2)$

(e.g.) loss $e = NLL(y, \hat{y})$

Loss 함수를 기준으로 품질이 더 좋아지는 방향으로 모든 패러매터를 동시에 학습합니다.



Training

- 수학적으로 이해하려면,
  - Chain rule 을 이용하여 gradient 를 앞쪽 레이어의 패러매터로 전달합니다.

$$e = f\big(g(x)\big), \frac{de}{dg(x)} = f'\big(g(x)\big)$$

$$\rightarrow e = f(h), \frac{de}{dh} = f'(h)$$

$$\rightarrow \frac{de}{dx} = \frac{de}{dg(x)} \times \frac{dg(x)}{x} = f'\big(g(x)\big) \times g'(x)$$

Training

$$h_1 = f_1(A_1 x + b_1)$$

$$\hat{y} = f_2(A_2 h_1 + b_2) = f_2(A_2 f_1(A_1 x + b_1) + b_2)$$

$$e = NLL(y, \hat{y}) = -\log(\hat{y})$$

$$\frac{de}{dA_2} = \frac{de}{d\hat{y}} \times \frac{d\hat{y}}{dA_2} = -\frac{1}{\hat{y}} \times h_1 f_2'(A_2 h_1 + b_2)$$

$$\frac{de}{dA_1} = \frac{de}{d\hat{y}} \times \frac{d\hat{y}}{dh_1} \times \frac{dh_1}{dA_1} = -\frac{1}{\hat{y}} \times f_2'(A_2 h_1 + b_2) A_2 \times f_1'(A_1 x + b_1) x$$

Training

$$h_1 = f_1(A_1 x + b_1)$$

$$\hat{y} = f_2(A_2 h_1 + b_2) = f_2(A_2 f_1(A_1 x + b_1) + b_2)$$

$$e = NLL(y, \hat{y}) = -\log(\hat{y})$$

$$\frac{de}{dA_2} = \frac{de}{d\hat{y}} \times \frac{d\hat{y}}{dA_2} = -\frac{1}{\hat{y}} \times h_1 f_2'(A_2 h_1 + b_2)$$

$$\frac{de}{dA_1} = \frac{de}{d\hat{y}} \times \frac{d\hat{y}}{dh_1} \times \frac{dh_1}{dA_1} = -\frac{1}{\hat{y}} \times f_2'(A_2 h_1 + b_2) A_2 \times f_1'(A_1 x + b_1) x$$

활성함수의 미분값, 사용하는 활성함수에 따라 다르게 정의

Training

$$h_1 = f_1(A_1 x + b_1)$$

$$\hat{y} = f_2(A_2 h_1 + b_2) = f_2(A_2 f_1(A_1 x + b_1) + b_2)$$

$$e = NLL(y, \hat{y}) = -\log(\hat{y})$$

- $\frac{d\text{sigmoid}(x)}{dx} = f(x) \times (1 - f(x))$
- Sigmoid 와 같은 특정 활성함수 미분값의 절대값 크기가 1 보다 작은 경우에는, 이 값의 누적값이 0 에 가까워질 수 있습니다.
- 활성함수 미분값의 누적값이 지나치게 작아 앞에 위치한 레이어에 gradient 0 에 가까운 값이 전달되는 현상을 gradient vanishing problem 이라하며, 초기에 뉴럴넷 레이어를 깊게 쌓지 못한 원인이었습니다.

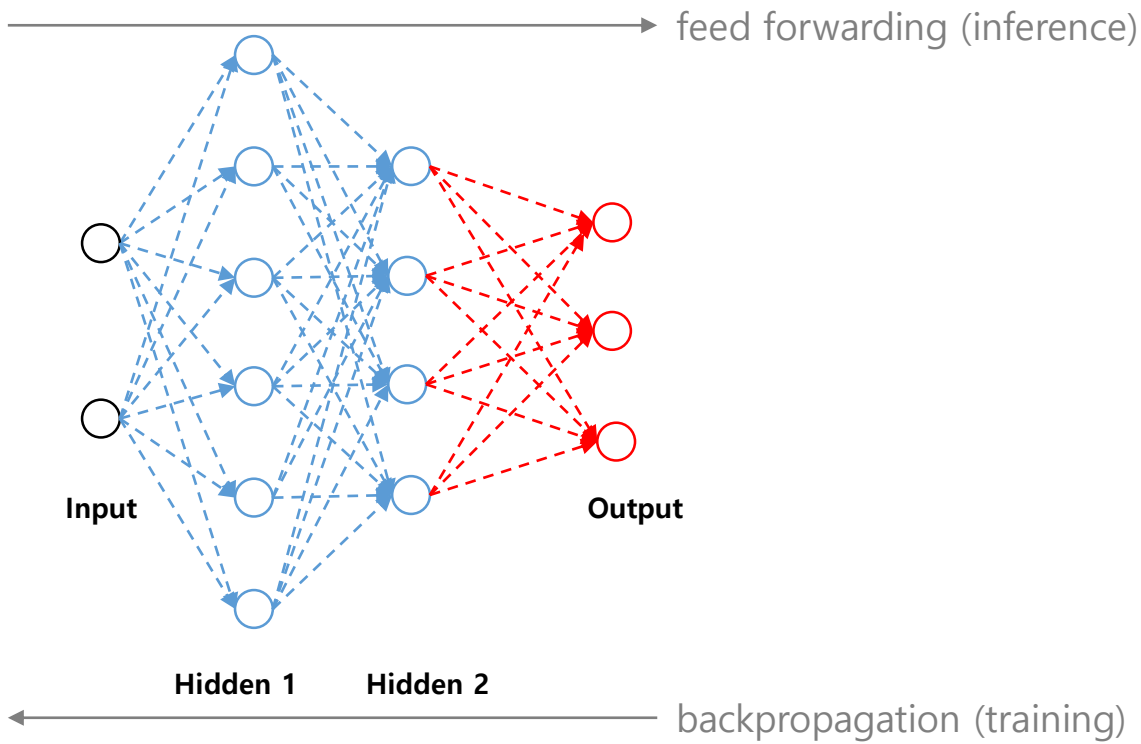
$$\frac{de}{dA_2} = \frac{de}{d\hat{y}} \times \frac{d\hat{y}}{dA_2} = -\frac{1}{\hat{y}} \times h_1 f_2'(A_2 h_1 + b_2)$$

$$\frac{de}{dA_1} = \frac{de}{d\hat{y}} \times \frac{d\hat{y}}{dh_1} \times \frac{dh_1}{dA_1} = -\frac{1}{\hat{y}} \times \underbrace{f_2'(A_2 h_1 + b_2)}_{\text{활성함수의 미분값}} A_2 \times f_1'(A_1 x + b_1) x$$

$$-\frac{1}{\hat{y}} \times \underbrace{f(A_2 h_1 + b_2)}_{\leq 1}\left(1 - \underbrace{f(A_2 h_1 + b_2)}_{\leq 1}\right) A_2 \times \underbrace{f_1(A_1 x + b_1)}_{\leq 1}\left(1 - \underbrace{f_1(A_1 x + b_1)}_{\leq 1}\right) x$$

Training

- 네트워크를 통하여 $x \rightarrow h_1 \rightarrow h_2 \rightarrow \ ... \rightarrow \hat{y}$ 를 만드는 과정을 forwarding 이라 합니다.
- Loss 로부터 패러매터 변화량을 계산하는 과정을 backpropagation 이라 합니다.



