KIRD
국가과학기술인력개발원

Artificial Neural Networks
&
Auto ML

한국원자력연구원 류승형

과정 개요 (Day 2 - 오전)

시간표

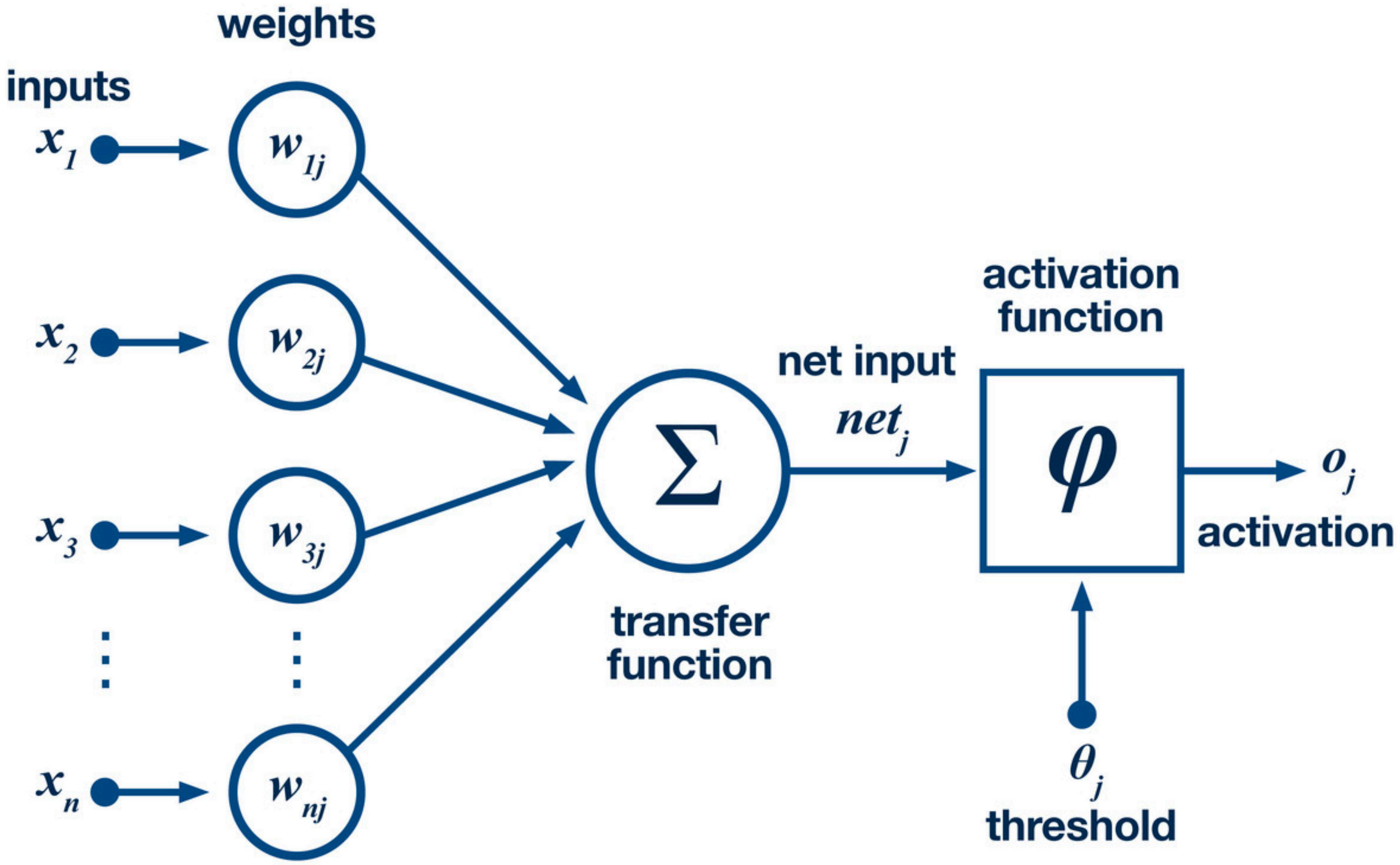
일차	시간		내용
1일차 7/5 (수)	09:20~09:30	10분	등록 및 오리엔테이션
	09:30~11:30	120분	AutoML 개요 - AutoML 개념, 목적 데이터 형식 이해 - 데이터 형식에 따른 적정 모델 선택 이해
	11:30~12:30	60분	점심식사
	12:30~13:30	60분	표 형식 데이터 분석 - 표 형식 데이터 전처리, 학습, 평가데이터 분리방법
	13:30~17:30	240분	AutoML 기본 이해 - AutoML Solution 종류, 모델 탐색 - AutoML 활용 위한 학습, 평가 데이터셋 준비, 최적 모델 저장 및 추론 실습
2일차 7/6 (목)	09:00~12:30	210분	AutoML 활용 표 형식 데이터 모델 탐색 - 인공신경망 모델 이해 AutoKeras 활용한 표 형식 데이터 분류 - AutoKeras 활용한 표 형식 데이터 회귀 모델 탐색 실습
	12:30~13:30	60분	점심식사
	13:30~17:30	210분	AutoML 활용 이미지 데이터 모델 탐색 - AutoKeras 활용한 이미지 데이터 분류 및 회귀 모델 탐색 실습

