Deep Learning: Foundations and Concepts 2024

Section: 9.3.2 ~ 9.4

2024/6/27 Daiki Yoshikawa

目次

- 9.3 Learning Curves
  - 9.3.2 Double descent
- 9.4 Parameter Sharing
  - 9.4.1 Soft weight sharing

9.3.2 Double descent

9.3.2 Double descent

パラメータ数に対する従来の解釈

- モデルのパラメータ数を増やすと

    i. 表現力が向上し、検証エラーが減少(低バイアス)

    ii. さらに増やすと過学習し、検証エラーが増加(高バリアンス)

  ⇒ **古典的な統計学的学習理論**

    - パラメータ数はデータセットの大きさに応じて制限
    - 非常に大きなモデルは性能が低い

9.3.2 Double descent

DNNの実際の振る舞い

- 訓練データに完全に適合するのに必要なパラメータ数を超えても、高い性能を発揮することがある (Zhang et al., 2016)

  ⇒従来の解釈と実際の振る舞いが矛盾？

9.3.2 Double descent

二重降下 (Double Descent, Belkin et al., 2019)

- 学習曲線,モデルの複雑と汎化性能の関係から矛盾は解消される

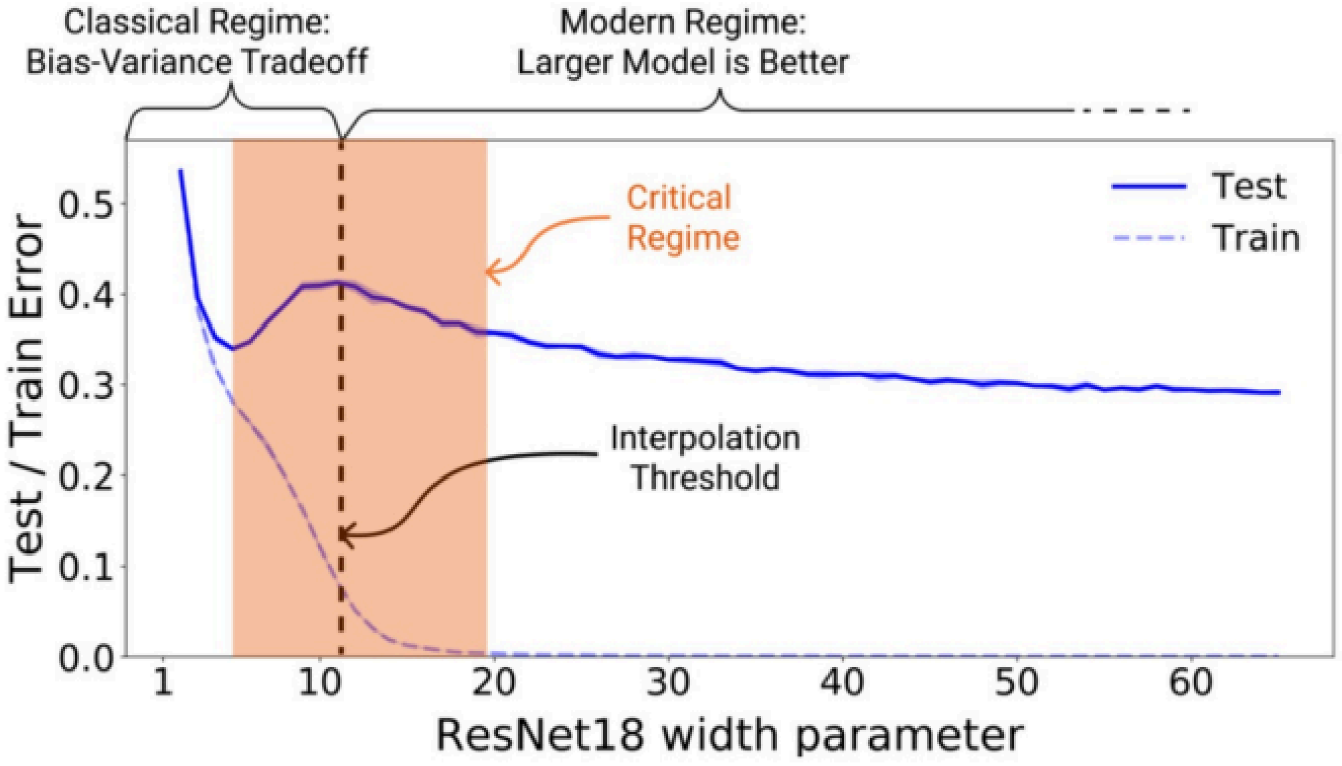
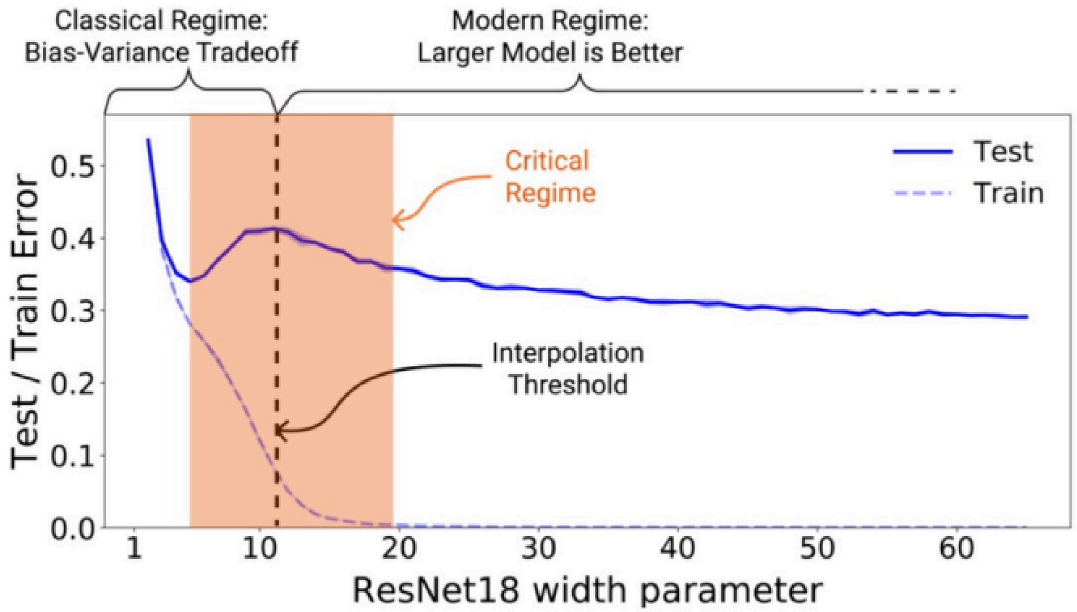


