Tema 4.1
Regularización sobre modelos

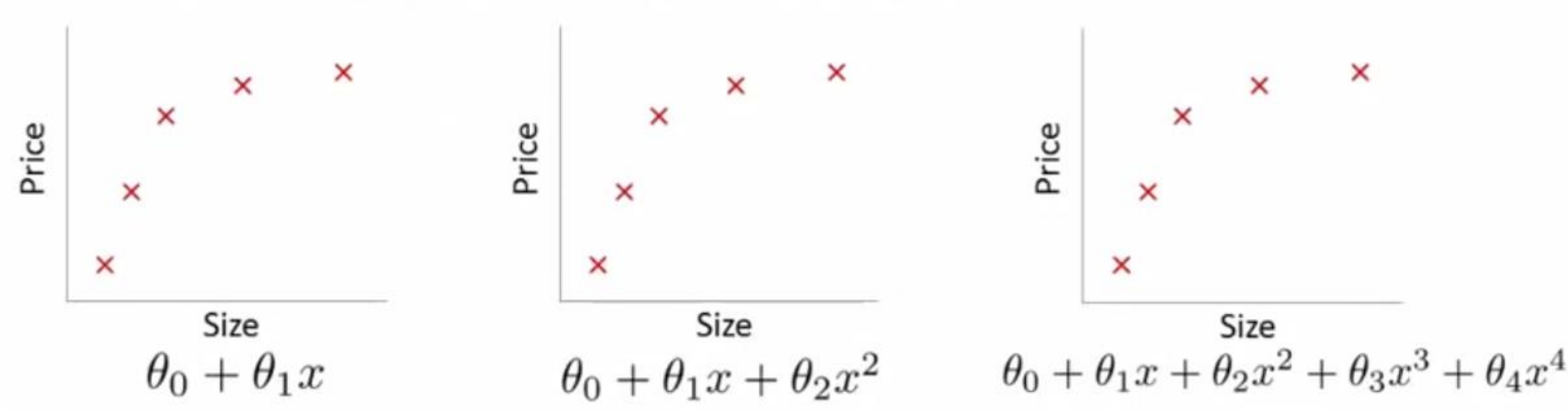
Miguel Ángel Martínez del Amor
Deep Learning
Departamento Ciencias de la Computación e Inteligencia Artificial
Universidad de Sevilla

Contenido

- Necesidad de regularización
- Penalización de parámetros
- Early stopping
- Ensemble
- Dropout

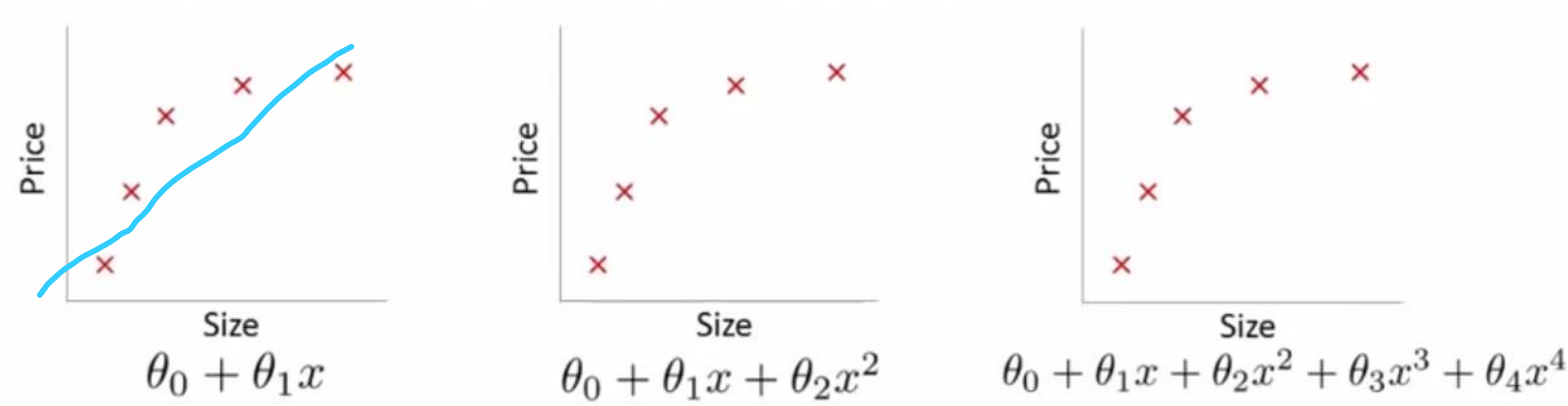
Necesidad de regularización

- En machine learning, buscamos modelos precisos a la vez que generalistas.
- El problema del **overfitting**:



