기계학습이론 기말대비 1

Loss ~ Regularization

Hypothesis space

요소	Hypothesis space의 크기	설명
Parameter 개수	비례	
Inductive bias	반비례	
Model architecture	구조가 제한될수록 작아짐	
Prior	반비례	
Regularization	제한	|H|를 줄인다기 보다 Training을 통해 좋은 solution을 찾도록 일부 영역을 제한하는 느낌
Optimization method	제한	Method마다 Implict regularization이 달라서 Space가 일부 제한됨
Initialization	제한	탐색 가능한 영역이 달라질 수 있음

Loss

가장 먼저, **Linear regression**은 **Least square(MSE)**을 Loss로 사용한다.

- 이 경우 Loss가 **ERM을 최소화**하는 것과 동일하다.
- 이때, Loss는 **Convex**하며, **Quadratic**하다.
- Loss가 Convex & Quadratic하다는 것은 Loss=0인 지점을 찾기 쉽고, Optimization 또한 Loss=0인 지점을 찾으면 된다는 것이다.

    - W에 대해 Quadratic하다.

하지만, Linear regression은 **Linearly separable하지 않다면 Classification 할 수 없다는 문제점이 존재**한다.

- Linear regression은 그 자체로 Inductive bias가 너무 강하다.

위 문제를 해결하기 위해, 가장 먼저 사용하는 방법은 사람이 지정한 **Non-linear basis function**을 사용하는 것이다.

- Linear regression에 비해 Hypothesis space가 넓어진다.
- **Non-linear basis function을** 사용할 때의 **Loss 역시 Convex & Quadratic**하기 때문에 쉽게 Optimization이 가능하다.

하지만, **Non-linear basis function**을 사용하는 것 역시 Hypothesis space가 비교적 작고, 사람이 하나씩 정하는 것에 어려움이 있다.

이를 해결하기 위해 **Parameterized feature extractor**를 사용한다.

- 2NN이 기본이다.
- **Universal Approximation Theorem**에 의해 실세계의 모든 함수를 표현할 수 있다. 그러나 해당 함수를 정확히 찾을 수 있을 지는 미지수이다.
- 이때부터 **Loss가 W에 대해 Quadratic하지 않고, Convex함이 보장되지 않는다.**
    - Optimization이 어려워진다.

2-Layer보다 더 깊게 쌓을수록 Feature를 계층적으로 학습하여 더 좋은 성능을 보이기에 **Layer를 점점 더 깊게** 쌓기 시작했다.

Optimization

먼저 두 가지 용어를 정의해야 한다.

1. **Emprical risk(** $L_S(h) = \mathbb{E}_{(x_i,y_i)\in S}[\, l(y_i, h(x_i))\,]$**)**: Training dataset에 대해 계산한 loss
2. **Population risk (**$L_P(h) = \mathbb{E}_{(x,y)-P}[\, l(y, h(x))\,]$**)**: 실세계에 대한 Loss (일반화된)

원래의 우리의 목적은 **MAP**이다. MLE는 Emprical risk를 최소화하기 위해서 Training data만 보지만 **실제 목표는 앞으로의 것, 보지 못한 것을 예측하는 것이 목표**이다.

- **Optimization의 최종 목표는 모르는 분포 Population에서의 risk를 낮추는 것이다.**

그러나 실세계의 분포, Population은 모르는 것이 일반적이다. 따라서 우리는 간접적으로 **Population에서 샘플링한 Training data를 가지고 ERM을 계산하여 간접적으로 Population risk를 최소화하고자 한다.**

- ERM의 수식은 다음과 같다.

$$h_s \in argmin_{h\in H} L_s(h)$$

  - 여러 가능한 Hypothesis 중에 Loss를 최소화하는 Hypothesis를 찾는 것이다.
  - $L_s(h)$가 Emprical risk이다.

그러나, **Population에서 sampling한 데이터에 대한 ERM을 하는 것이 Population risk를 직접 줄이는것은 아니다.**

따라서 **우리는 Prior를 통해 Population에 대한 정보를 모델에게 주어 Population risk를 줄이도록 유도**할 수 있다.

- 여기서 MAP가 완성된다.