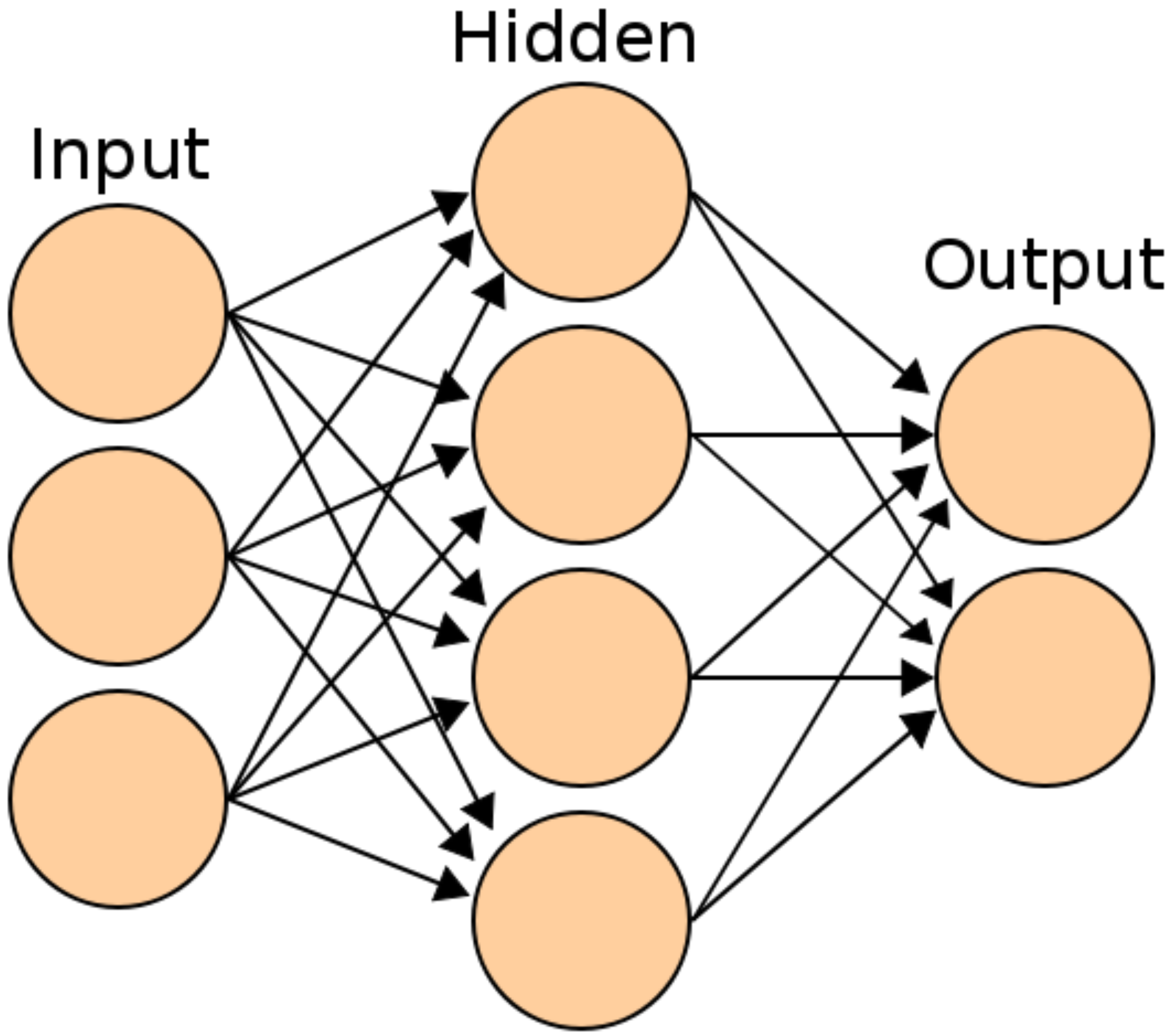
1. 인공신경망과 NAS
2. AutoKeras 기초 실습

목차

Chapter 1.
Introduction to Neural Network

인공신경망


weights
inputs
x_1
w_{1j}
x_2
w_{2j}
x_3
w_{3j}
x_n
w_{nj}
Σ
transfer function
net input
net_j
activation function
φ
o_j
activation
θ_j
threshold