Necesidad de regularización

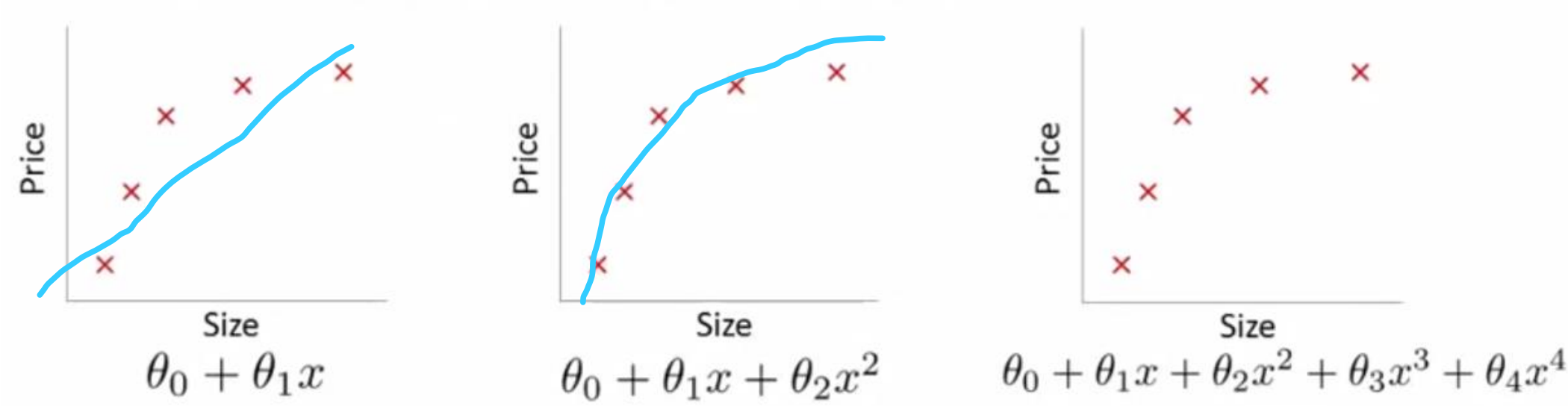
- En machine learning, buscamos modelos precisos a la vez que generalistas.
- El problema del **overfitting**:



Underfitting (high bias)

Necesidad de regularización

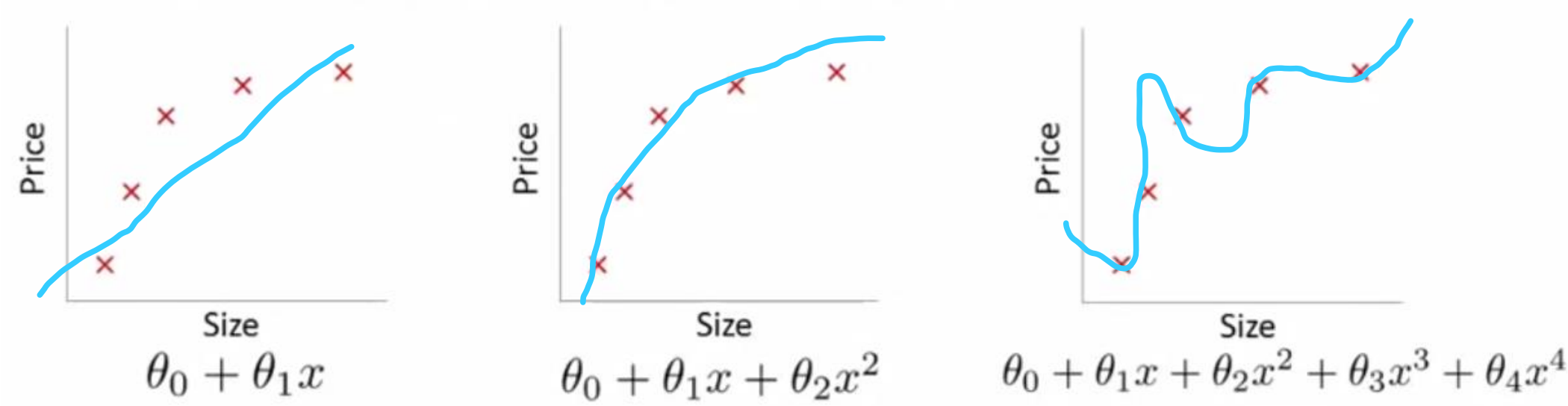
- En machine learning, buscamos modelos precisos a la vez que generalistas.
- El problema del **overfitting**:



Underfitting (high bias)

Necesidad de regularización

- En machine learning, buscamos modelos precisos a la vez que generalistas.
- El problema del **overfitting**:



Underfitting (high bias)

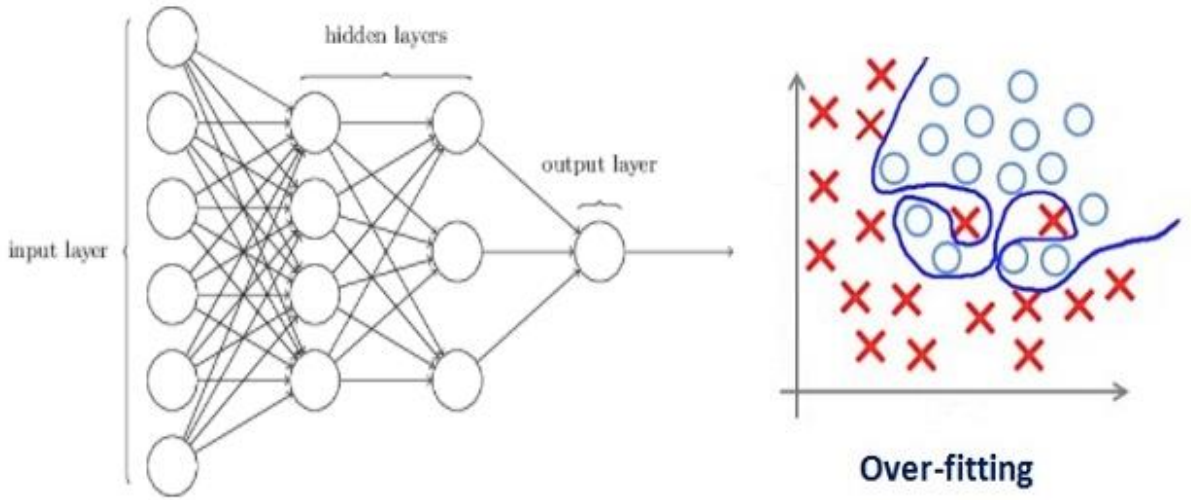
Overfiting (high variance)

Necesidad de regularización

- Las técnicas para atacar el overfitting son:
  - Reducir el número de características
    - Manualmente
    - Técnicas de reducción de dimensionalidad
  - Regularización
    - Mantenemos todas las características
    - Reducimos los valores de los parámetros del modelo
    - Funciona bien cuando tenemos muchas características y todas aportan un poco a predecir

Necesidad de regularización

- Técnicas de regularización ayudan a:
  - Combatir el overfitting
  - Generalizar mejor sobre los datos
  - Obtener modelos más simples
  - Obtener modelos más robustos



Penalización de parámetros

- Controlar la capacidad del modelo añadiendo una función de penalización a la función de coste:

$$\hat{J}(\theta) = J(\theta) + \lambda\Omega(\theta)$$

- Tendremos hipótesis más simples.
  - Distintos valores de los parámetros θ puede dar el mismo valor de pérdida, incluso si estos son valores muy extremos.
  - Si x=[1,1,1,1], w_1=[1,0,0,0] y w_2=[0.25,0.25,0.25,0.25]: x*W_1=x*W_2=1
- Menos dado a generar overfitting.

Penalización de parámetros

- Regularización L1 (lasso o dispersa):
  - Minimiza los parámetros del modelo calculando la suma de sus valores absolutos.
  - $\Omega_{\mathrm{L}^1}(\theta) = \frac{1}{2}\|\theta\| = \sum_i |\theta_i|$
- Regularización L2 (ridge, weigth decay):
  - Minimiza los parámetros del modelo computando su norma euclídea.
  - $\Omega_{\mathrm{L}^1}(\theta) = \frac{1}{2}\|\theta\|_2 = \sum_i \left|\theta_i^2\right|$