Prior 부분은 잠깐 넘어가고, **Optimization을 하는 방법**에 대해 살펴보자.

Parameterized model이 h_θ라고 하면 Emprical risk는 다음과 같이 작성할 수 있다.

- $L_s(\theta) = L_s(h_\theta)$
- $H = h_\theta : \theta \in \Theta$, 모든 가능한 Parameterized hypothesis의 집합

Parameterized model에서 우리의 목표는 $L_s(\theta)$**가 최소화되도록 하는** θ**를 찾는 것**이다.

$$\theta_s \in argmin_{\theta \in \Theta} L_s(\theta)$$

문제는 위 $L_s(\theta)$가 **Nonconvex**하기 때문에, **Gradient-based Optimization**을 이용해야 한다는 점이다.

θ를 찾도록 하는 여러 **Gradient-based method**가 있다.

1. **Gradient Flow**
    - 매우 작은 Step으로 Parameter를 업데이트했던 초기 방법이다.
2. **Gradient Descent**
    - Graident Flow를 근사하고자 했던 것이다.
    - Loss가 Linear하지 않아도, 주어진 점에서는 Linear하다고 가정한 후 Gradient를 계산하는 방법이다.
3. **Stochastic Gradient Descent**
    - GD를 근사하고자 했던 것이다.
    - GD처럼 Dataset 전체를 사용하는 것이 아니라, Dataset의 일부분을 사용하여 Parameter를 업데이트 하는 것이다.
    - 계산력과 상관없이 비교적 **Overfitting 방지와 일반화 측면에서 성능이 좋다.**
4. **Momentum method**
    - $m \leftarrow \beta m + g(\theta)$: 먼저 Momentum을 업데이트
    - $\theta \leftarrow \theta - \eta m$: Gradient update
    - 점점 예전 Gradient에 가중치를 줄여가면서 이전 방향을 어느 정도 유지하는 효과가 있음
    - **Nesterov Accelerated Gradient (NAG)**
        - $m \leftarrow \beta m + g(\theta - \beta m)$
        - 현재 Gradient 계산 시, Momentum만큼 이동한 위치에서 계산해 수렴 속도를 높인다.

5. **Preconditioned GD/SGD**
    - 기본적인 Idea는 Newton's Method에서 얻을 수 있다.
        - Netwon's method의 업데이트 식에서 f(x) 대신 L′(x)를 사용하면 $X_{n+1} = X_n - \frac{L'(X_n)}{L''(X_n)}$이 된다.
        - 이때, 분모에 $L''(X_n)$ 항이 **곡률이 작을수록 Gradient가 커지도록 하는 Precondition 역할**을 한다.
        - Learning rate 대신 $\frac{1}{L''(X_n)}$을 사용한다고 생각해도 된다.
    - Gradient가 **특정 방향이 너무 클 때, 최적의 방향이 아니라 해당 방향으로 쏠리게 되는 문제를 해결**한다.
    - 공식은 다음과 같다.
        - $M = \mathrm{diag}(\sqrt{s} + \varepsilon), \theta \leftarrow \theta - \eta M^{-1} g(\theta)$
    - **AdaGrad**
        - $s \leftarrow s + g^2$
    - **RMSProp**
        - $s \leftarrow \beta s + (1-\beta) g^2$
    - **Adam (RMS + momentum)**
        - $m \leftarrow \beta_1 m + (1-\beta_1) g$
        - $s \leftarrow \beta_2 s + (1-\beta_2) g^2$
        - $\theta \leftarrow \theta - \eta M^{-1} m$

모든 Gradient based optimization는 공통적으로 Learning rate가 **너무 작지도, 너무 크지도 않아야 한다**.

- 너무 작으면 수렴 속도가 느려진다.
- 너무 크면 수렴하지 않을 수 있다.
- Linear function은 $\frac{2}{\lambda_{max}(A)} > LR > 0$ 인 경우에 수렴한다.

Convergence

Learning rate 이야기를 하면서 **Convergence** 이야기가 나왔다.

Convergence를 알기 위해선 **Convex set, Convecx function, Epigraph** 먼저 정의해야 한다.

Convex set: 집합 내의 어느 두 점을 잡았을 때, 두 점을 X, Y라고 하자. **두 점을 직선으로 이은 선분 위에 모든 점이 같은 집합 내에 존재**하면 Convex set이다.