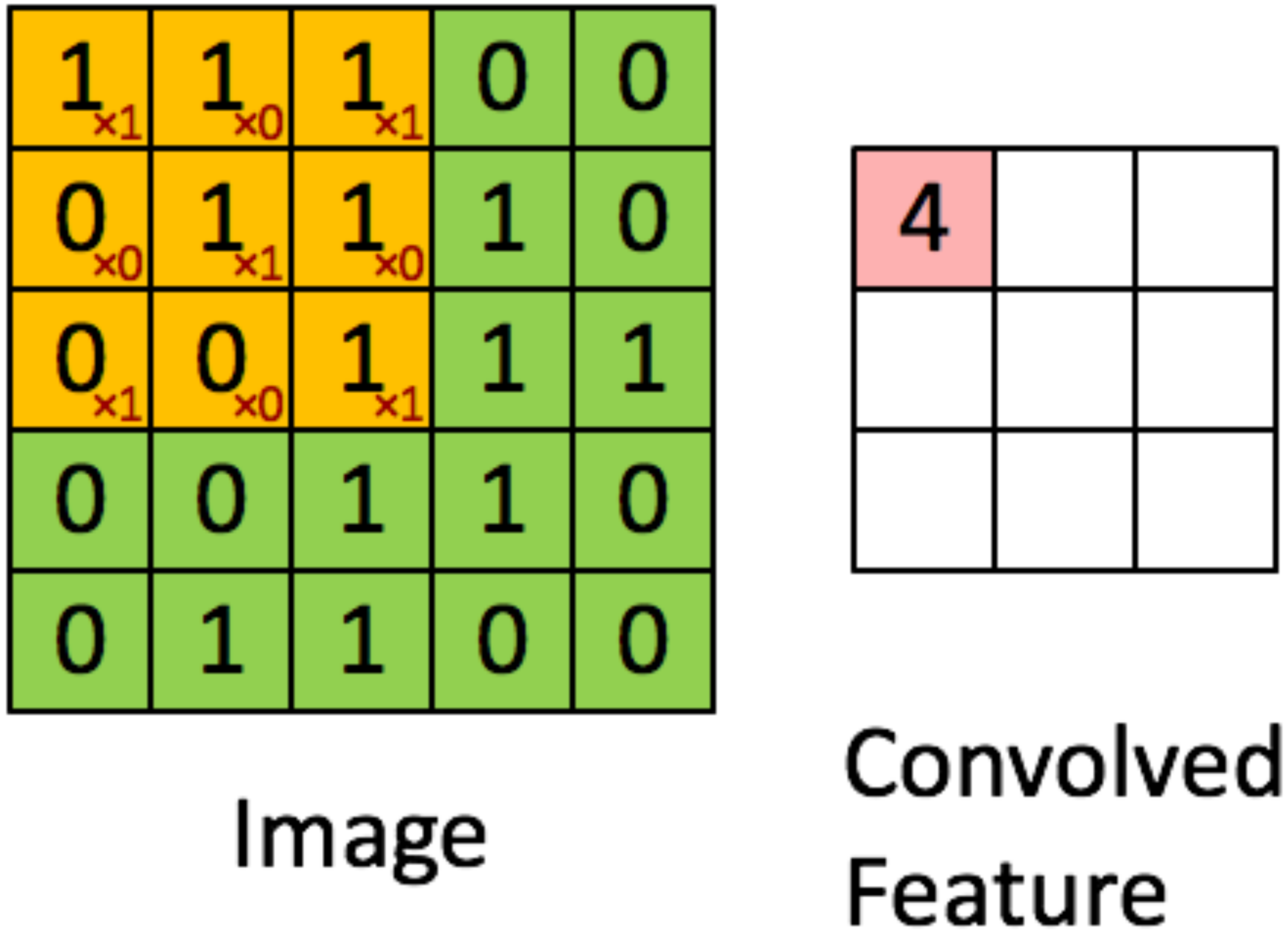

Input
Hidden
Output

Dense (Linear) layer

- 가장 기본적인 신경망 레이어 : Dense (keras) 또는 Linear (torch)
- Matrix multiplication을 통해서 d_{in} 벡터를 → d_{out} 벡터로…
    - $+\alpha$ (activation function, dropout)
- [N x d] → Dense (d, d') → [N x d’]

