Spring 2023

SWCON253: Machine Learning

Lecture 09
Overfitting & Regularization

Jinwoo Choi
Assistant Professor
CSE, Kyung Hee University

Disclaimer: Many slides have been borrowed from Hui Yong Kim, who may have borrowed some of them from others. Any time a slide does not show any explicit credit, I credit the slide to Hui Yong Kim.

Contents

References

- *기계학습* by 오일석 (한빛아카데미, http://cv.jbnu.ac.kr/index.php?mid=ml)
- *Intro to Machine Learning* by Dmitry Kobak @Tubingen Univ. (https://www.youtube.com/watch?v=brkS6rAKTl4&list=PL05umP7R6ij35ShKLDqccJSDntugY4FQT&index=3)

1. Overfitting & Underfitting

1. Underfitting
2. Overfitting
3. Causes of Overfitting

Underfitting

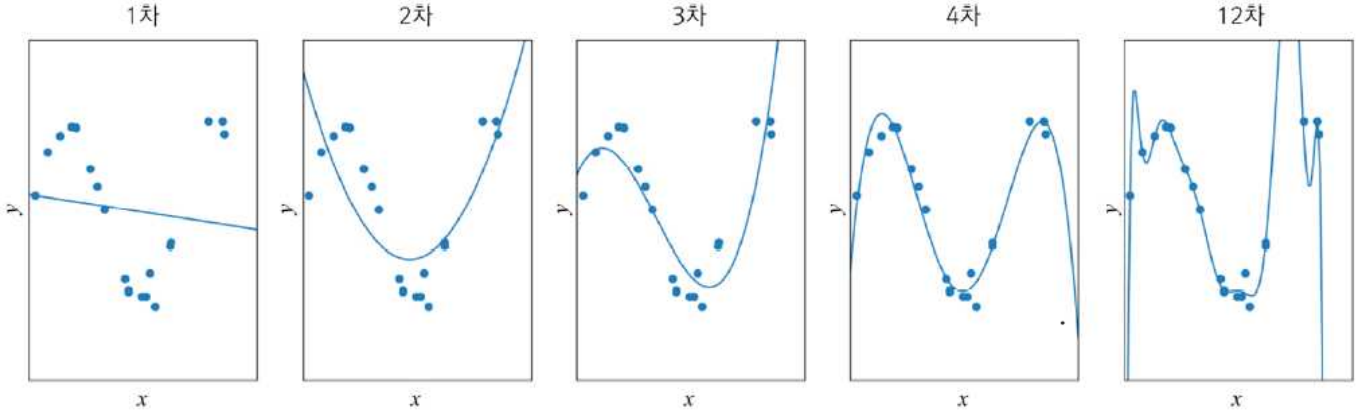
◆ Underfitting (과소적합)과 훈련 오차

- 모델의 '용량이 너무 작아' (훈련집합에 대해서 조차) 오차가 클 수밖에 없는 현상
- 예) 아래 그림의 선형(1차 다항식) 또는 2차 다항식 모델을 사용한 경우

→ = 파라미터 수가 적어서

◆ Underfitting 방지

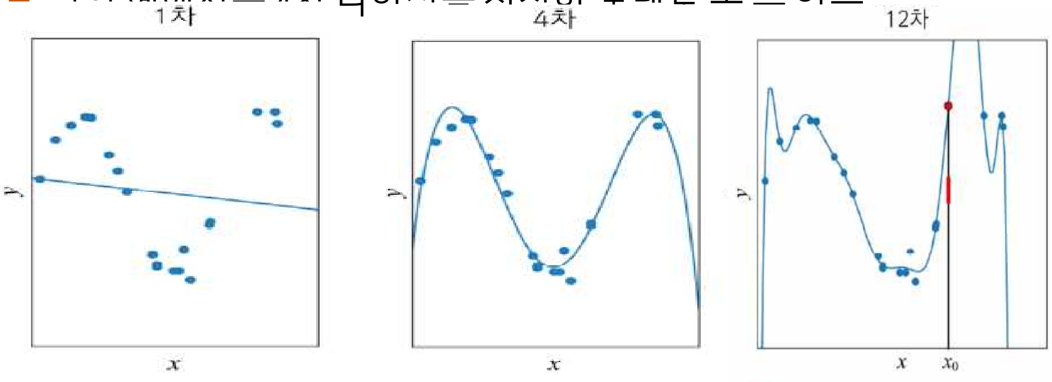
- 비선형 모델 등과 같이 **용량이 더 큰 모델**을 사용한다
- 예) 아래 그림의 3차, 4차, 12차 다항식 모델의 경우