Training

- 수식으로 gradient 를 계산하면 복잡하지만, loss 로부터 모든 패러매터가 output 의 품질이 좋아지는 방향으로 동시에 학습된다는 점만 기억해도 됩니다.
- 앞서 gradient 를 계산했으니 logistic regression 을 학습한 것처럼 learning rate 를 곱하여 조금씩 패러매터를 개선합니다 (gradient descent)

Optimizers

- Gradient descent 는
  - 패러매터 θ 를
  - loss function 으로부터의 gradient 인 $-\nabla_\theta J(\theta)$
  - Learning rate η 를 곱한 값을 더하여 업데이트 합니다.
- Optimizers 는 η 와 $\nabla_\theta J(\theta)$ 를 다르게 정의하여 안정적이고 빠른 학습이 되도록 만듭니다.

$$\theta = \theta - \eta \nabla_\theta J(\theta)$$

Optimizers

- Batch style 은 모든 데이터의 gradient 의 평균을 취하여 학습합니다.
  - 데이터의 개수가 적을 때 안정적이지만, 데이터의 개수가 많으면 매우 오래걸립니다.

$$\theta = \theta - \eta \nabla_\theta J(\theta, X, Y)$$

$$\nabla_\theta J(\theta, X, Y) = \frac{1}{n} \sum \nabla_\theta J(\theta, x^{(i)}, y^{(i)})$$

Optimizers

- Stochastic Gradient Descent (SGD) 은 각 데이터 별로 업데이트를 합니다.
  - 데이터의 개수가 많고, 패턴이 반복될 때 잘 작동합니다.
  - 반복되는 데이터가 존재한다면 모든 데이터의 gradients 의 평균이 각 데이터의 gradient 와 비슷할 가능성이 높기 때문입니다.
  - 대신 (노이즈) 각 데이터에 민감하지 않도록 learning rate 는 작게 설정합니다.

$$\theta = \theta - \eta \nabla_\theta J(\theta, x^{(i)}, y^{(i)})$$

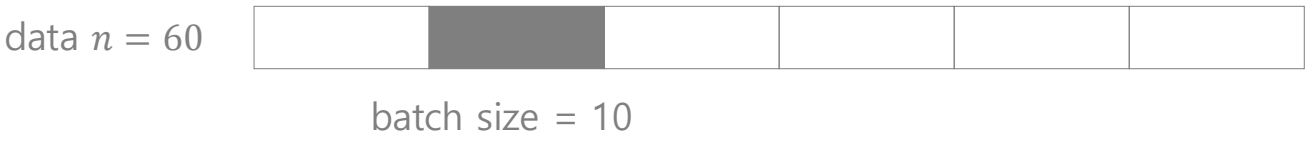
Optimizers

- Mini-batch 는 SGD 와 batch 의 중간입니다.
  - 적은 양의 데이터로 여러 번 패러매터를 학습함으로써 빠르게 모델을 학습시키고,
  - SGD 보다 일부 데이터에 덜 민감합니다.

$$\theta = \theta - \eta \nabla_\theta J(\theta, x^{(i:i+b)}, y^{(i:i+b)})$$

Optimizers

- Mini-batch 는 SGD 와 batch 의 중간입니다.



epoch 은 모든 데이터가 모델 학습에 이용되는 단위입니다.

iteration 은 패러매터가 학습되는 (mini batch 가 이용되는) 횟수입니다.

batch size 는 한 iteration 에 이용되는 데이터의 개수입니다.

$$\theta = \theta - \eta \nabla_\theta J(\theta, x^{(i:i+b)}, y^{(i:i+b)})$$

Optimizers

- Mini-batch 는 shuffling 이 필요합니다.
  - 데이터의 순서에 따라 특정한 패턴 변화가 있을 수 있습니다. 데이터의 순서를 임의로 섞은 뒤, batch size 만큼 선택하여 이러한 위험성을 줄입니다.

batch size = 10

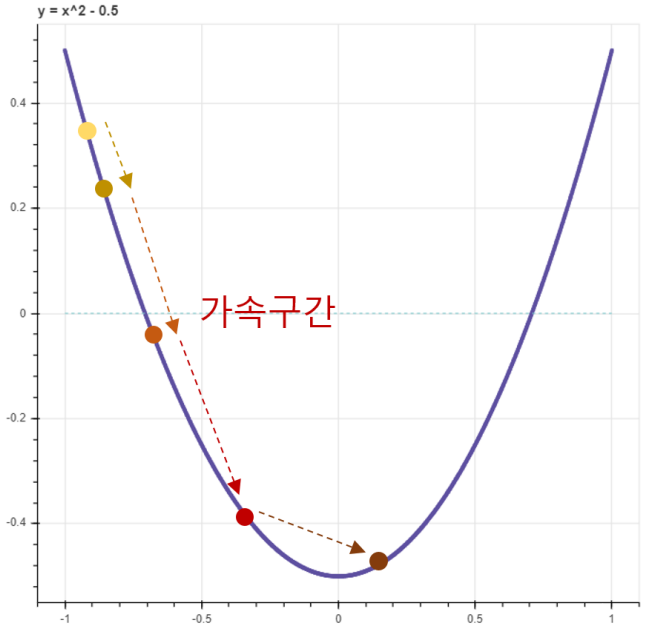
$$\theta = \theta - \eta \nabla_\theta J(\theta, x^{(i:i+b)}, y^{(i:i+b)})$$

Optimizers

- Batch, SGD, mini-batch 모두 한 번에 작은 크기의 gradient 가 계산됩니다.
  효율적인 학습을 위하여 momentum 을 이용할 수 있습니다.
- 그러나 momentum 은 loss 의 최저점을 지나칠 가능성이 있습니다.

$$\theta = \theta - v_t$$

$$v_t = \gamma v_{t-1} + \eta \nabla_\theta J(\theta)$$

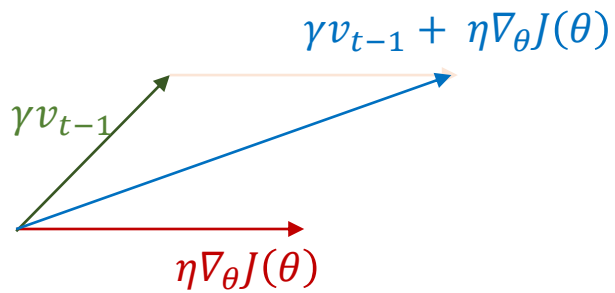


Optimizers

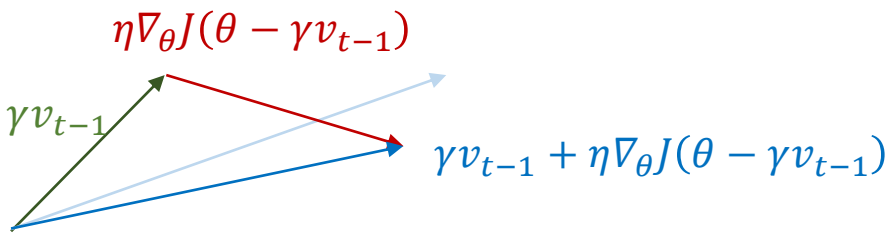
- Nesterov Accelerated Gradient (NAG) 는 momentum 에 의하여 최저점을 지나치는 경우를 방지하기 위한 optimizer 입니다.
  - Momentum 만큼 패러매터를 미리 이동한 뒤, gradient 를 계산합니다.

$$\theta = \theta - v_t$$

$$v_t = \gamma v_{t-1} + \eta \nabla_\theta J(\theta - \gamma v_{t-1})$$



gradient with momentum



NAG

Optimizers

- Adaptive Gradient (Adagrad) 는 매 변수마다 골고루 업데이트를 합니다.
  - 초기화 값에 따라 hidden weights 의 일부만 학습될 수 있습니다.
  - 시점별로 각 weights 의 변화량 $\left(\nabla_\theta J(\theta_t)\right)^2$ 을 누적하여 저장한 뒤, 변화량이 적은 부분에 더 큰 learning rate 를 부여합니다.
  - $\epsilon \cong 10^{-4}$ 은 분모가 0 인 경우를 방지합니다.