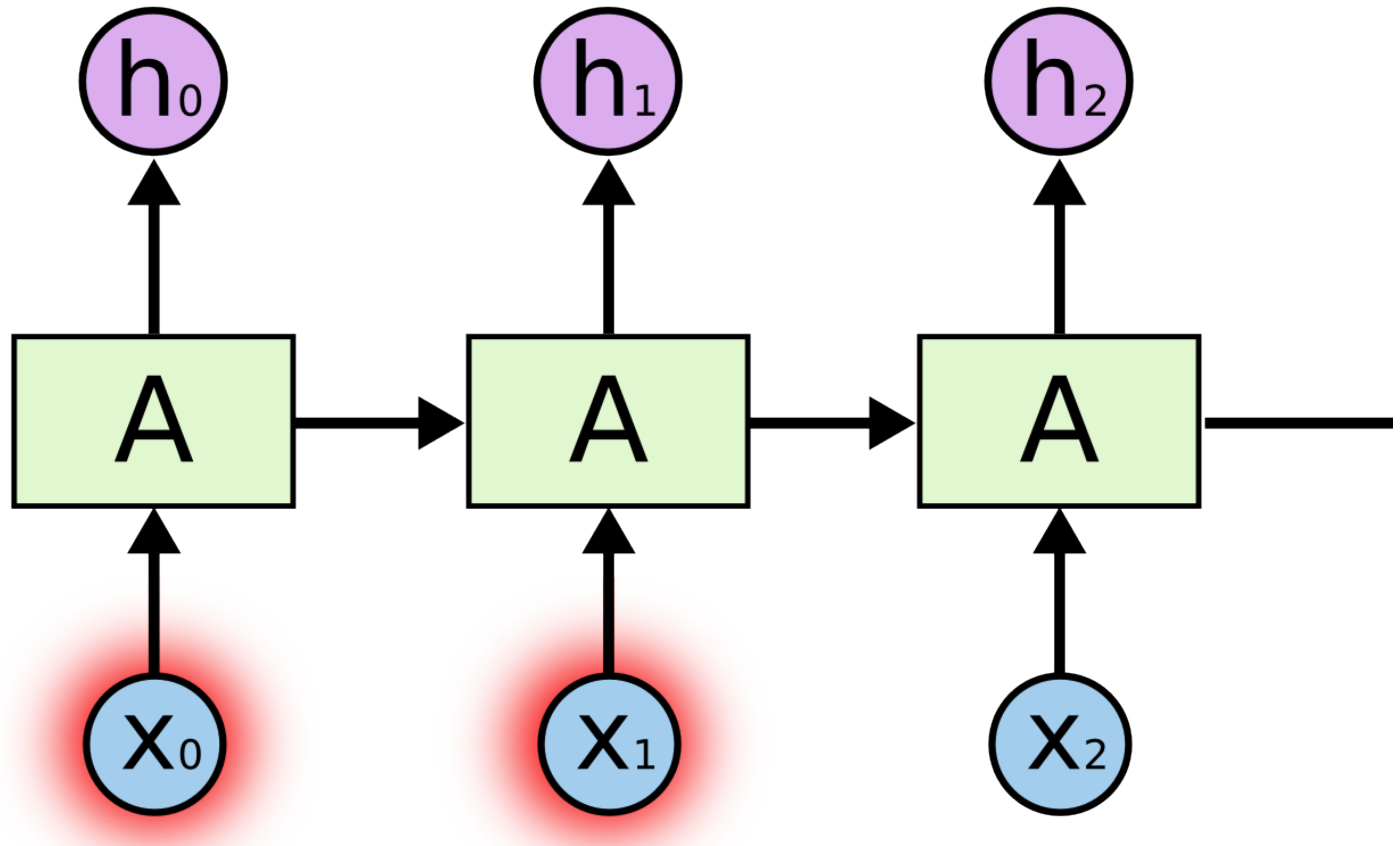
Convolutional layer

- Kernel 또는 Filter를 움직이면서
- 국소 지역에 대한 weight summation