Overfitting

- **Overfitting (과잉적합)과 예측(시험) 오차**
  - 앞의 예에서, 12차 다항식 곡선을 채택한다면 훈련집합에 대해 거의 완벽하게 근사화함
  - 하지만 '새로운' 데이터를 예측한다면 큰 문제 발생 (빨간 점)
  - 이유는 '용량이 너무 크기' 때문에 학습 과정에서 잡음까지 수용 → 과잉적합 현상

- **Overfitting 방지: 다양한 방법이 있음**
  - **적절한 용량의 모델을 선택**하는 모델 선택 작업을 수행
  - 앞의 예에서는 4차 다항식을 적절한 모델로 볼 수 있음



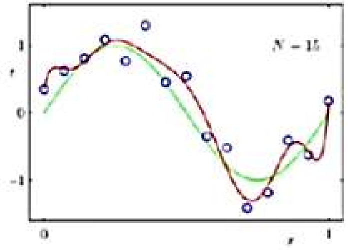
- 1차: 훈련집합과 테스트집합 모두 낮은 성능
- 12차: 훈련집합에 높은 성능, 테스트집합에는 낮은 성능 → 낮은 일반화 능력 (과잉적합)
- 4차: 훈련집합에 12차보다 낮은 성능, 테스트집합에는 높은 성능 → 높은 일반화 능력

Causes of Overfitting – *1. Data*

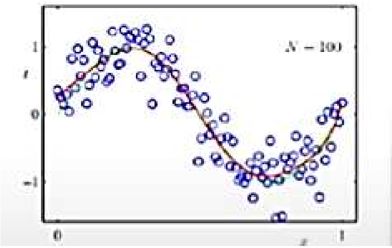
◆ Insufficient # of Training Examples

- the training set may be too sparse or cannot represent the full variety of the data

N=15



N=100



N : # of traing examples

모델 용량이 커도 데이터 많으면 OK

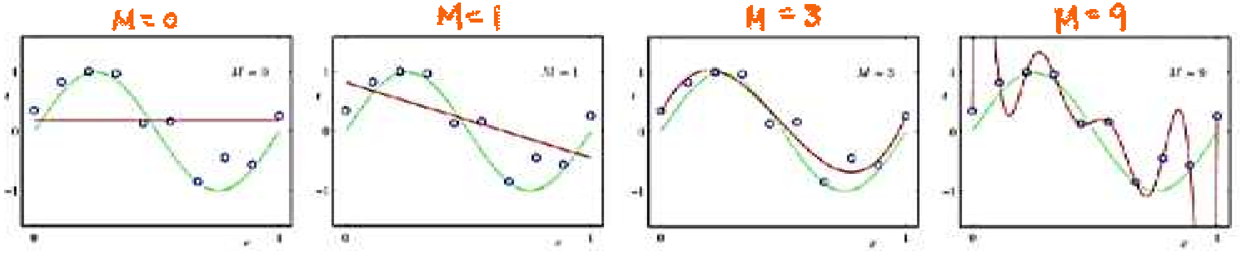
- **해결책:** **충분히 많은 Training Data** 사용

  ★ Cf.) 데이터 증대(Data Augmentation) 기법 등을 통해 기존 Training Data 증대 가능

Causes of Overfitting – 2. *Model*

- **Too Large # of Parameters (Model Capacity)**
  - [illegible]
  - the resulting parameters tend to have large values

M: the highest order of the polynomial
(M+1 : the # of parameters)



	$M=0$	$M=1$	$M=3$	$M=9$
w_0^*	0.19	0.82	0.31	0.35
w_1^*		-1.27	7.99	232.37
w_2^*			-25.43	-5321.83
w_3^*			17.37	48568.31
w_4^*				-231639.30
w_5^*				640042.26
w_6^*				-1061800.52
w_7^*				1042400.18
w_8^*				-557682.99
w_9^*				125201.43

→ Magnitudes of parameters are very large!