$$\theta = \theta - \frac{\eta}{\sqrt{G_t + \epsilon}} \nabla_\theta J(\theta)$$

$$G_t = G_{t-1} + \left(\nabla_\theta J(\theta_t)\right)^2$$

Optimizers

- RMSprop 는 AdaGrad 의 G_t 가 무한정 커지는 것을 방지합니다.
  - $0 < \gamma < 1$ 에 의하여 이전 G_{t-1} 의 크기를 감소함으로써, G_t 가 지속적으로 증가하는 것을 방지하고, 최근에 업데이트가 적은 부분에 집중하여 학습이 이뤄지도록 합니다.

$$\theta = \theta - \frac{\eta}{\sqrt{G_t + \epsilon}} \nabla_\theta J(\theta)$$

$$G_t = \gamma G_{t-1} + (1-\gamma)\left(\nabla_\theta J(\theta_t)\right)^2$$

Optimizers

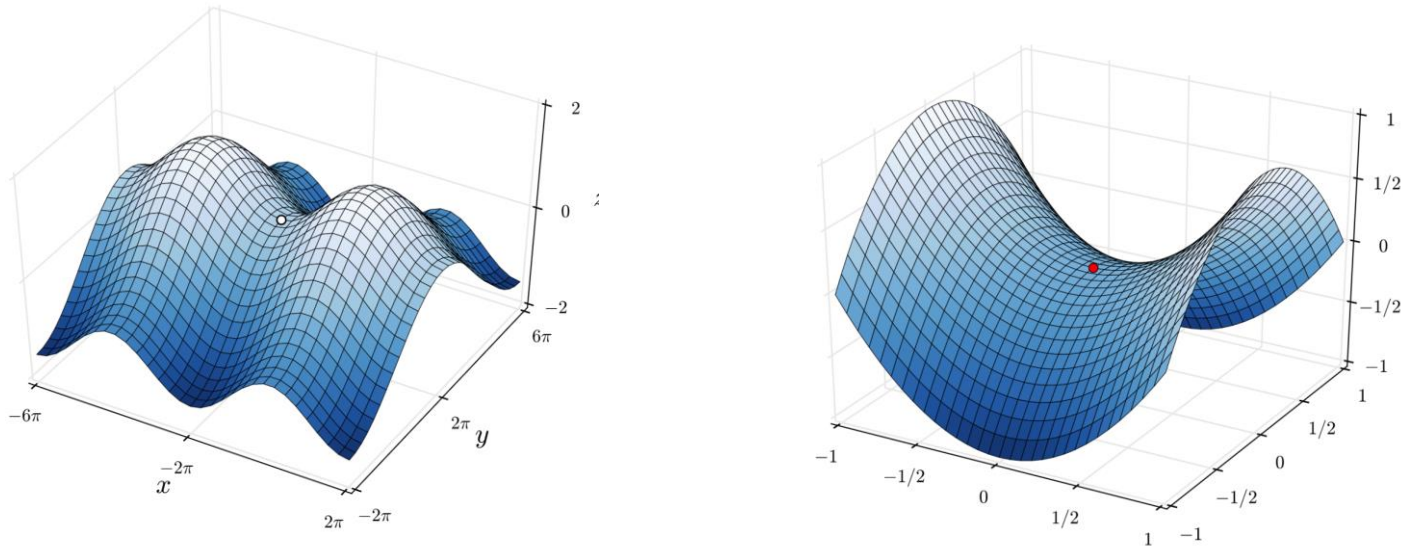
- Adam 은 RMSProp 와 momentum 을 모두 이용합니다.
  - m_t 를 이용하여 업데이트를 가속화하며, v_t 를 이용하여 업데이트가 느린 weights 에 더 큰 learning rate 를 부여합니다.

$$\theta = \theta - \frac{\eta}{\sqrt{v_t} + \epsilon} m_t$$

$$m_t = \beta_1 m_{t-1} + (1 - \beta_1) \nabla_\theta J(\theta)$$

$$v_t = \beta_2 v_{t-1} + (1 - \beta_2) \left(\nabla_\theta J(\theta)\right)^2$$

- SGD 는 saddle points* 에서 멈춰버릴 가능성이 다른 optimizers 보다 상대적으로 높다고 (하지만 매우 작은 확률로 발생) 알려져 있습니다.



[image from Wikipedia] Saddle points (안장점) 은 한 방향에서는 최소점이며 다른 방향에서는 최대점인 지점으로, 미분값이 0 이기 때문에 gradient 가 발생하지 않아 업데이트가 되지 않을 가능성이 있다.

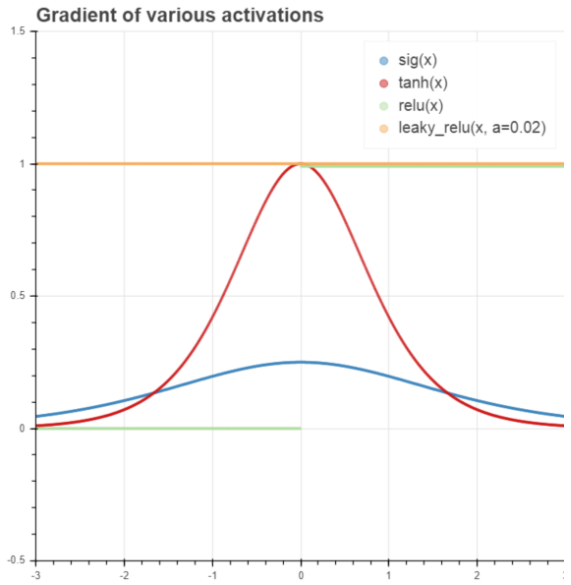
Optimizers

- Which one is best?
  - 다양한 optimizers 들이 있지만, 최근에도 SGD 를 이용하는 논문들이 지속적으로 등장하고 있습니다. 수렴까지 오래걸리지만, 하드웨어 성능으로 이를 극복합니다.
  - 데이터가 sparse 하면 features 마다 다른 속도로 학습되는 RMSprop, 학습이 빠르게 수렴하기를 원한다면 대체로 adaptive 한 방법들이 좋다고 알려져 있습니다.
- 그 외에도 다양한 optimizers 가 제안되었습니다. 더 자세히 공부하실 때는 꼭 ruder[^1] 의 블로그를 읽어보시기 바랍니다.

[^1]: https://ruder.io/optimizing-gradient-descent/

Initializers

- Weights 를 0 에 가까운 임의의 숫자로 초기화 할 수 있습니다.
  - Sigmoid, tanh 과 같은 활성함수는 0 근처에서 큰 gradient 가 발생됩니다.
  - Weights 와 input 의 내적값 $(A_j h_{j-1} + b_j)$ 이 크면 학습이 잘 이뤄지지 않습니다.



Initializers

- Xavier (Glorot) initializer 는 매 hidden layers 에서의 값들의 분포를 고르게 만드는 것이 목적입니다.
  - Hidden space 에서 한 영역에만 벡터값이 몰려있다면 학습이 잘 이뤄지지 않습니다.
  - Hidden layers 의 input, output 크기를 고려하여 weights 를 초기화 합니다.
  - Sigmoid, tanh 를 이용할 경우 효과적이라 알려져 있습니다.
  - $W \sim N\left(0, \sqrt{\frac{2}{n_{in}+n_{out}}}\right)$ or $W \sim U\left(-\sqrt{\frac{6}{n_{in}+n_{out}}}, +\sqrt{\frac{6}{n_{in}+n_{out}}}\right)$

Glorot, X., & Bengio, Y. (2010, March). Understanding the difficulty of training deep feedforward neural networks. In *Proceedings of the thirteenth international conference on artificial intelligence and statistics*.