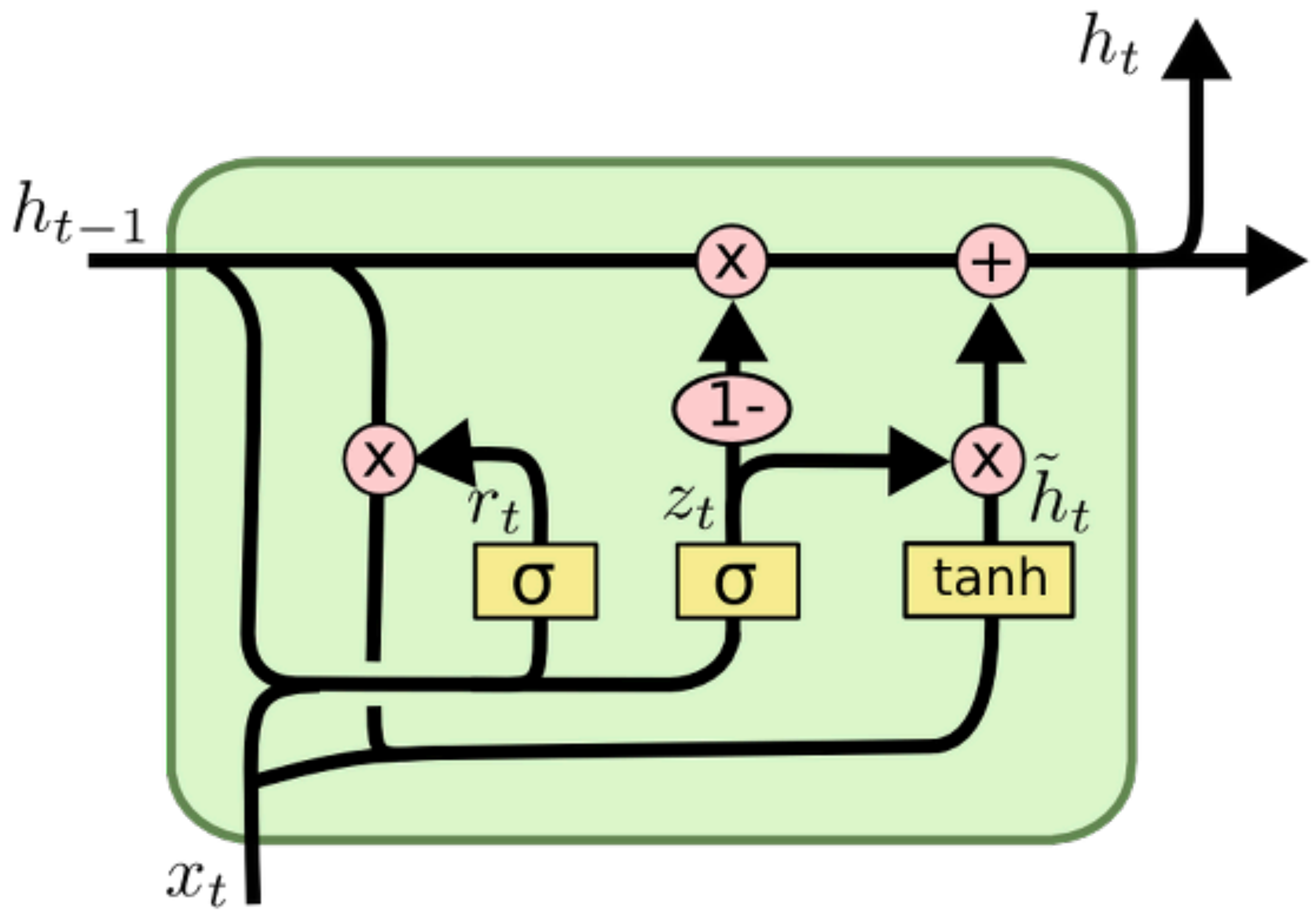


http://deeplearning.stanford.edu/wiki/index.php/Feature_extraction_using_convolution