→ 규제
Weight Penalty를 이용해서
크기 제한

Causes of Overfitting – 2. *Model* (cont'd)

◆ 해결책 1: 검증집합(Validation Set)을 이용한 모델선택(Model Selection)

- 훈련집합과 테스트집합과 다른 별도의 **검증집합**을 준비한다.
- **모델집합**에 속한 각각의 모델에 대해 **훈련집합**으로 학습시킨다. (훈련 성능)
  - ★ 앞의 예에서는 서로 다른 차수의 다항식의 집합(서로 다른 용량)이 모델집합인 셈
- 검증집합에 대해 최고의 성능을 보인 모델을 선택한다. (검증 성능) → ***Overfitting 방지***

→ *Lecture 10 'Model Evaluation' 에서 배울 예정*

◆ 해결책 2: 규제(Regularization)

- **용량이 충분히 큰 모델 + 다양한 규제(*Regularization*) 기법을 적용**
  - ★ 예시: Weight Penalty, Drop-out…
  - ★ Overfitting을 방지하기 위한 기술을 통칭하여 '규제'라고 부르기도 함
  - ★ **Regularization Parameter들은 *Validation Set*을 이용하여 결정 가능 (model selection)**

→ *다음 슬라이드부터 배울 예정*

↳ Hyperparameter　특정 feature만으로 학습 X

2. Regularization by Weight Penalty

1. Regularization
2. Regularization by Weight Penalty
3. L1 Norm vs. L2 Norm
4. Selecting Lambda
5. Do not penalize the bias!
6. Example: Linear Regression

Regularization (규제)

- 규제는 오래 전부터 수학과 통계학에서 연구해온 주제
  - 모델 용량에 비해 데이터가 부족한 경우의 불량 문제를[ill-posed problem] 푸는 데 사용

$$\underbrace{J_{regularized}(\Theta)}_{\text{규제를 적용한 목적함수}} = \underbrace{J(\Theta)}_{\text{목적함수}} + \lambda \underbrace{R(\Theta)}_{\text{규제 항}}$$

  - 현대 기계 학습도 규제를 널리 사용함

- 『Deep Learning』 책의 규제 정의
  - "… any modification we make to a learning algorithm that is intended to *reduce its generalization error* …"
    (일반화 오류를 줄이려는 의도를 가지고 학습 알고리즘을 수정하는 방법 모두)

- 명시적 규제와 암시적 규제
  - **명시적 규제**: 가중치 감쇠나 드롭아웃처럼 목적함수나 신경망 구조를 직접 수정하는 방식
  - **암시적 규제**: 조기 멈춤, 데이터 증대, 잡음 추가, 앙상블처럼 간접적으로 영향을 미치는 방식

Regularization by Weight Penalty (가중치 감쇠)

◆ Regularized Cost Function

↳ 차수를 줄이는 것과 비슷한 효과

$$\underbrace{J_{regularized}(\Theta;\mathbb{X},\mathbb{Y})}_{\text{규제를 적용한 목적함수}} = \underbrace{J(\Theta;\mathbb{X},\mathbb{Y})}_{\text{목적함수}} + \overbrace{\lambda}^{\text{규제 강도}} \underbrace{R(\Theta)}_{\text{규제 항}}$$