Initializers

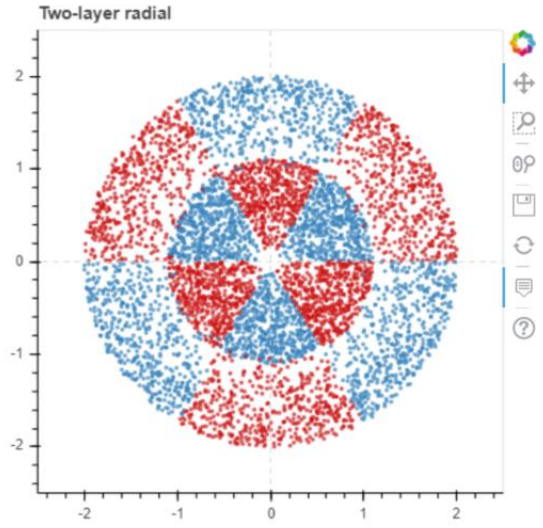
- He initializer 는 ReLU 를 이용하기 위한 초기화 방법입니다.
  - Xavier + ReLU 를 이용하면 학습이 비효율적이기 때문에 이를 보완하기 위해 더 큰 분산으로 random numbers 를 생성합니다.
  - $W \sim N\left(0, \sqrt{\frac{2}{n_{in}}}\right)$ or $W \sim U\left(-\sqrt{\frac{6}{n_{in}}}, +\sqrt{\frac{6}{n_{in}}}\right)$

He, K., Zhang, X., Ren, S., & Sun, J. (2015). Delving deep into rectifiers: Surpassing human-level performance on imagenet classification. In Proceedings of the IEEE international conference on computer vision.

- 최근의 뉴럴네트워크 패키지들은 다양한 activation functions, optimizers, initializers 를 제공합니다. 각각의 원리까지 자세히 알아야 하는 것은 아니지만, 제안 배경과 목적을 알수록 효율적인 모델 학습이 가능합니다.

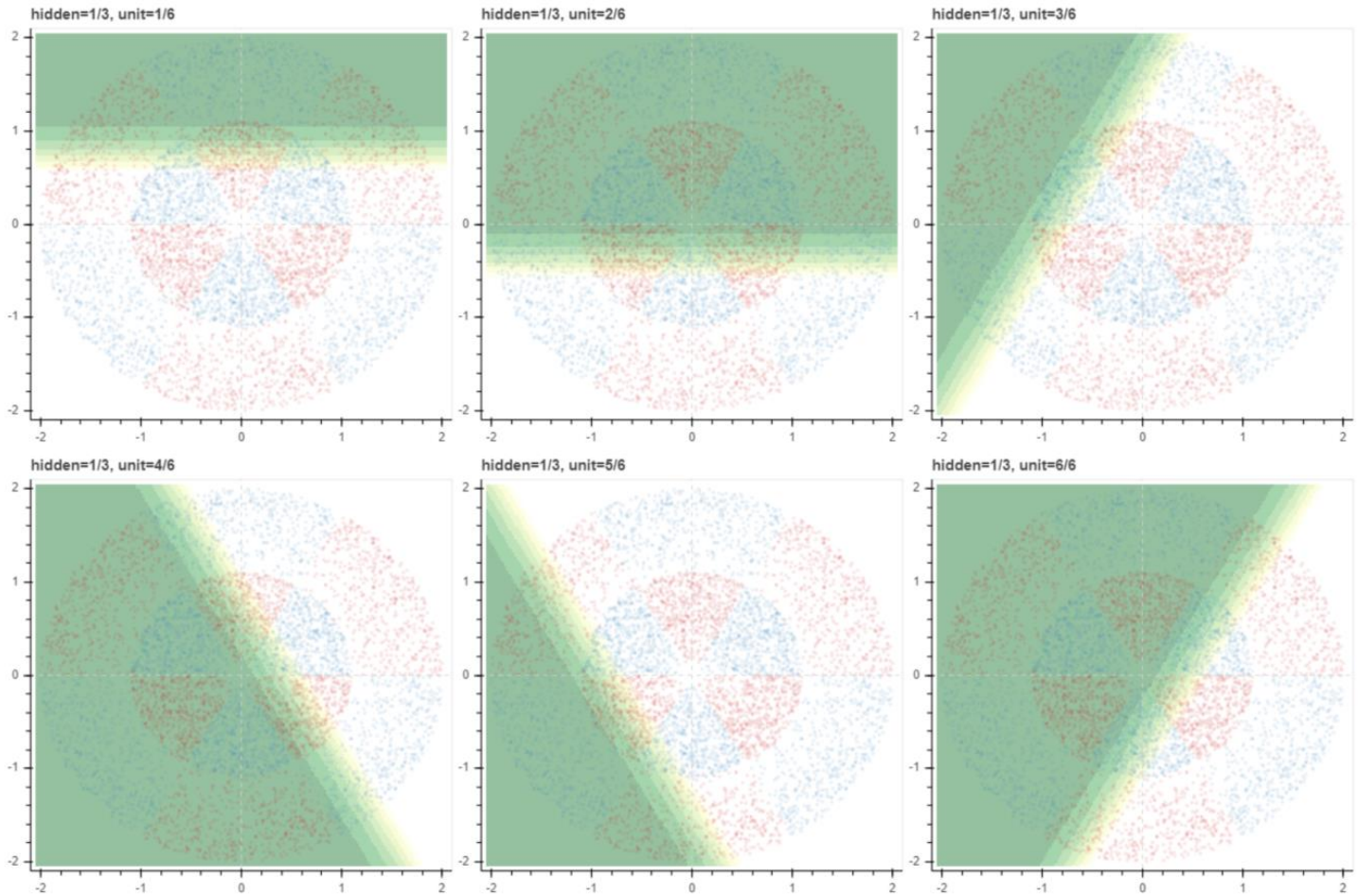
Demo: two layers radial dataset, h=(6,6)

- 2 개의 클래스로 구성된 2 층의 방사형 데이터입니다.
  - 이를 구분하기 위한 2 layers feed forward 모델을 학습해 봅니다.



Demo: two layers radial dataset, h=(6,6)