RNN layer



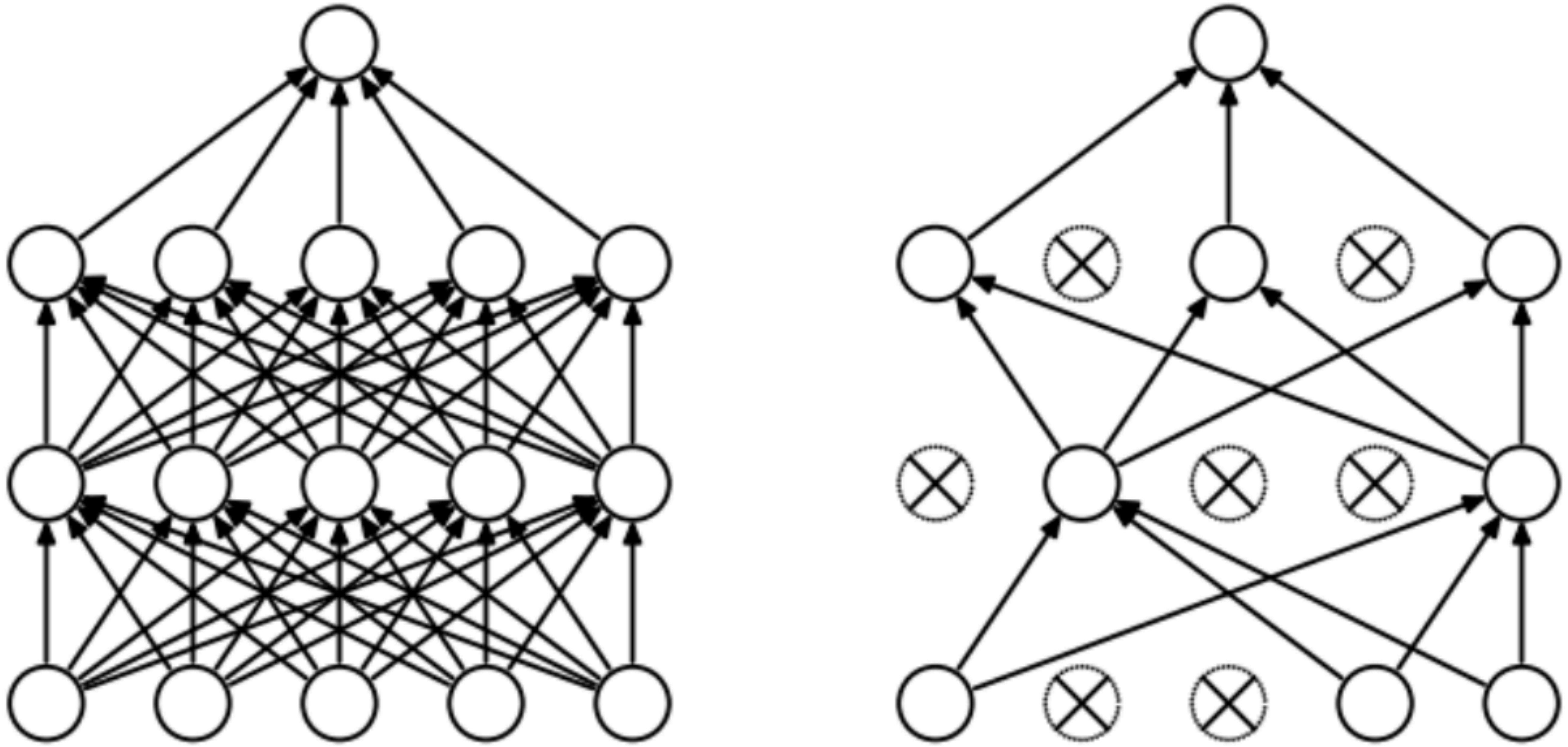
RNN



LSTM

Dropout Layer

- Dropout rate를 바탕으로 랜덤하게 뉴런을 비활성화



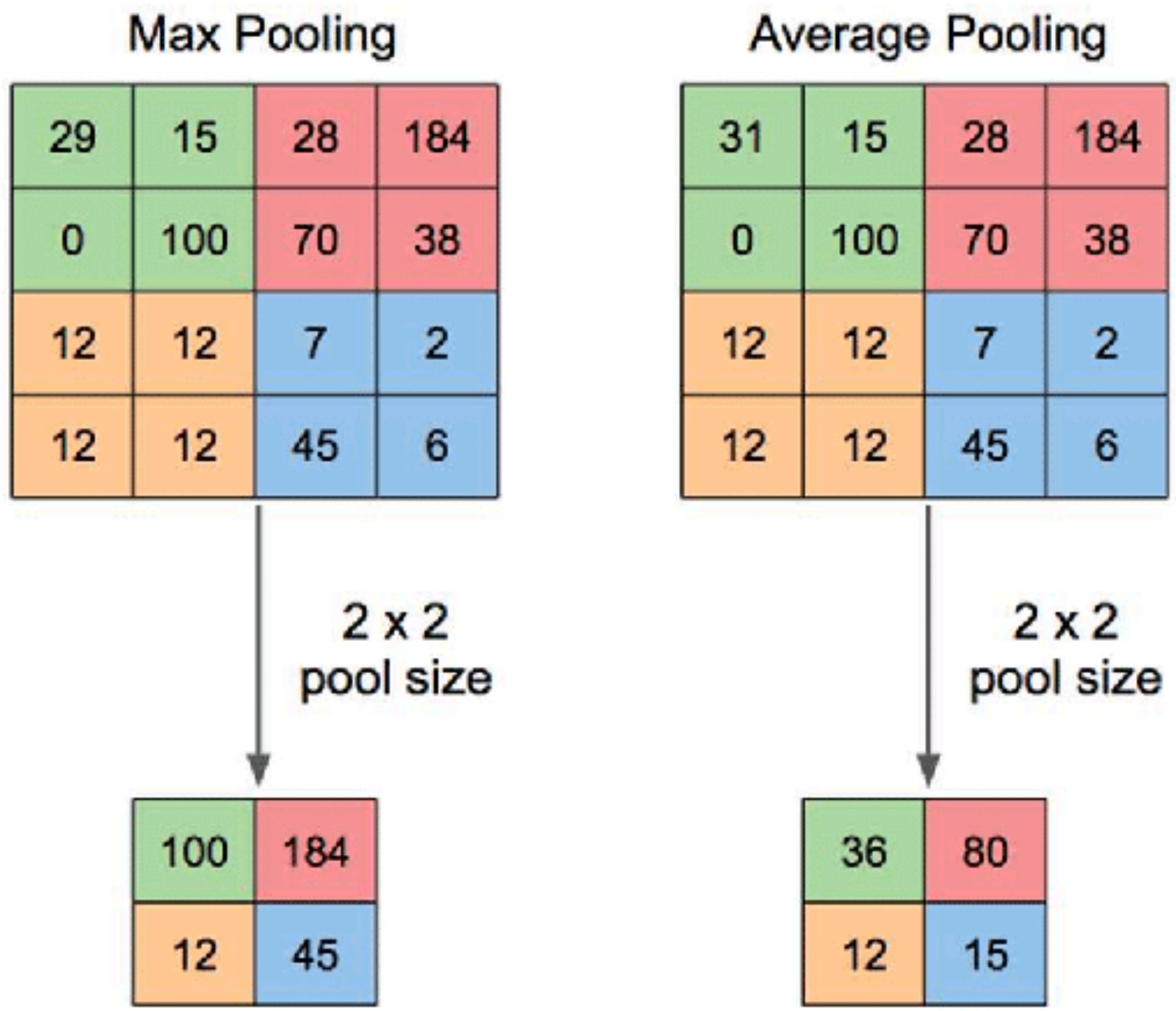
(a) Standard Neural Net (b) After applying dropout.