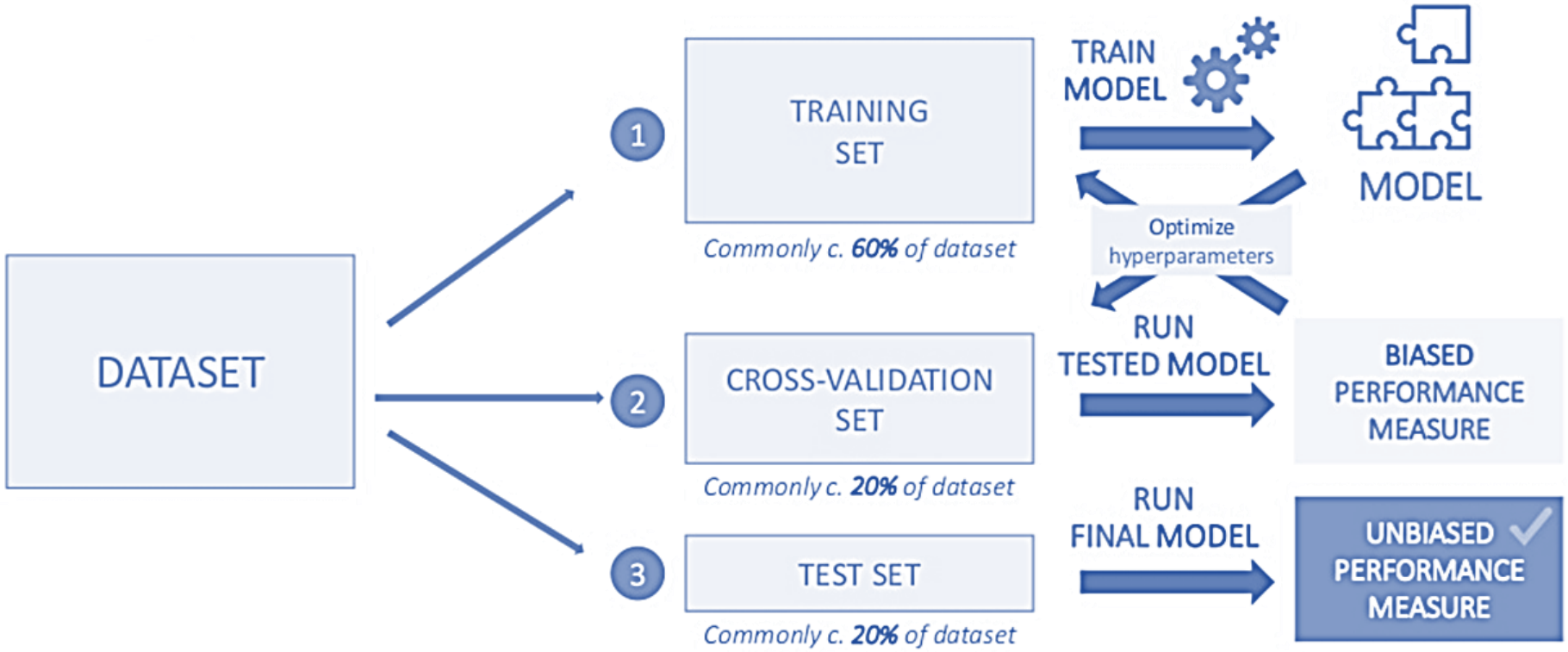
Penalización de parámetros

- Regularización L1 vs L2

	L1	L2
Coste computacional	Alto	Bajo
Solución única	No	Sí
Efecto sobre parámetros	Dispersos	Valores bajos
Con descenso gradiente	No siempre	Sí