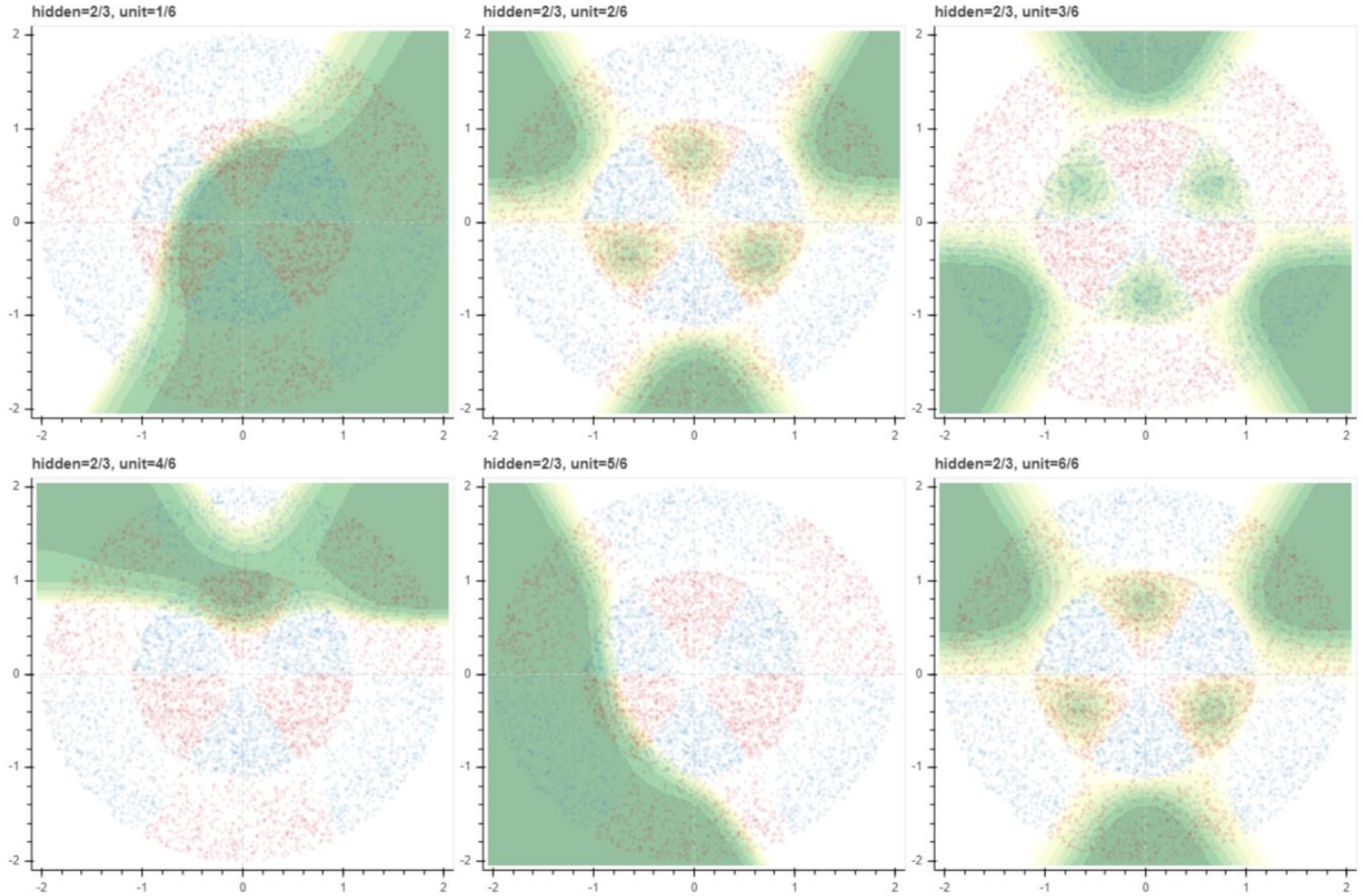
- 층을 나누기 위한 방식으로 첫번째 hidden layer 를 학습합니다.



1st hidden, 6 units

Demo: two layers radial dataset, h=(6,6)

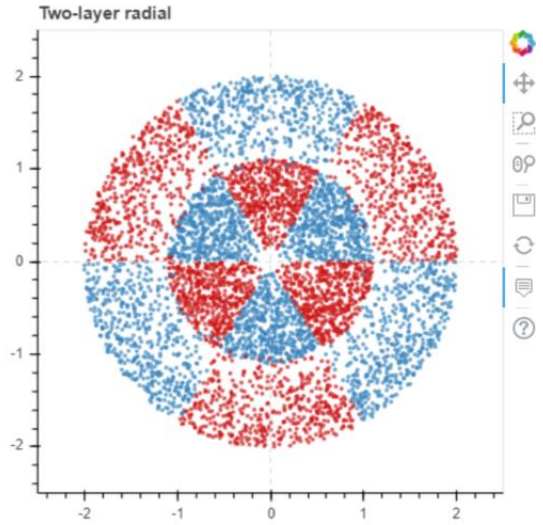
- 두 개의 hidden layers + tanh 만으로도 비선형의 공간을 학습할 수 있습니다.

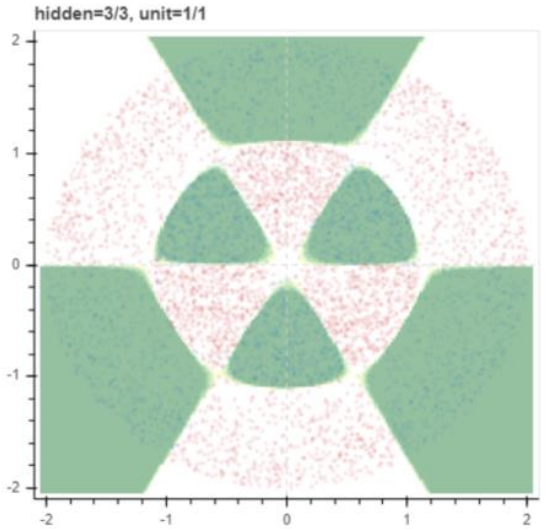


2nd hidden, 6 units

Demo: two layers radial dataset, h=(6,6)

- 방사형으로 퍼지는 데이터라 hidden units 만 충분하면 쉽게 클래스를 구분할 수 있습니다.