Convex function

$$f(\lambda x + (1-\lambda)y) \leq \lambda f(x) + (1-\lambda)f(y)$$

- X와 Y를 섞은 점의 함수 값이 X에서의 함수값과 Y에서의 함수값을 섞은 값보다 작다.

Epigraph

$$\text{epi}(f) = \{(x, \beta) : f(x) \leq \beta\}$$

특정 함수 f의 **함수값 위 영역을 가지는 집합**

위 세 가지 개념으로부터 중요한 정리가 도출된다.

> **f가 Convex function ↔ Epigragh가 Convex set**

- 즉, 함수가 Quadratic하면 무조건 Epograph가 Convex set이기 때문에 Convex function이 되는 것이다.
- 이는 Binary classification에서 Zero-one loss를 사용하지 않고 Binary cross entropy loss를 사용하는 이유와 관련이 있다.
  - Zero-one loss가 Convex하지 않기 때문이다.
  - 따라서 Zero-one loss를 근사하는 다른 함수를 사용하는 것이다.

이걸 이용해서 미분 가능한 함수 f에 대해 다음을 유도할 수 있다.

> **f가 Convex function ↔ f(x) ≥ Gradient**

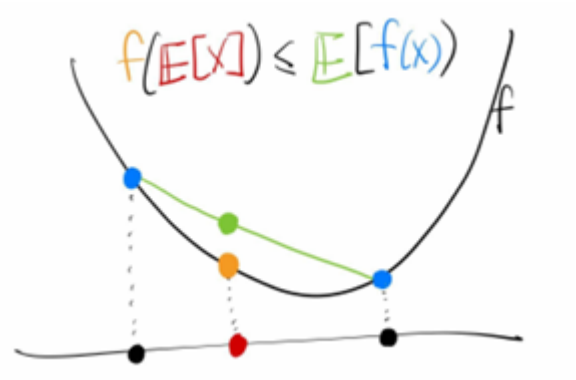
Jexson's Inequality

f: X→R인 Convex function, $x_i \in X$, $\lambda_i \in [0,1]$

$$f\left(\sum_i \lambda_i x_i\right) \leq \sum_i \lambda_i f(x_i)$$

여기서 λ_i를 확률로 생각한다면? 기댓값으로 생각할 수 있다.

$$f(\mathbb{E}_X[X]) \leq \mathbb{E}_X[f(X)]$$



이를 통해 **KL-divergence가 항상 0보다 크거나 같음**을 증명할 수 있다.

m- Strongly Convex

$$f(x) - \left(f(y) + \nabla f(y)^\top (x-y)\right) \geq \frac{m}{2}\|x-y\|^2$$

- $f(x) >= Linearapprox + \frac{m}{2}||x-y||^2$
- $f(x)$**가 최소한** $\frac{m}{2}||x-y||^2$**이상 휘어있어야 한다.**
- **평평하면 안 된다!!**

β-smoothness

$$\left|f(x)-\left(f(y)+\nabla f(y)^{\top}(x-y)\right)\right| \leq \frac{\beta}{2}\|x-y\|^{2}$$

- $f(x) <= Linearapprox + \frac{\beta}{2}||x-y||^2$
- **너무 휘거나 너무 Sharp하면 안 된다!!**

Polyak–Łojasiewicz(PL)

$$\frac{1}{2}\|\nabla f(x)\|^{2} \geq c\left(f(x)-f(x^{*})\right)$$

- **Gradient가 너무 작아지면 안된다!!**
- $f(x^*)$는 최적점이다.
- **최적점에 가까워질수록 Gradient가 너무 작아지는 것을 방지하기 위함**이다.

β-smoothness와 Polyak–Łojasiewicz(PL)을 이용하여 Linear convergence를 수식화하여 정리하면 $L_t - L^*$가 작아지기 위해선 C가 커야하고 β가 작아져야 한다는 결론이 나온다.

- 따라서 **Linear convergence (Convex)**의 경우, **Loss curve가 평평한 것이 좋고, Gradient가 어느 정도 커야한다는 결론이 나온다.**

그러나 **SGD는 Convex하지 않은 Loss에 대해서도 충분히 좋은 solution을 찾는 경향**을 보인다.