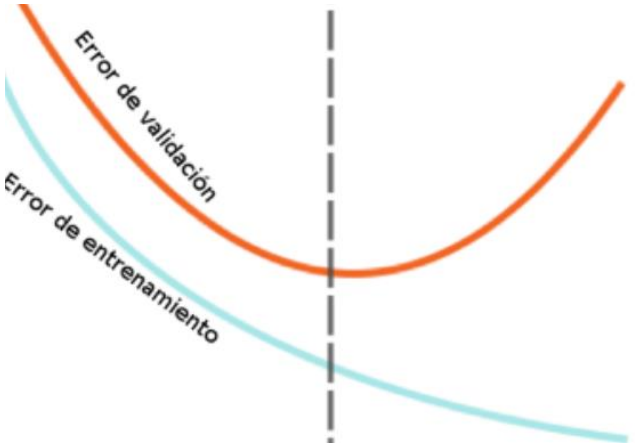
Early stopping

- Nuestro dataset está previamente dividido en tres partes principales



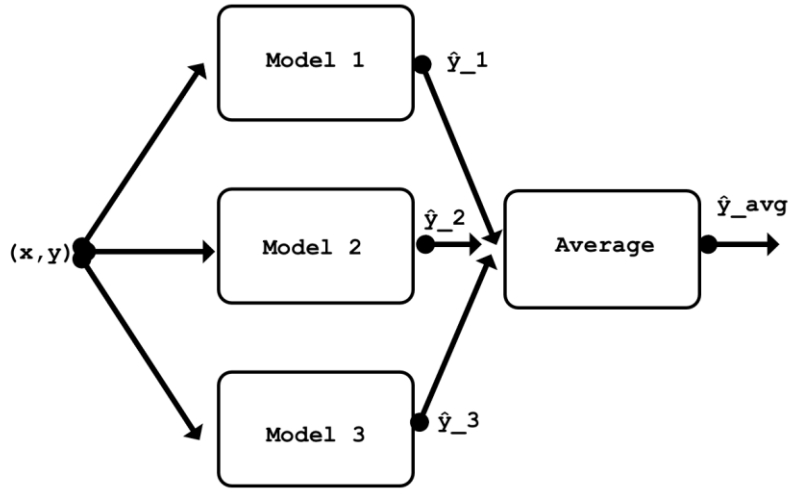
Early stopping

- **Idea**: detener el entrenamiento cuando el error cometido sobre el conjunto de validación crece.
- Requiere guardar una copia del mejor modelo obtenido
- Hiperparámetro: **p = paciencia**, número de evaluaciones sobre validación antes de detener el entrenamiento
- Estrategia popular por efectividad y simplicidad.
- Procedimiento:
  - Entrenar con early stopping usando training set
  - Entrenar usando training+validation set



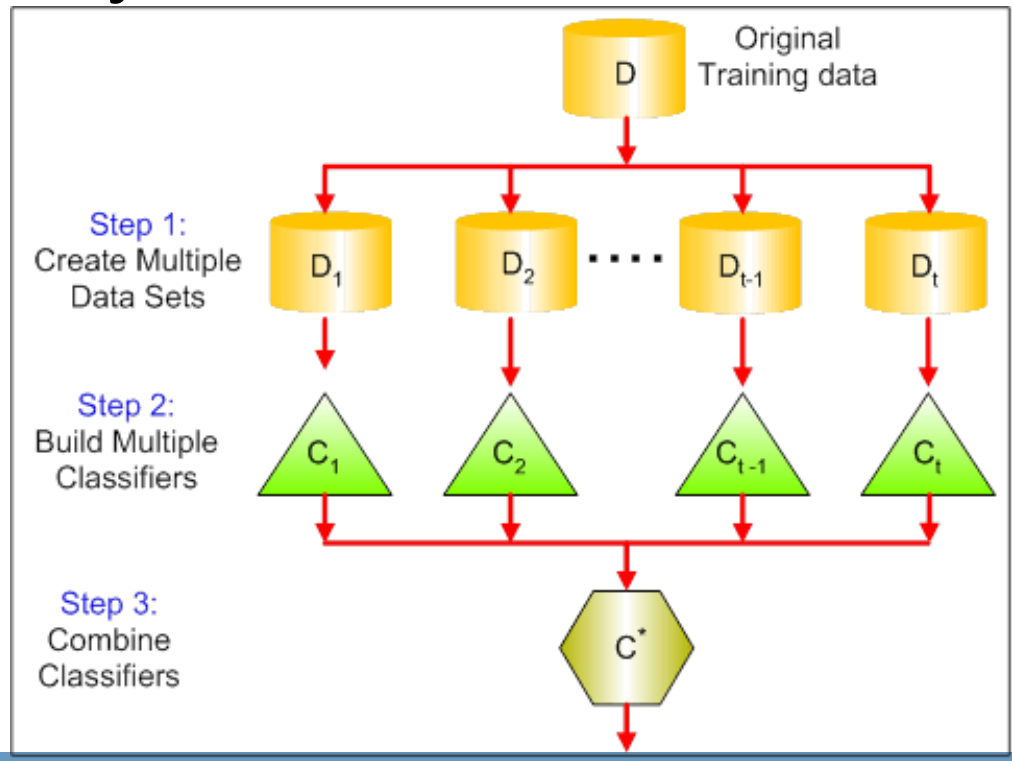
Ensemble

- El método de **ensamblado** aumenta la generalización combinando varios modelos:
  - **Model averaging**: entrenar varios modelos por separado y obtener la media (mayoría, máximo, suma…) de los votos de todos ellos para la predicción final.
  - Para obtener buenos resultados es necesario que la respuesta de los modelos **no este correlacionada**