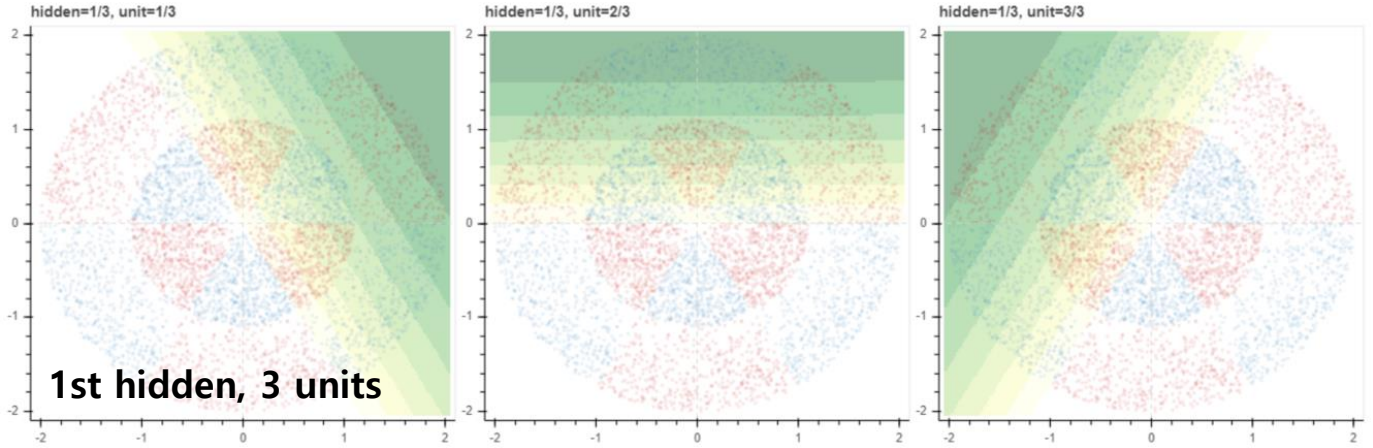


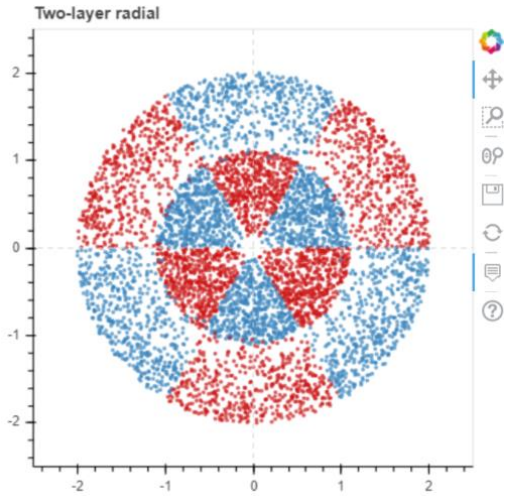


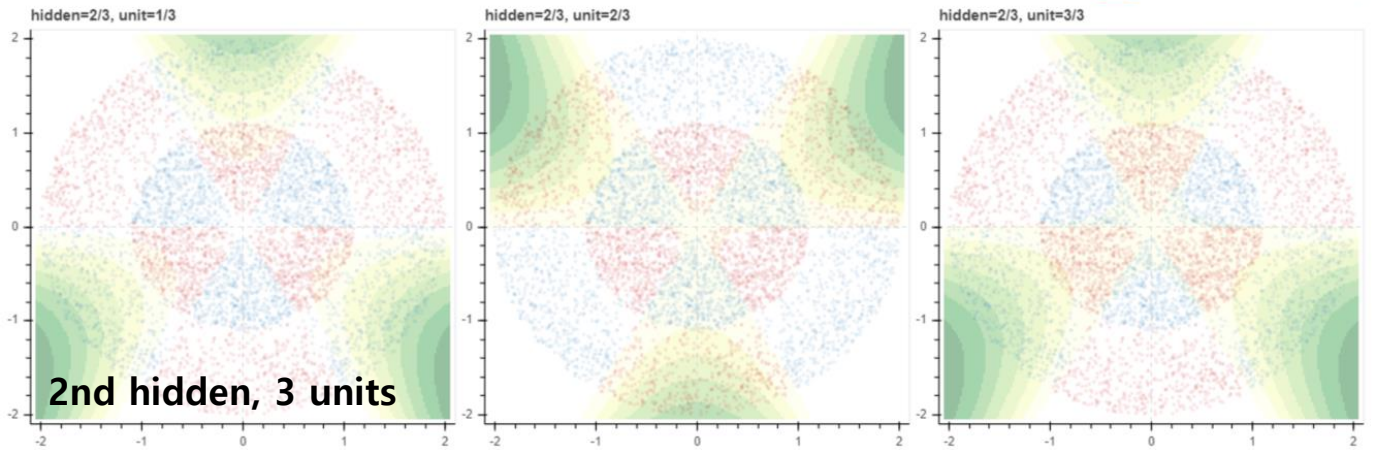
$\boldsymbol{P(y = \text{blue}|x)}$

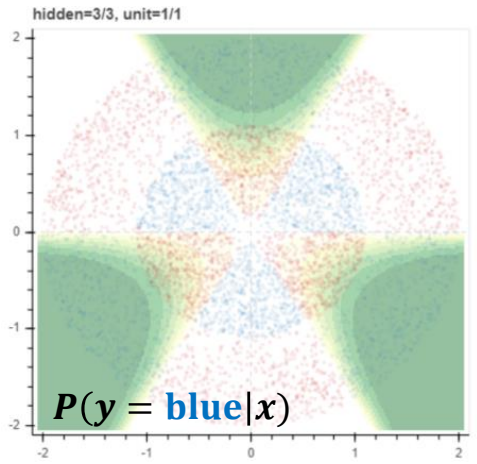
Demo: two layers radial dataset, h=(3,3)

- Hidden units 이 부족하면 복잡한 공간을 제대로 이해하지 못합니다.





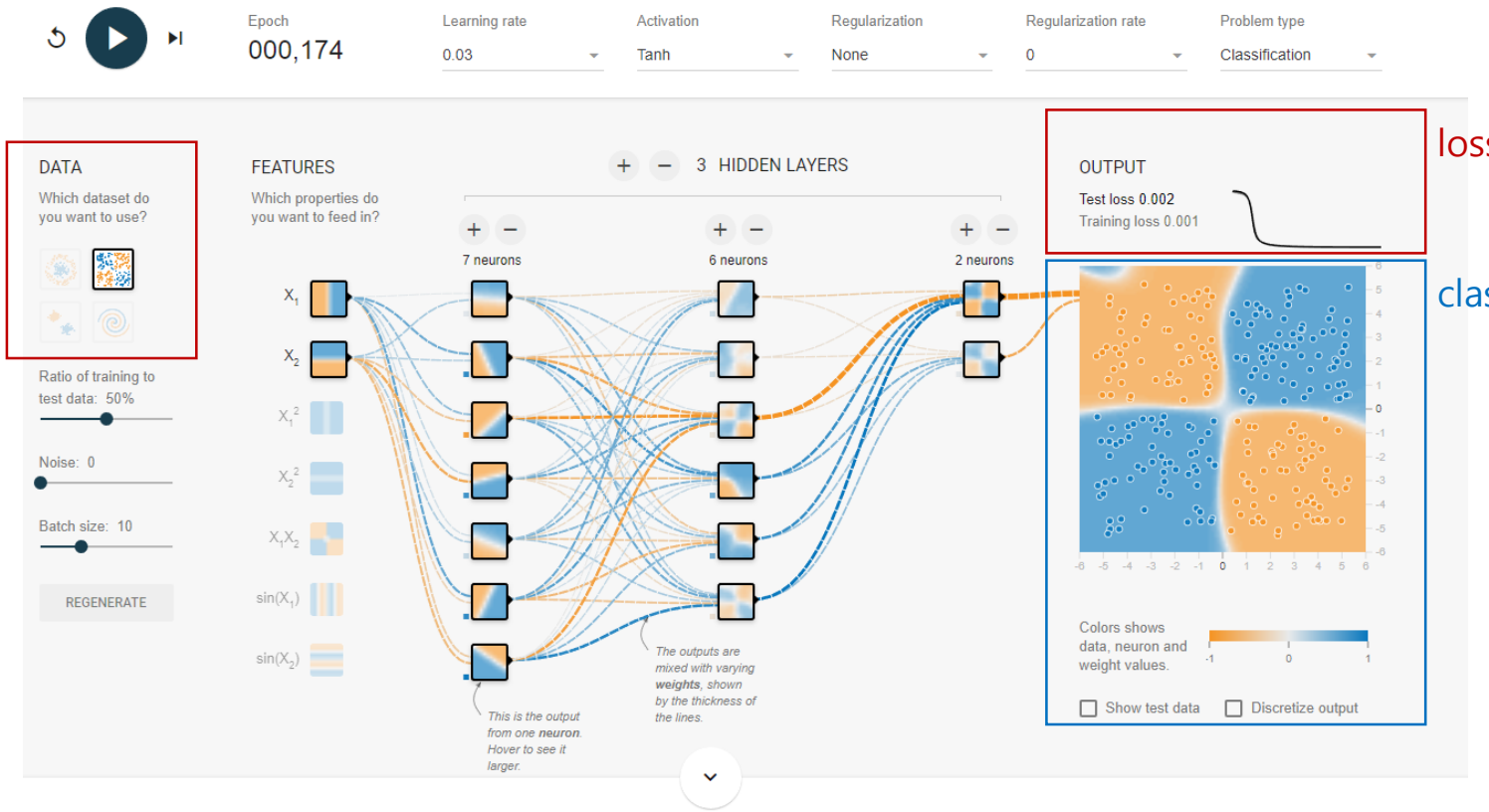




Demo

- http://playground.tensorflow.org/ 에서 neural network 의 hidden layer 에 의해서 데이터 공간이 어떻게 변하는지 살펴볼 수 있습니다.