- 좋은 solution: Training loss가 작도록 하는 Parameter
- 왜 그런지는 아직도 모른다.

Backpropagation

> **Optimization을 수행하는 방법**

Computation Graph (DAG)

> **Loss와 Parameter를 연결하는 그래프로, Backpropagation에 사용된다.**

Forward pass에서 이 그래프를 미리 구축해 놓는다.

Training error vs Test error

이제, **Emprical risk를 줄이는 것이 어떻게 Population risk까지 줄일 수 있는지** 알아보자.

그에 앞서, **Emprical risk를 줄이는 것이 Population risk를 줄이는 데 효과가 적은 이유**를 먼저 알아보자.

Generlization error of h_s

- Training data를 이용한 ERM을 통해 구한 h_s와 실제 Target과의 차이
- $L_P(h_s)$

우리가 만약, Population을 알고 있다면, **Hypothesis space 내에서의 최적의 Hypothesis**는 아래와 같이 나타낼 수 있다.

- $h^*_H \in argmin_{h \in H} L_P(h)$

그러나, 대부분에 경우에 $L_p(h)$를 모르기 때문에 h^*_H**를 구할 수 없는 경우가 대부분**이다.

Approximation error

- h^*_H와 실제 Target간의 차이
- $L_P(h^*_H)$

- Hypothesis space가 커질수록 실제 Target을 Hypothesis space가 포함할 가능성이 커지기 때문에 $|H|$**에 반비례한다.**

Estimate error

- Hypothesis space 내의 최적의 hypothesis와 ERM을 통해 구한 hypothesis간의 차이
- h_H^*와 h_s의 차이
- $L_P(h_s) - L_P(h_H^*)$
- 간단하게는 Hypothesis space가 커질수록 커진다고 생각할 수 있지만, 항상 그런 것은 아니다.

Hypothesis space의 크기는 2NN이나 DNN일수록 커진다.

2-layer만 되어도 Universal Approximation Theorem (UAT)에 의해 거의 모든 함수를 표현할 수 있다.

따라서 **Approximation error는 0에 가까워진다.**

결국 **Estimate error := Generalization error**가 된다.

- $L_P(h_S) - L_P(h_H^*) = L_P(h_S)$

$L_P(h_s)$는 Training data로 찾은 Hypothesis h_s의 Population에서의 Loss이므로 **Test error**가 된다.

$L_P(h_s)$가 Test error이기 때문에 Training error인 $L_S(h_s)$와 비교해보자.

먼저, $L_s(h_s)$**를 학습했는데,** $L_p(h_s)$**라는 본 적 없는 데이터 분포에 대한 Loss도 감소하는 나오는 이유**에 대해 알아보자.

- Training data는 Population에서 Sampling한 것이다. **Central Limit Theorem에 의해 Training data가 Sampling하는 과정에서 Population을 일부 표현하기 때문**이

라고 생각할 수 있다.

Population에서 N번 Sampling하여 S를 얻었다고 할 때, **Train-test error gap** $|L_s - L_p|$**는** $\frac{1}{\sqrt{n}}$**에 비례**한다.

- 따라서 **Training Data가 많아질수록 Gap이 작아지는 것**이다.
- $|L_s - L_p| \leq \frac{1}{\sqrt{n}}$

그러나, **Hypothesis space가 커질수록** $L_S(h_s)$**는 계속 감소하지만,** $L_P(h_s)$**는 감소하다가 다시 증가한다.**

- Hypothesis space가 커진다면 **Training data를 모두 지나는 함수를 정확히 표현할 수 있게 되어** $L_S(h_s)$는 0에 가까워진다.

Test error가 감소하다가 증가하는 이유를 **Bias & Variance** 관점에서 설명해보자.

bias(h_s**):** $E_s[h_s] - f$

variance(h_s**)**: $Var_s[h_s]$

Test error를 다음과 같이 표현할 수 있다.

$$L_p(h_s) = E_{x\sim P}[(h_s(x) - f(x))^2]$$

- x_i**가 P에 대해 i.i.d로 Sampling될 때,** $S = [x_i]_{i=1}^n$**이 되어 Randomness를 부여**하기 때문이다.