● **규제항**은 훈련집합과 무관하며, 데이터 생성 과정에 내재한 **사전 지식**에 해당

◆ 규제항 $R(\Theta)$로 무엇을 사용할 것인가? → **가중치 감쇠 (가중치 벌칙)**

● 큰 가중치(Θ)에 벌칙을 가해 작은 가중치를 유지. 주로 $L2$ 놈이나 $L1$ 놈을 사용

★ L2 norm 사용: $R(\Theta) = \|\Theta\|_2^2$

θ를 원점 가까이로 당김

★ L1 norm 사용: $R(\Theta) = \|\Theta\|_1$

★ 최종해를 원점 가까이 당기는 효과 (즉 가중치를 작게 유지함)

↳ Norm을 줄임

● 가중치 감쇠는 모델의 구조적 용량을 충분히 크게 하고 모델의 **'수치적 용량'을 제한**하는 규제 기법임

↳ 다항식 차수, Layer 수, Node 수

Regularization – *L2 Norm*

Regularized Cost & Gradient

$$\underbrace{J_{regularized}(\boldsymbol{\Theta}; \mathbb{X}, \mathbb{Y})}_{\text{규제를 적용한 목적함수}} = \underbrace{J(\boldsymbol{\Theta}; \mathbb{X}, \mathbb{Y})}_{\text{목적함수}} + \lambda \underbrace{\|\boldsymbol{\Theta}\|_2^2}_{\text{규제 항}}$$

$\|\theta\|_2^2 = \theta^T\theta$

$\nabla_\theta \theta^T \theta = 2\theta$

$$\nabla J_{regularized}(\boldsymbol{\Theta}; \mathbb{X}, \mathbb{Y}) = \nabla J(\boldsymbol{\Theta}; \mathbb{X}, \mathbb{Y}) + \underline{2\lambda\boldsymbol{\Theta}}$$

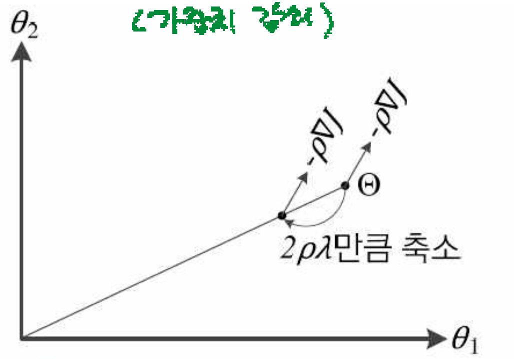
Parameter Update

$$\boldsymbol{\Theta} = \boldsymbol{\Theta} - \rho\nabla J_{regularized}(\boldsymbol{\Theta}; \mathbb{X}, \mathbb{Y})$$

$$= \boldsymbol{\Theta} - \rho(\nabla J(\boldsymbol{\Theta}; \mathbb{X}, \mathbb{Y}) + 2\lambda\boldsymbol{\Theta})$$

$$= \boxed{(1 - 2\rho\lambda)}\boldsymbol{\Theta} - \rho\nabla J(\boldsymbol{\Theta}; \mathbb{X}, \mathbb{Y})$$

"weight decay"
(가중치 감쇠)



- L2 규제는 $\boldsymbol{\Theta}$를 $2\rho\lambda$의 비율로 줄인 후 업데이트 하는 셈
  - ★ 즉, 가중치 감소 정도가 현재 가중치 크기에 비례함

Regularization – *L1 Norm*

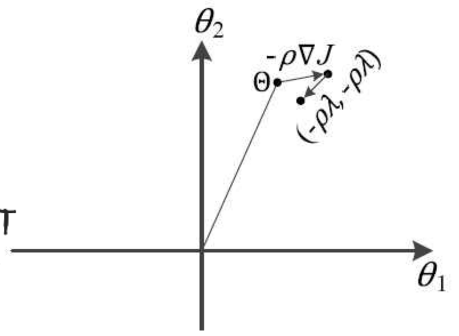
Regularized Cost & Gradient

$$\underbrace{J_{regularized}(\mathbf{\Theta};\mathbb{X},\mathbb{Y})}_{\text{규제를 적용한 목적함수}} = \underbrace{J(\mathbf{\Theta};\mathbb{X},\mathbb{Y})}_{\text{목적함수}} + \lambda\underbrace{\|\mathbf{\Theta}\|_1}_{\text{규제 항}} \rightarrow = |\theta_1| + |\theta_2| + \cdots$$