Select training data

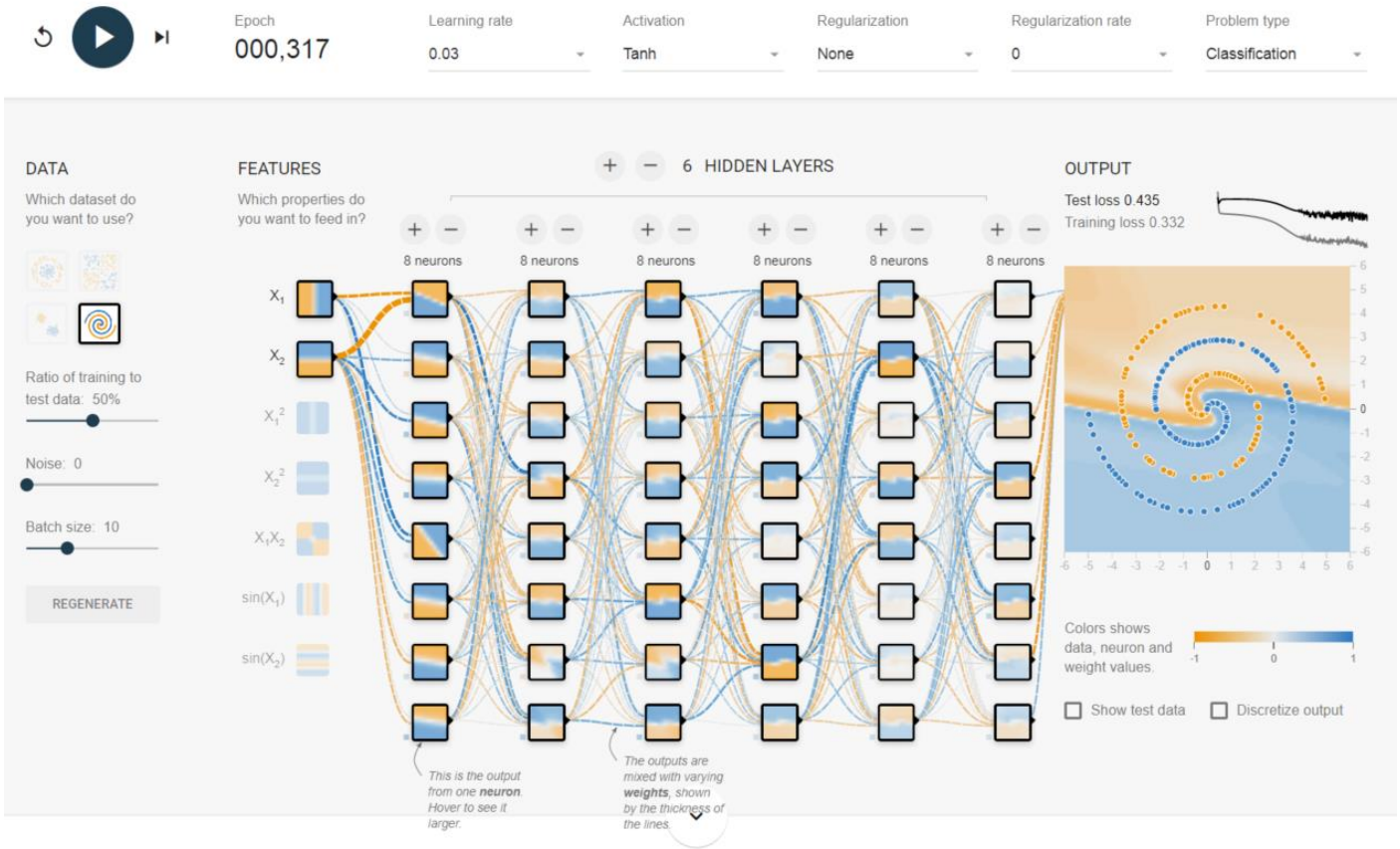


loss over time

classification score map

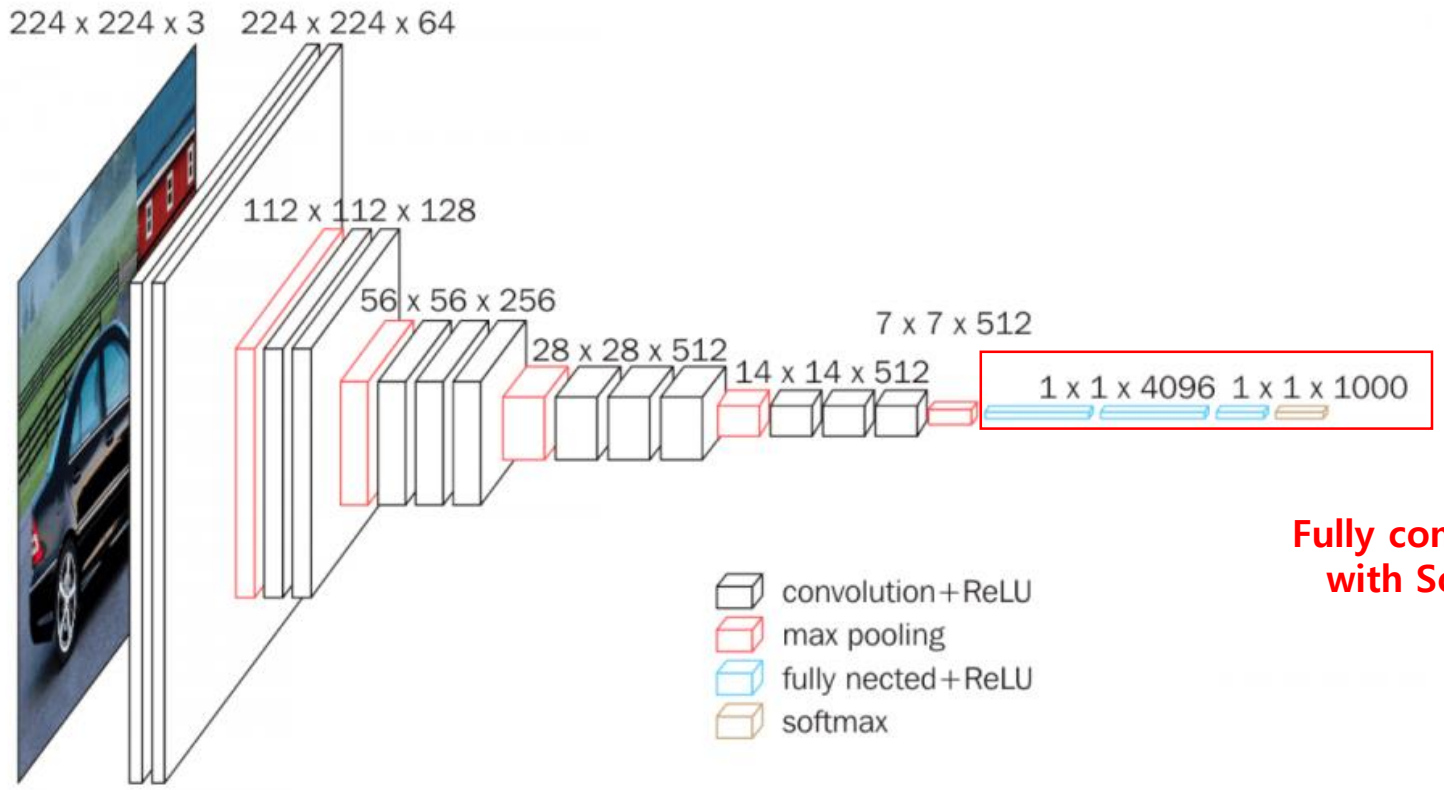
Demo

- 뉴럴 네트워크에 적합한 데이터 + 세팅이 있습니다.
  - 방향을 기준으로 representation 을 학습하므로 spiral 데이터는 학습하기 어렵습니다.



Feed-forward Neural Network

- VGG16 같은 딥러닝 모델도 마지막 layer 는 Softmax regression 입니다. 이미지처럼 복잡한 데이터를 linear separable 한 representation 으로 변형합니다.