Pooling

- MaxPooling : 각 채널의 구간별로 최대값을 샘플링

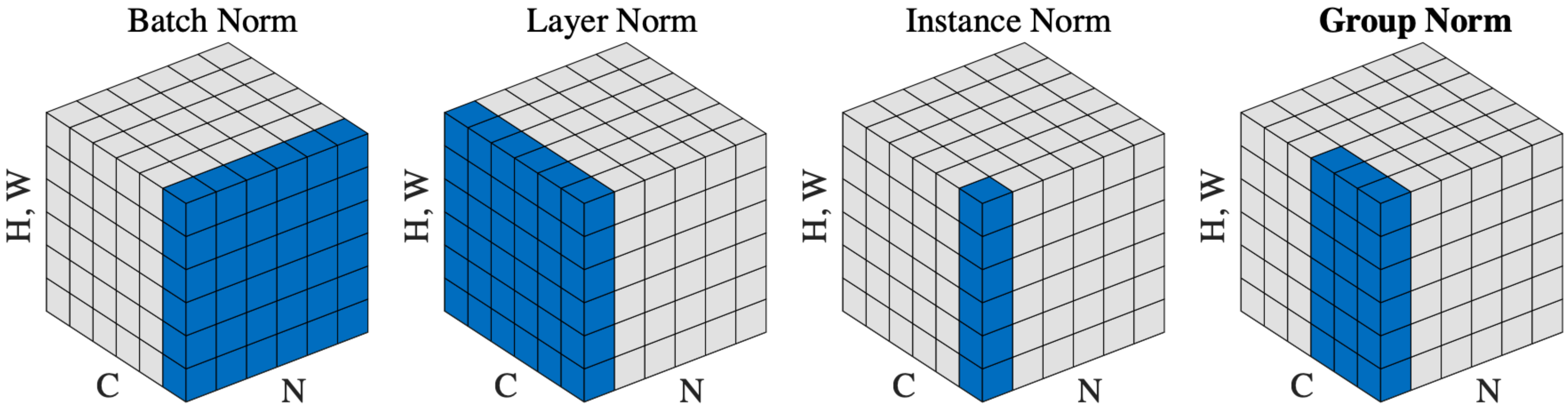
- AvgPooling : 각 채널의 구간별로 평균값을 샘플링

- GlobalPooling : 채널별로 평균 또는 최대값을 샘플링



Normalization

- Batch / Layer / Instance / Group normalization

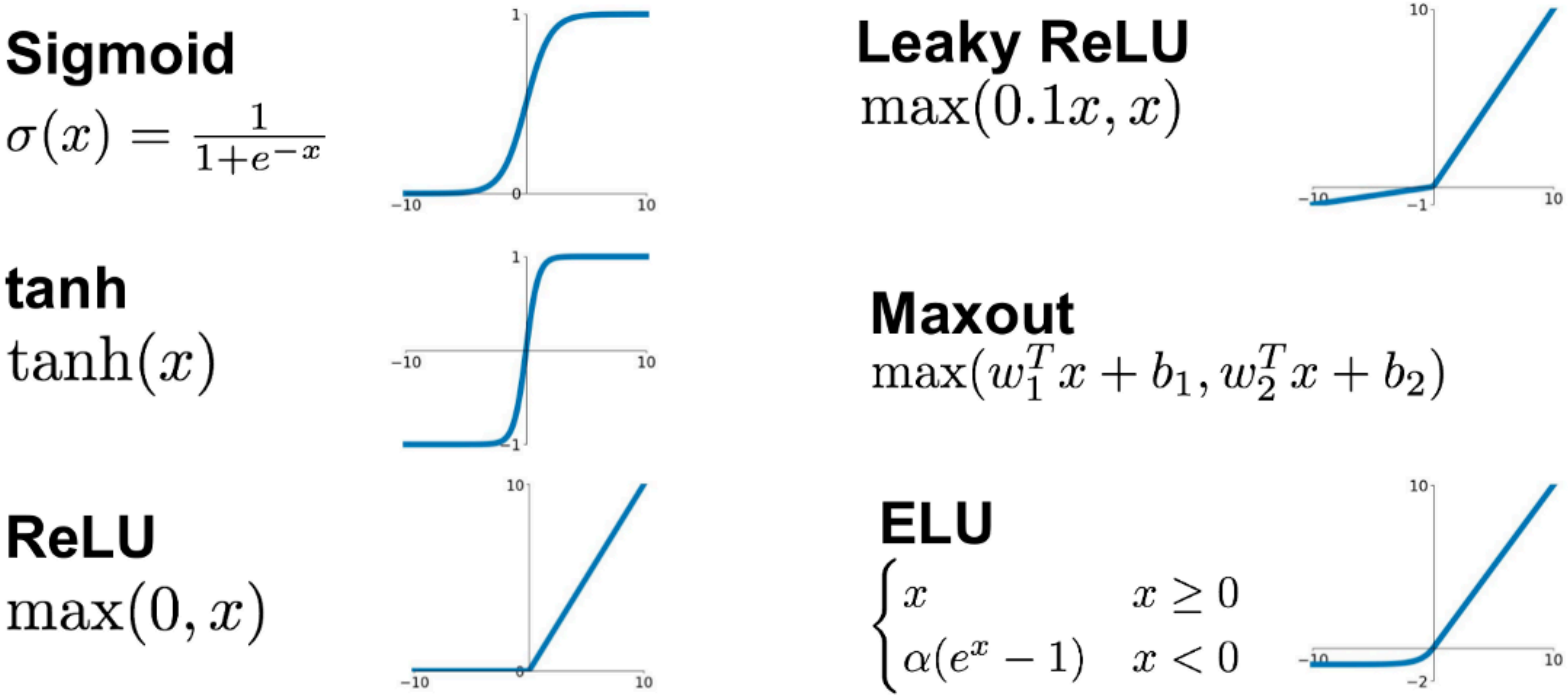


Padding

- 데이터의 양 끝단에 특정 값들을 채워주는 기능
- Convolution layer의 출력값 형태를 맞춰줄 수 있음.
- Zero padding : 0 0 [1, 2, 3, 4] 0 0
- Reflection padding : 3 2 [1, 2, 3, 4] 3 2
- Replication padding : 1 1 [1, 2, 3, 4] 4 4
- Constant padding : a a [1, 2, 3, 4] b b