∇ ↳ 부호만 남음

$$\nabla J_{regularized}(\mathbf{\Theta};\mathbb{X},\mathbb{Y}) = \nabla J(\mathbf{\Theta};\mathbb{X},\mathbb{Y}) + \lambda \mathbf{sign}(\mathbf{\Theta}) \rightarrow \text{ex) } [-1, 1, -1, \cdots]^T$$

sign(θ) : θ의 부호 벡터
(1,-1)



(a) $\mathbf{sign}(\mathbf{\Theta}) = (1,1)^T$인 경우

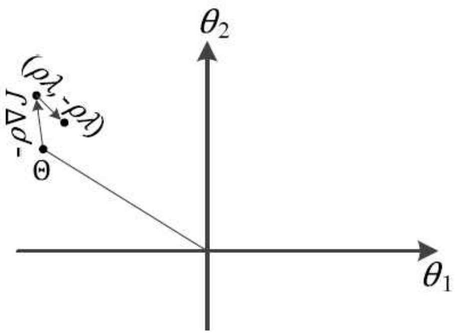
Parameter Update

$$\mathbf{\Theta} = \mathbf{\Theta} - \rho\nabla J_{regularized}(\mathbf{\Theta};\mathbb{X},\mathbb{Y})$$

$$= \mathbf{\Theta} - \rho(\nabla J(\mathbf{\Theta};\mathbb{X},\mathbb{Y}) + \lambda\mathbf{sign}(\mathbf{\Theta}))$$

$$= \mathbf{\Theta} - \rho\nabla J(\mathbf{\Theta};\mathbb{X},\mathbb{Y}) \boxed{- \rho\lambda\mathbf{sign}(\mathbf{\Theta})}$$

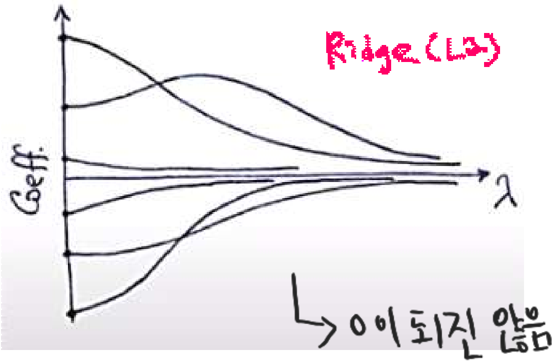
- L1 규제는 $\mathbf{\Theta}$를 $\rho\lambda$(고정값)만큼 줄인 후 업데이트 하는 셈
- L1 규제의 희소성(Sparse) 효과: 0이 되는 가중치가 많이 발생
  - ★ 선형 회귀에 적용하면 특징 선택 효과

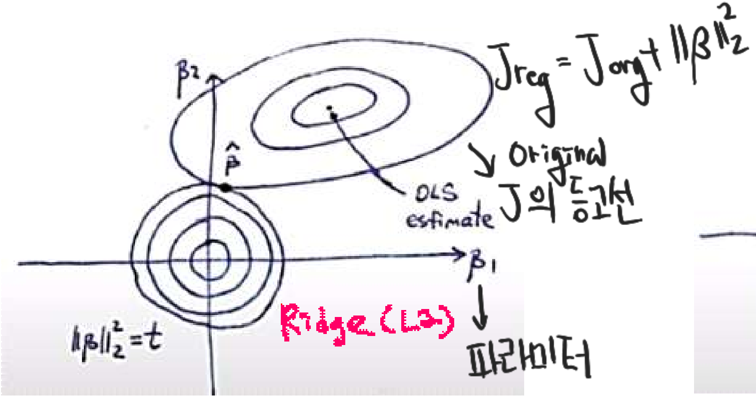


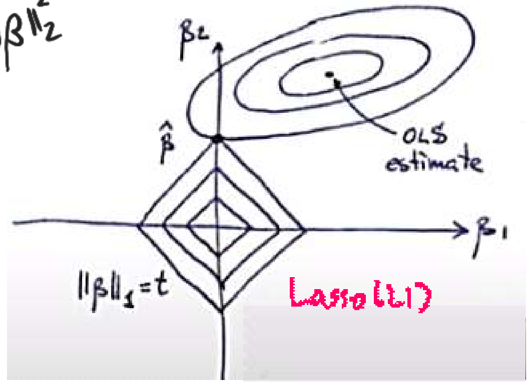
(b) $\mathbf{sign}(\mathbf{\Theta}) = (-1,1)^T$인 경우