図 9.9 パラメータ数と誤差の関係

9.3.2 Double descent

二重降下 (Double Descent, Belkin et al., 2019)

- 二段階に分けることができる
  i. 小から中程度のパラメータ数
  → バイアス-バリアンストレードオフが成り立つ



する

9.3.2 Double descent

二重降下 (Double Descent, Belkin et al., 2019)

- 訓練データに完全に適合するのに十分なパラメータ数のとき二回目の降下が発生 (Belkin et al., 2019)
- **effective model complexity** (Nakkiran et al., 2019)
  - 訓練誤差ゼロを達成できる最大の訓練データ数
  - この値が訓練データ中のデータ数を超えると二重降下が発生

9.3.2 Double descent

二重降下と同様の振る舞い

- early stoppingを用いてモデルの複雑さを制御することで同様の振る舞いが観測される

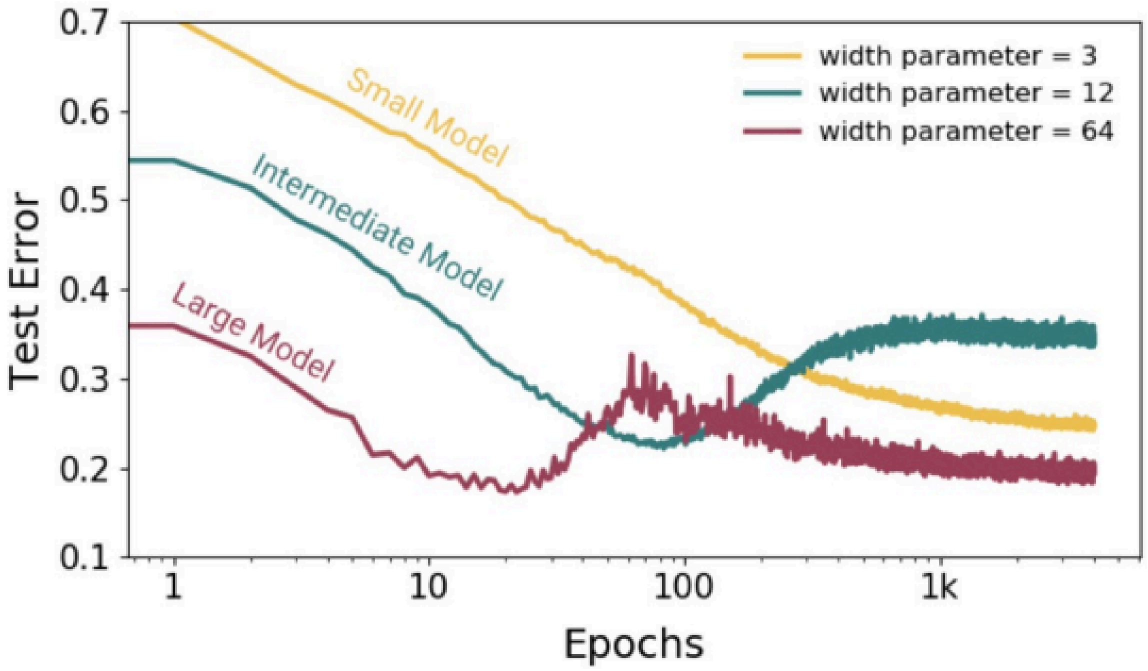


図 9.10 エポック数とテスト誤差の関係

9.3.2 Double descent

二重降下と同様の振る舞い