Ensemble

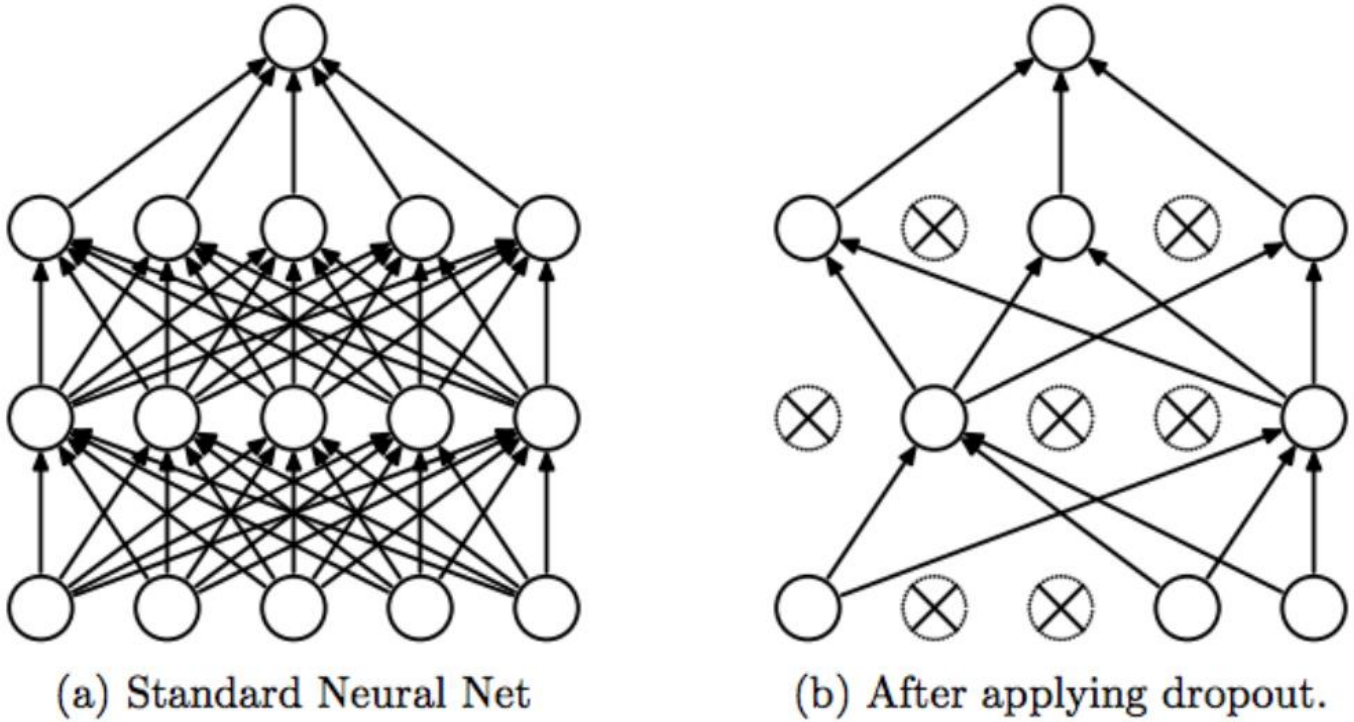
- Para obtener diferentes modelos podemos modificar la **hipótesis**, la **función de evaluación**, el **optimizador** o el **conjunto de datos**.
- **Bagging** (**b**oostrap **agg**regat**ing**) se usan **k** conjuntos de datos diferentes.
  - Cada conjunto de datos se construye mediante muestreo con reemplazamiento.
  - De media tendremos 2/3 del original.
- Desventaja: mayor tiempo de computación y memoria.



Dropout

- **Idea**: aleatoriamente **poner a cero** algunas neuronas en la propagación hacia adelante
- **Hiperparámetro**: **p**
  - Probabilidad de poner a cero
- Es decir, de media en una capa con L neuronas, se desactivan L*p neuronas.