Regularization – *L1 norm vs. L2 norm*

◆ Ridge (L2) vs. Lasso (L1) Regression

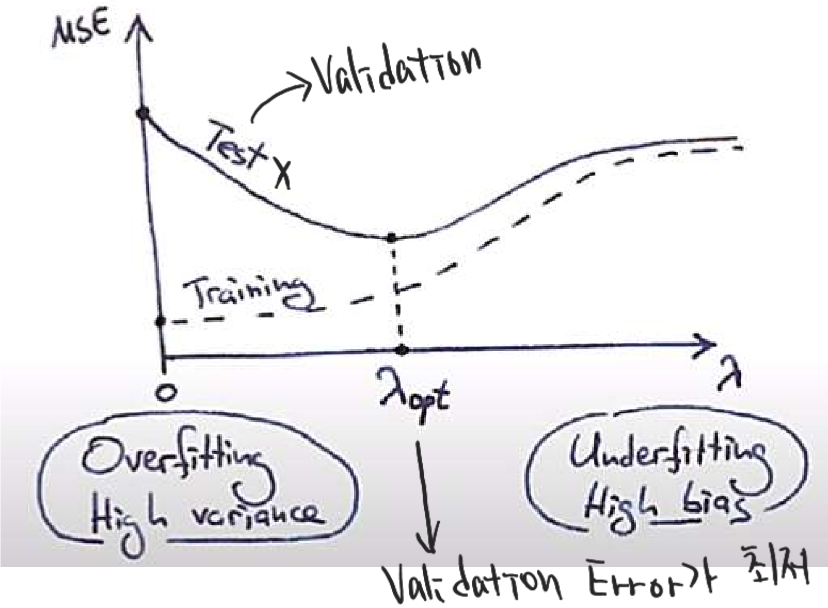






Regularization – *Selecting Lambda*

- Test Error가 가장 작게 되는 λ가 최적
  - 그러나 학습시에는 test set에 접근할 수 없으므로, validation set을 이용하여 최적의 λ를 선택함



Regularization – *Do Not Penalize Bias!*

- For Centered Dataset (when both x and y have zero mean)
  - No problem even if we have zero bias (i.e., $\beta_0 = 0$).

$$\mathcal{L} = \frac{1}{n}\|\mathbf{y} - \mathbf{X}\beta\|^2 + \lambda\|\beta\|^2$$

- For Non-centered Dataset (the general case)
  - Penalizing bias often leads to bad performance.
  - Thus we need to ***exclude the bias (β_0) from the regularization term***:

$Y = \theta^T X + \theta_0$

↳ bias를 최대한 보존

$$\mathcal{L} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left(y_i - \beta_0 - \sum_{j=1}^{p}\beta_j X_{ij}\right)^2 + \lambda\sum_{j=1}^{p}\beta_j^2.$$

0일 때는 안함

Regularization – *Example: Linear Regression*

선형 회귀에 적용

- 선형 회귀는 훈련집합 $\mathbb{X} = \{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \cdots, \mathbf{x}_n\}$, $\mathbb{Y} = \{y_1, y_2, \cdots, y_n\}$이 주어지면, 식 (5.24)를 풀어 $\mathbf{w} = (w_1, w_2, \cdots, w_d)^{\mathrm{T}}$를 구하는 문제. 이때 $\mathbf{x}_i = (x_{i1}, x_{i2}, \cdots, x_{id})^{\mathrm{T}}$

$$w_1 x_{i1} + w_2 x_{i2} \cdots + w_d x_{id} = \mathbf{x}_i^{\mathrm{T}} \mathbf{w} = y_i, \qquad i = 1,2,\cdots,n \tag{5.24}$$