$E_{s\sim p^n}[(h_s - f)^2]$ **(Generlization error)**의 평균을 정리하면 **Variance + Bias의 형태**로 나온다.

- Hypothesis space가 커질수록 Variance가 커져 test error가 다시 증가하게 되는 것이다.
- 이를 **Overfitting**이라고 부른다.

하지만, 위는 **Classical ML**의 관점이고 **Modern ML**에서는 **Hypothesis space가 클수록 Test error가 감소하다가 증가하고 다시 감소하는 형태**를 보인다.

- **Double Descent**라고도 부른다.

Regularization

Classical ML의 입장에서, Hypothesis space를 키우기만 하는 것은 **Overfitting**을 유발한다.

즉, **Variance를 줄이기 위해 Hypothesis space를 줄이기 위한 Prior를 추가**하는 것이 **Regulization**이다.

Regularized Emprical Risk

$$L_s(\theta;\lambda) := L_s(\theta) + \lambda C(\theta)$$

- $C(\theta)$: Hypothesis function h_θ의 복잡도를 측정
- MAP와 동일하다.
- MAP - Likelihood + Prior - Regularized ERM

Regularization 방법

L1 Regularization

- **1-Norm** 사용한다.
- **Sparse**
- 대부분의 θ가 0이 된다.

L2 Regularization

- **2-Norm** 사용

- **Dense**
- θ^2는 큰 Weight에 Penalty
- θ가 0으로 가는 경우는 잘 없다.

Regularization 종류

Soft prior: 약한 Prior

- EX) $P(\theta) \propto \theta(1-\theta)$

Hard prior: 강한 Prior

- EX) Uniform(0.4; 0.6)
- $|H|$를 크게 줄인다.

Implicit Regularization

그러나 **Regularized Emprical Risk는 Classical ML의 관점**이고**, Modern ML에서는 별도의 Regularization term 없이도 SGD가 충분히 좋은 Solution을 찾는다.**

- 좋은 Solution이란 L_s, L_p 모두 작아지는 것을 의미한다.
- 왜 그런진 모른다. 하지만, **SGD가 Generalization 성능이 가장 좋아서 자연 선택과 같이 살아남았다고 이해**하면 좋다.

SGD가 왜 잘 동작하는 지를 확인하자. (SGD를 우선 사용하다가 나중에 찾은 결과이다.)

- **SGD를 통해 구한 Minima가 더 Flat한 Minima이고 Flat minima가 더 좋은 Minima임**을 확인할 수 있었다.
- Sharpness한 부분에서는 θ가 작게 변해도 Loss가 크게 변하기 때문이다.

찾은 Minima가 Flat한지 Sharp한지 측정할 수 있는 두 가지 방법이 있다.

1. $E_\epsilon[L_s(\theta+\epsilon)]$을 계산해서 값의 변화가 클수록 Sharp하다.

2. $\lambda_{max}(\nabla^2 L(\theta))$를 계산하면 가장 Sharp한 부분의 Sharpness 정도를 확인할 수 있다.

이 관점에서 **Sharpness-Aware Minimization (SAM)**이라는 Optimization 방법도 제안된다.

Overparameterized Model

Parameter가 굉장히 많은 모델으로, Modern ML에서는 좋은 성능을 보인다.

Linear Least Squares를 통해 왜 좋은 성능을 보이는지 이해해보자.

N개의 Data가 있을 때, Regression을 생각해보자.

- $y_i = x_i^T \beta + \epsilon_i$
- $y = X^T \beta + \epsilon$

β는 **True oracle**으로 실세계의 함수, 파라미터로 생각하면 된다. β를 정확히 알기 어렵기 때문에 Least square을 통해 최적의 $\hat{\beta}$를 찾고자 한다.

Parameter의 개수가 Data의 개수보다 많은 경우를 생각해보자

$$\hat{\beta} = \arg\min \left\{ \|b\| : \ b \text{ minimizes } \tfrac{1}{2}\|y - Xb\|^2 \right\}$$
$$= (X^\top X)^+ X^\top y$$
$$= X^\top (X X^\top)^+ y$$
$$= X^+ y$$

위 경우에는 **가능한 Solution이 무한 개**이기 때문에, **Min-norm solution을 사용하는 것이 일반적으로 좋다.**

Gradient-based Optimization을 사용한다면, **따로 Prior를 통한 Regularization을 사용하지 않아도 Min-norm Solution이 사용되도록 유도**된다.