- $1/\lambda$ (正則化パラメータ) に対するテスト誤差の関係においても二重降下が観測される
  - λが大きいとモデルの複雑さが抑制されるため

9.3.2 Double descent

サンプル数と汎化性能

- Transformerにて埋め込み次元を増やすとモデルの複雑さが上昇
- サンプル数を増やすとテスト誤差は：(図9.11)
    - 全体的に減少
    - 臨界領域では上昇

⇒ **データ数を増やしても汎化性能が減少する可能性がある**

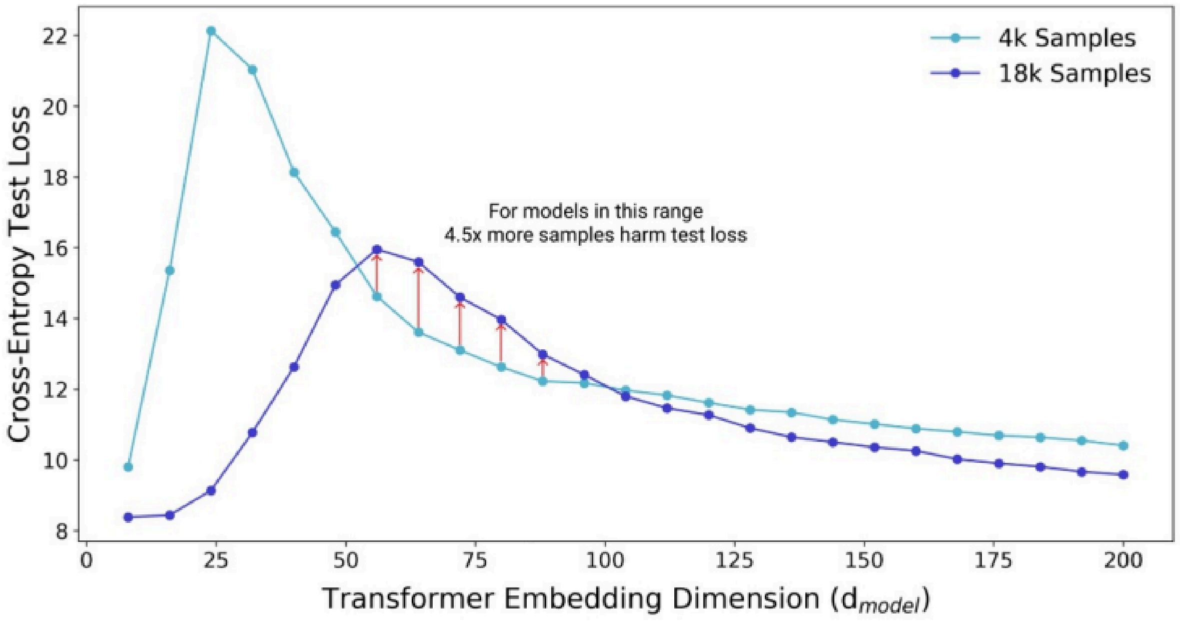


図 9.11 埋め込み次元数とテスト誤差の関係

9.4 Parameter Sharing

9.4 Parameter Sharing

パラメータ共有

- L_2正則化は重みを小さくすることで過学習を抑制
  - ネットワークの複雑さを制限する別の方法としてパラメータ共有
- 重みをグループに分け、各グループ内で重みが同じ値を取るように
  - *weight sharing, parameter sharing, parameter tying*
  - ネットワークの自由度 $<$ コネクション数
  - 帰納バイアスの導入方法
- CNNにおける畳み込みではパラメータ共有が用いられている