- 식 (5.24)를 행렬식으로 바꿔 쓰면,

$$\mathbf{X}\mathbf{w} = \mathbf{y} \qquad \underbrace{\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}}_{n \times d} \underbrace{\begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \\ \vdots \\ w_d \end{bmatrix}}_{d \times 1} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} \tag{5.25}$$

$\nabla_x x^T x = 2x$

$\nabla_x (Xw - y)^T (Xw - y)$

$= 2X^T (Xw - y)$

- 가중치 감쇠를 적용한 목적함수

$$J_{regularized}(\mathbf{w}) = \frac{1}{2}\|\mathbf{X}\mathbf{w} - \mathbf{y}\|_2^2 + \lambda \|\mathbf{w}\|_2^2 = \frac{1}{2}(\mathbf{X}\mathbf{w} - \mathbf{y})^{\mathrm{T}}(\mathbf{X}\mathbf{w} - \mathbf{y}) + \lambda \|\mathbf{w}\|_2^2 \tag{5.27}$$

$\downarrow$

L_2 Norm

Weight Decay

Regularization – *Example: Linear Regression (cont'd)*

- 식 (5.27)을 미분하여 0으로 놓으면,

$$\frac{\partial J_{regularized}}{\partial \mathbf{w}} = \mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}\mathbf{w} - \mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{y} + 2\lambda\mathbf{w} = \mathbf{0} \;\;\Longrightarrow\;\; (\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{X} + 2\lambda\mathbf{I})\mathbf{w} = \mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{y} \qquad (5.28)$$

- 식 (5.28)을 정리하면,

$$\hat{\mathbf{w}} = (\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{X} + 2\lambda\mathbf{I})^{-1}\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{y} \qquad (5.29)$$

  - 공분산 행렬 $\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}$의 대각 요소가 2λ만큼씩 증가 → 역행렬을 곱하므로 가중치를 축소하여 원점으로 당기는 효과 ([그림 5-21])

- 예측 단계에서는.

$$y = \mathbf{x}^{\mathrm{T}}\hat{\mathbf{w}} \qquad (5.30)$$

R

예제 5-1 **리지 회귀**

훈련집합 $\mathbb{X} = \{\mathbf{x}_1 = \binom{1}{1}, \mathbf{x}_2 = \binom{2}{3}, \mathbf{x}_3 = \binom{3}{3}\}$, $\mathbb{Y} = \{y_1 = 3.0,\ y_2 = 7.0, y_3 = 8.8\}$이 주어졌다고 가정하자. 특징 벡터가 2차원이므로 d=2이고 샘플이 3개이므로 n=3이다. 훈련집합으로 설계행렬 $\mathbf{X}$와 레이블 행렬 $\mathbf{y}$를 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 3 \\ 3 & 3 \end{pmatrix}, \qquad \mathbf{y} = \begin{pmatrix} 3.0 \\ 7.0 \\ 8.8 \end{pmatrix}$$

이 값들을 식 (5.29)에 대입하여 다음과 같이 $\hat{\mathbf{w}}$을 구할 수 있다. 이때 $\lambda = 0.25$라 가정하자.

$$\hat{w} = (X^T X + 2\lambda I)^{-1} X^T Y$$

$$\hat{\mathbf{w}} = \left(\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 3 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 3 \\ 3 & 3 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0.5 & 0 \\ 0 & 0.5 \end{pmatrix} \right)^{-1} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 3 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3.0 \\ 7.0 \\ 8.8 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1.4916 \\ 1.3607 \end{pmatrix}$$

따라서 하이퍼 평면은 $y = 1.4916x_1 + 1.3607x_2$이다. 새로운 샘플로 $\mathbf{x} = (5 \quad 4)^{\mathrm{T}}$가 입력되면 식 (5.30)을 이용하여 12.9009를 예측한다.