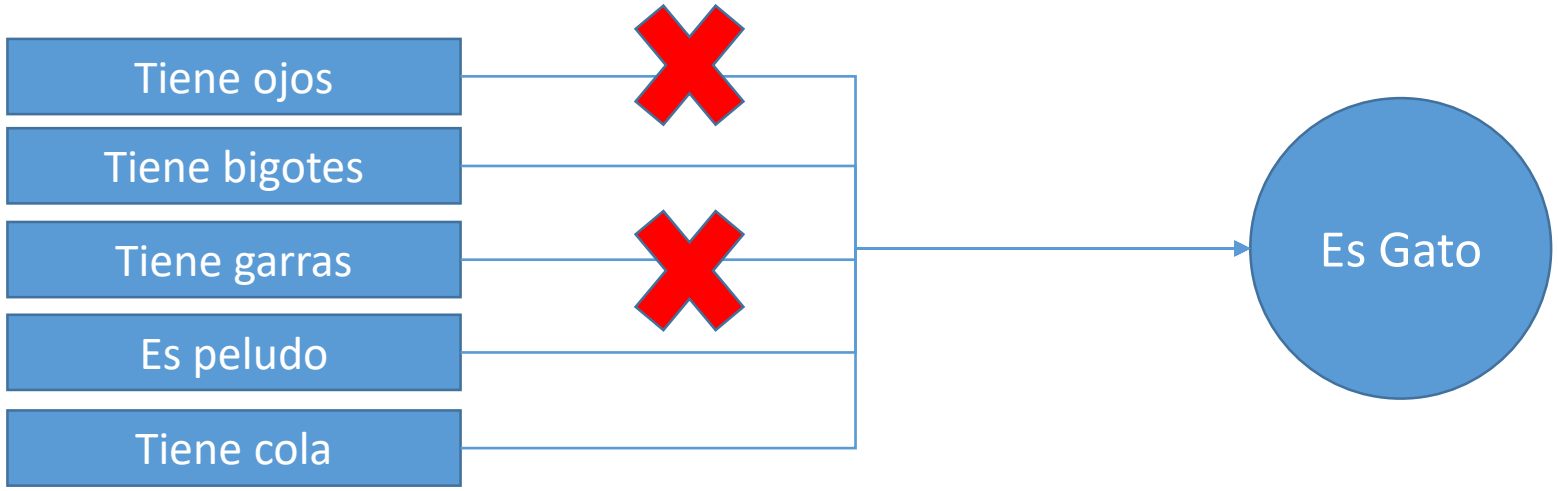
[Srivastava et al 2014]



(a) Standard Neural Net (b) After applying dropout.

Dropout

- Fuerza la red tener una representación más redundante
  - La red encuentra otros “caminos” dentro de la red para llegar a la misma conclusión



Dropout

- **En la fase de entrenamiento:**
  - Por cada capa oculta, por cada ejemplo de entrenamiento, por cada iteración, ignorar una fracción aleatoria (p) de nodos.
- **En la fase de test**:
  - Usar todas las activaciones, pero reducir los valores en un factor p
  - ¿Por qué? Para contar las activaciones desestimadas durante el entrenamiento:
    - Con p=0,5, usar todas las entradas en la fase de propagación hacia adelante inflaría las activaciones por 2 de lo que la red estaba acostumbrada durante el entrenamiento. Tenemos que compensarlo escalando las activaciones a ½.
- **Dropout invertido**: se escala por 1/p solo en entrenamiento

Dropout

- Dropout equivale a entrenar un **gran ensamblado de modelos** que **comparten parámetros**.
  - Cada filtro nodos es un modelo que se entrena por solo esa iteración.
  - Con L neuronas en total en capas ocultas, tenemos 2^L posibles modelos.
  - No es exactamente igual a bagging, donde cada modelo se entrena por separado.
- **Ventajas**:
  - Funciona bien, barato de aplicar, no se limita a ningún tipo de modelo, compatible con el resto de técnicas de regularización.
- Un valor bueno de **p es 0,5**.

Recapitulación

- Importancia de evitar el sobreajuste con técnicas de regularización
- **Regularización L1/L2**
- **Early Stopping** para detener el entrenamiento cuando haya pérdida de generalización
- **Ensamblado** de modelos (p.ej. bagging) para una respuesta más robusta.
- **Dropout** para una red más robusta → Fácil de usar