9.4.1 Soft weight sharing

9.4.1 Soft weight sharing

概要

- グループ内のパラメータが**近い**値を取るように正則化
- (9.1)の正則化はすべてのパラメータが0に近い値を取るようにする

$$\tilde{E}(\mathbf{w}) = E(\mathbf{w}) + \frac{\lambda}{2}\mathbf{w}^T\mathbf{w} \tag{9.1}$$

- ガウス混合モデルを用いることで複数のグループを形成し、各グループ内でパラメータが近い値を取るようにする
- 混合比率 $\{\pi_j\}$、平均 $\{\mu_j\}$、分散 $\{\sigma_j^2\}$ もデータから学習される

9.4.1 Soft weight sharing

重みの事前分布

- 重みwの事前分布をガウス混合モデルで定義

$$p(\mathbf{w}) = \prod_i \left(\sum_{j=1}^{K} \pi_j \mathcal{N}(w_i | \mu_j, \sigma_j^2) \right) \tag{9.21}$$

- この事前分布の対数の負値を正則化関数 $\Omega(w)$ とする

$$\Omega(\mathbf{w}) = -\sum_i \ln \left(\sum_{j=1}^{K} \pi_j \mathcal{N}(w_i | \mu_j, \sigma_j^2) \right) \tag{9.22}$$

9.4.1 Soft weight sharing

誤差関数

- soft weight sharing正則化項を追加した誤差関数

$$\tilde{E}(\mathbf{w}) = E(\mathbf{w}) + \lambda\Omega(\mathbf{w}) \tag{9.23}$$

- $\{w_i\}$と$\{\pi_j, \mu_j, \sigma_j\}$それぞれについて勾配降下法で最小化する
- $\{\pi_j\}$を各ガウス成分が重みを生成した事前確率として解釈すると、w_iがガウス成分jに属する事後確率は:

$$\gamma_j(w_i) = \frac{\pi_j \mathcal{N}(w_i|\mu_j, \sigma_j^2)}{\sum_k \pi_k \mathcal{N}(w_i|\mu_k, \sigma_k^2)} \tag{9.24}$$

9.4.1 Soft weight sharing

誤差関数の勾配 (重み)

- 重み w_i の勾配

$$\frac{\partial \tilde{E}}{\partial w_i} = \frac{\partial E}{\partial w_i} + \lambda \sum_j \gamma_j(w_i) \frac{w_i - \mu_j}{\sigma_j^2} \tag{9.25}$$

⇒ それぞれの重みをグループ内の平均値に引き寄せる

9.4.1 Soft weight sharing

誤差関数の勾配 (平均)

- 平均 μ_j の勾配

$$\frac{\partial \tilde{E}}{\partial \mu_j} = \lambda \sum_i \gamma_j(w_i) \frac{\mu_j - w_i}{\sigma_j^2} \tag{9.26}$$

$\Rightarrow$ μ_j をグループ内の重みの平均値へ押し出す

9.4.1 Soft weight sharing

誤差関数の勾配 (分散)

- $\{\sigma_j^2\}$が正になることを保証するために以下のように置く

$$\sigma_j^2 = \exp(\xi_j) \tag{9.27}$$

- 分散 σ_j^2 の勾配 (ξの勾配)

$$\frac{\partial \tilde{E}}{\partial \xi_j} = \frac{\lambda}{2} \sum_i \gamma_j(w_i) \left(1 - \frac{(w_i - \mu_j)^2}{\sigma_j^2} \right) \tag{9.28}$$

$\Rightarrow$ σ_j^2 をμ_j周りの重みの二乗偏差に近づける

9.4.1 Soft weight sharing

誤差関数の勾配 (混合係数)

- 混合係数 π_j の制約を、補助変数 η_j とsoftmax関数を用いて表現

$$\sum_j \pi_j = 1,\ 0 \leq \pi_j \leq 1 \tag{9.29}$$

$$\pi_j = \frac{\exp \eta_j}{\sum_{k=1}^{K} \exp \eta_k} \tag{9.30}$$

- 混合係数 π_j の勾配 (ηの勾配)

$$\frac{\partial \tilde{E}}{\partial \eta_j} = \lambda \sum_i \{\pi_j - \gamma_j(w_i)\} \tag{9.31}$$

9.4.1 Soft weight sharing

別の応用

- 教師なし生成モデルと教師あり識別モデルの組み合わせ (Lasserre, Bishop, Minka, 2006)
- ラベルなしデータが大量にあり、ラベル付きデータが少ない場合に有効
- 生成モデルの利点（ラベル無しデータの活用）と識別モデルの利点（モデルの不適合への頑健性）を併せ持つことが可能