Fully connected network with Softmax output

https://neurohive.io/en/popular-networks/vgg16/

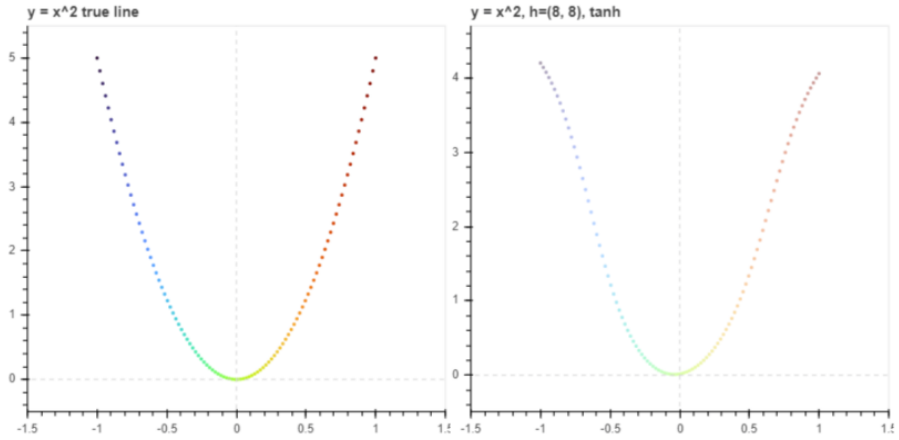
Feed-forward for Regression

- 분류 문제를 위해서 마지막 hidden output 를 이용하여 softmax 를 수행합니다.
  - $\hat{y} = f_l\left(f_{l-1}(\dots f_1(x))\right) = f_l(h_{l-1})$

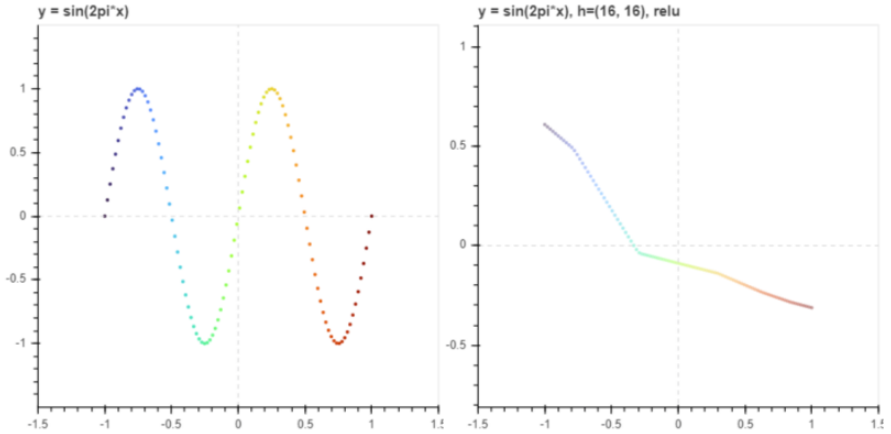
- 회귀 문제는 h_{l-1} 를 input 으로 선형회귀모델을 이용할 수 있습니다.
  - $\hat{y} = f_{l-1}\left(\dots f_1(x)\right)^T \beta = (h_{l-1})^T \beta$
  - 분류 문제는 각 클래스의 데이터들이 비슷한 공간에 모여있도록 h_{l-1} 를 학습하면 되지만, 회귀 문제는 h_{l-1} 와 β 간의 선형 관계까지 학습해야 합니다.

Feed-forward for Regression

- 분류 문제는 각 클래스의 데이터들이 비슷한 공간에 모여있도록 h_{l-1} 를 학습하면 되지만, 회귀 문제는 h_{l-1} 와 β 간의 선형 관계까지 학습해야 합니다.



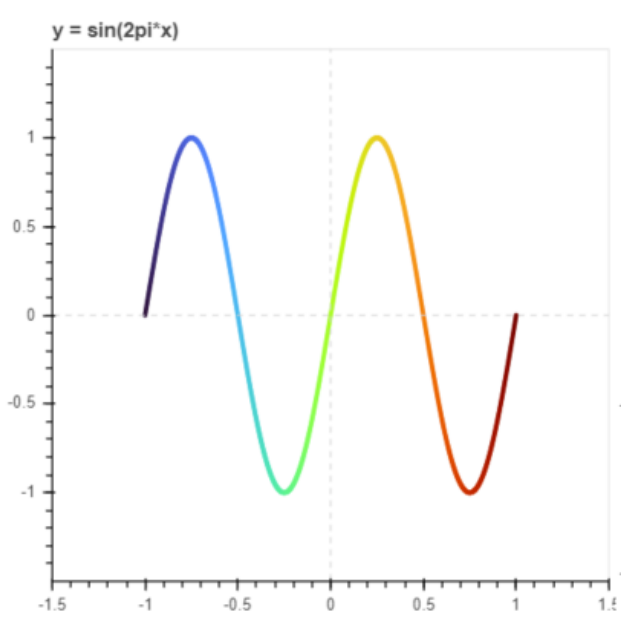
$n = 100$, $y = x^2$ 데이터에 대한
h=(8,8) feed forward network 학습 결과



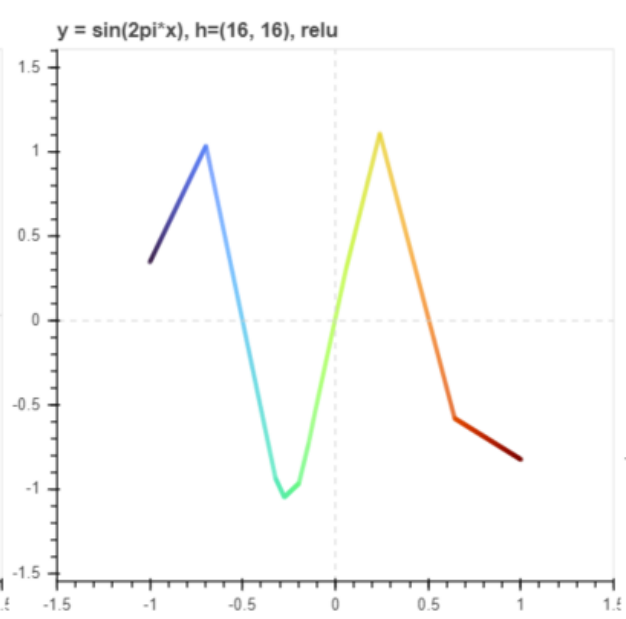
$n = 100$, $y = \sin(2\pi x)$ 데이터에 대한
h=(16,16) feed forward network 학습 결과

Feed-forward for Regression

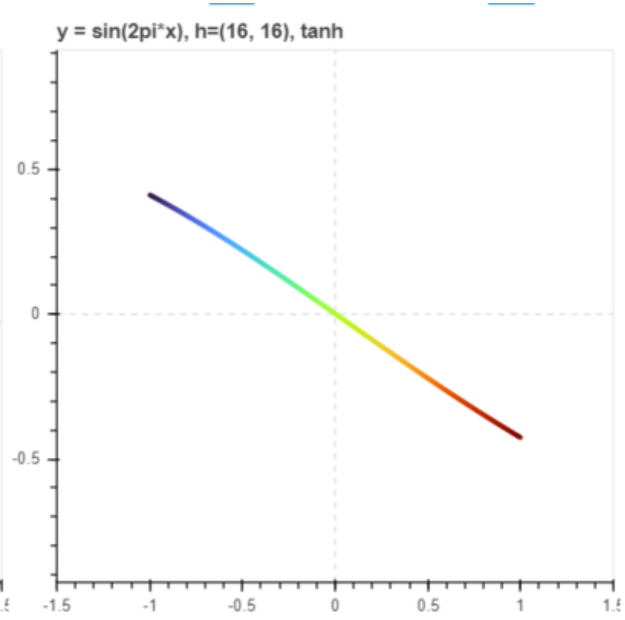
- 대체로 데이터가 많을수록 (패턴이 반복될수록) 학습이 잘 이뤄집니다.
- 활성함수, 초기화 결과에 따라 학습이 잘 이뤄지지 않기도 합니다.



$n = 1000,\ y = \sin(2\pi x)$ 데이터



$h = (16, 16)$ + ReLU 학습 결과



$h = (16, 16)$ + tanh 학습 결과