- **초깃값이 0**인 경우, Gradient-based Optimization은 Min-norm solution으로 수렴하게 된다.
- **Gradient-based Optimization 자체에 Regularization이 존재하는 것처럼 생각할 수 있고, 이를 Implict regularization**이라고 부른다.

Min-norm solution은 모든 가능한 Solution 중, **Weight의 크기가 가장 작은 Solution**이기 때문에 그 자체로 Regularization이다. 이를 **SGD가 갖는 Implict regularization**이라고 한다.

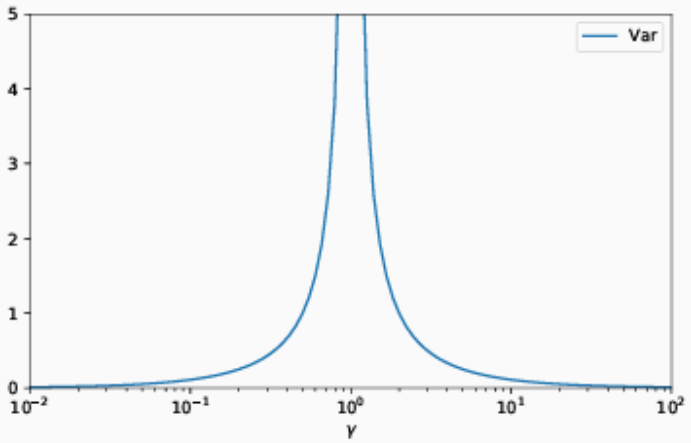
- Weight가 작기 때문에 Generalization에도 좋다.

Overparameterized model에서 Parameter 개수가 Data의 개수보다 많아도 Gradient-based Optimization가 갖는 Implict regularization 때문에 Double Descent가 일어난다.

실제로 아래 정리에 따르면 $\gamma = \frac{p}{n}$**이 [0, 1] 구간 사이라면 Variance가 계속 증가하다가** $\gamma = 1$**이후 감소하는 형태를 가짐**을 확인할 수 있다.

$$\text{Var} \to \begin{cases} \frac{\gamma}{1-\gamma} & \text{if } 0 < \gamma < 1 \text{ (underparam.)}, \\ \frac{\gamma^{-1}}{1-\gamma^{-1}} = \frac{1}{\gamma - 1} & \text{if } 0 < \gamma^{-1} < 1 \text{ (overparam.)}. \end{cases}$$

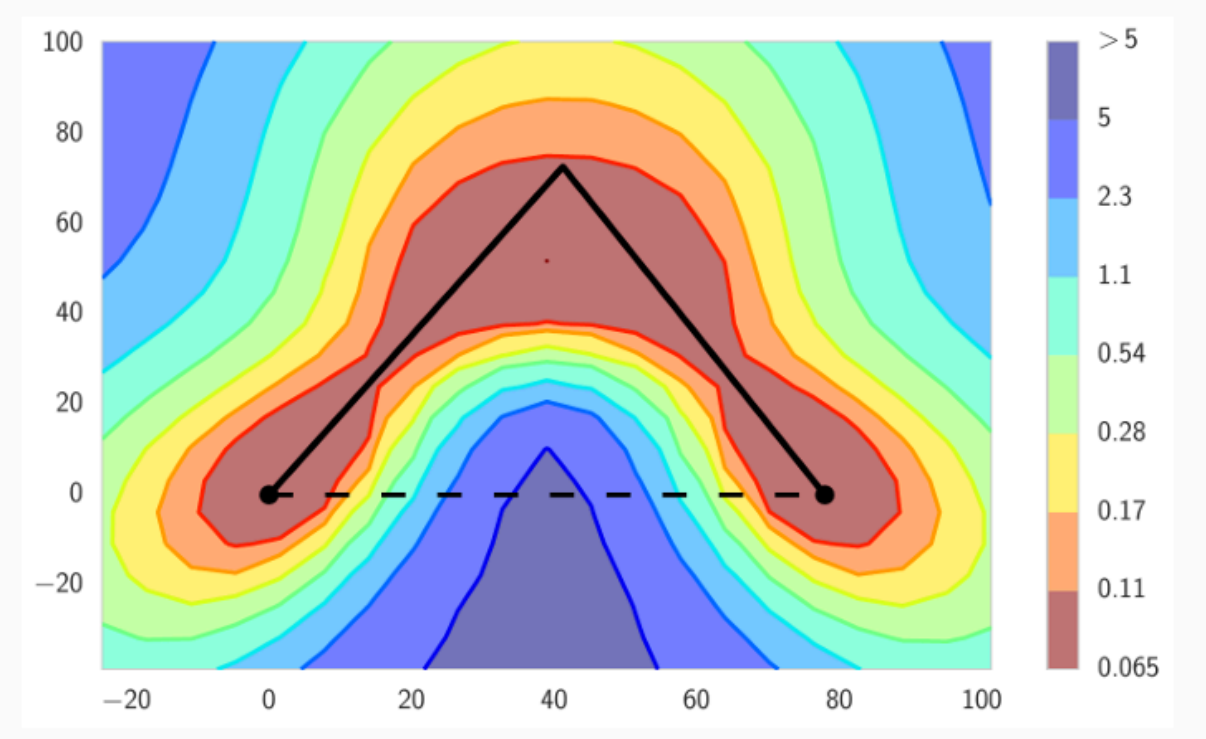
as p (# params), n (# data) $\to \infty$ with $p/n \to \gamma$.



결국 Paramter, model size를 늘리다보면 $\gamma \leq 1$까지는 Test Loss가 감소하다가 증가하고, 더 키우다 보면 Test Loss가 다시 감소하는 것이다.

Gradient-based model이 Solution이 될 수 있는 수많은 점이 이루는 곡선에서의 Min-norm을 찾는 것을 다른 관점에서 확인할 수도 있다.

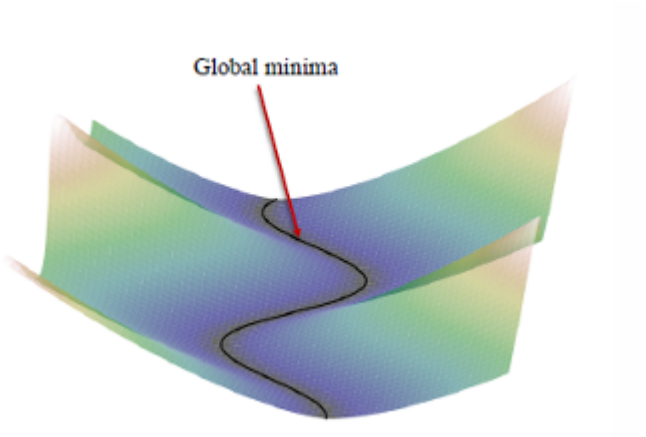
Mode Connectivity



Overparameterized 경우에는 Loss가 작은 빨간 부분의 영역에서, 두 Minima가 독립적으로 분리된 것이 아니라, **하나의 Curve를 이루며 연결되어 있는 것을 확인**할 수 있다.

- Local minima처럼 각 Minima가 Isolated되지 않는다는 점이 중요하다.
- 두 Minima가 연결이 가능하다는 것은 **다른 곳에 비해 "Flat"고 넓은 구간을 갖는다는 의미**이다.
    - 때문에 SGD가 Minima를 잘 찾을 수 있는 것이다.

따라서 Overparameterized 경우에 아래 그림처럼 여러 Global minima가 존재할 수 있고, 그 것들은 **하나의 곡선 (Valley)**를 이룬다.



어떤 Minima는 Test loss가 낮을 수도 있고, 다른 Minima는 클 수도 있다. 하지만 SGD는 Implict regularization 덕분에 그 중 좋은 Minima를 일반적으로 찾을 수 있다.

- SGD가 Flat minima를 잘 찾는 이유와 동일하다.
- **가능한 Solution에 집합에서 Min-norm solution을 찾는 방식이 Generalization에 좋기** 때문이다.