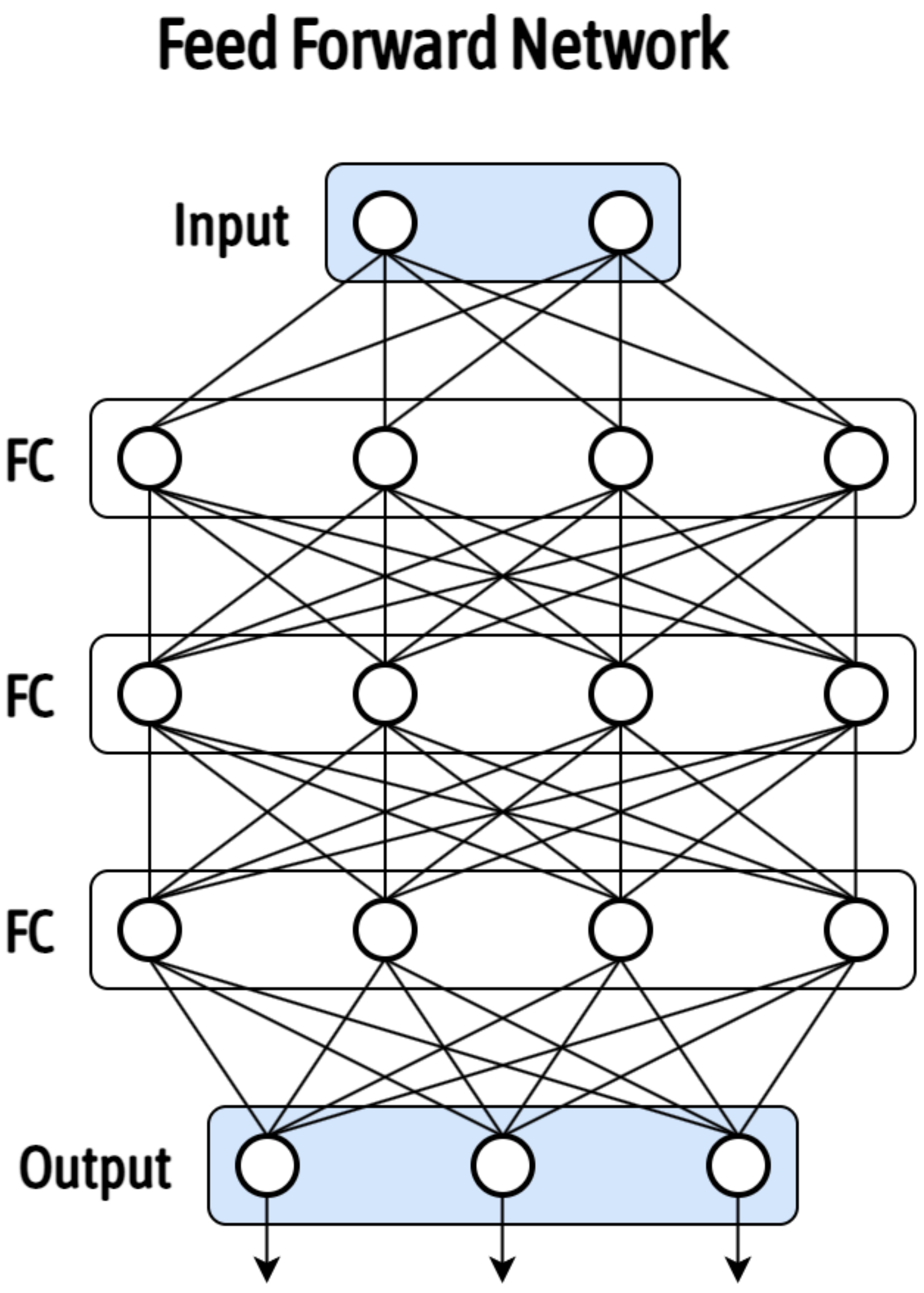
Activation functions

- Sigmoid,
- Tanh
- ReLU
- Leaky ReLU
- ELU
- GELU



다양한 레이어의 조합

- Dense
- Recurrent
- Convolution
- Activation function
- Pooling
- Dropout
- Normalization
- Embedding



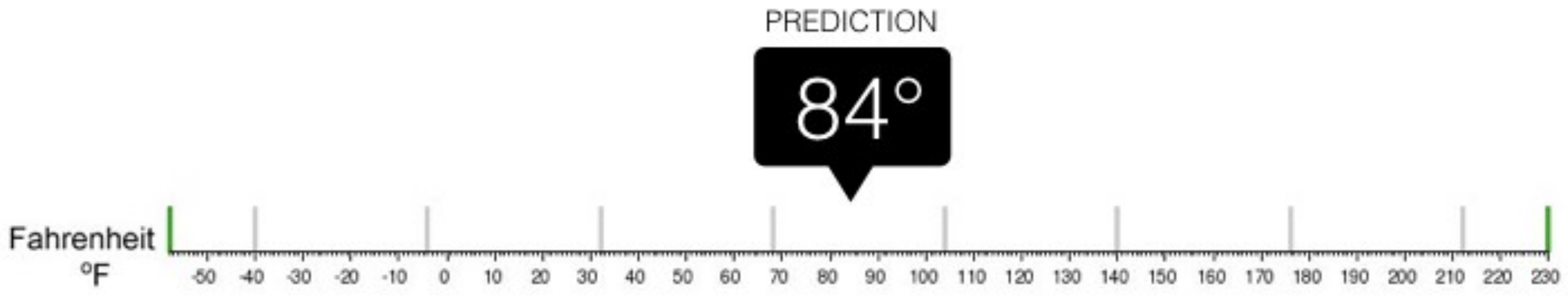
https://wikidocs.net/165167

인공신경망 = 비선형 함수

- 어떠한 복잡한 모델을 구현하더라도 입력과 출력 관점에서 신경망은 비선형 함수임.
- 그리고 함수의 형태가 신경망의 학습가능한 웨이트에 의해 결정됨.
- 학습은 주어진 태스크를 더 잘하기 위한 방향으로 이루어짐.

기본적인 두가지 태스크

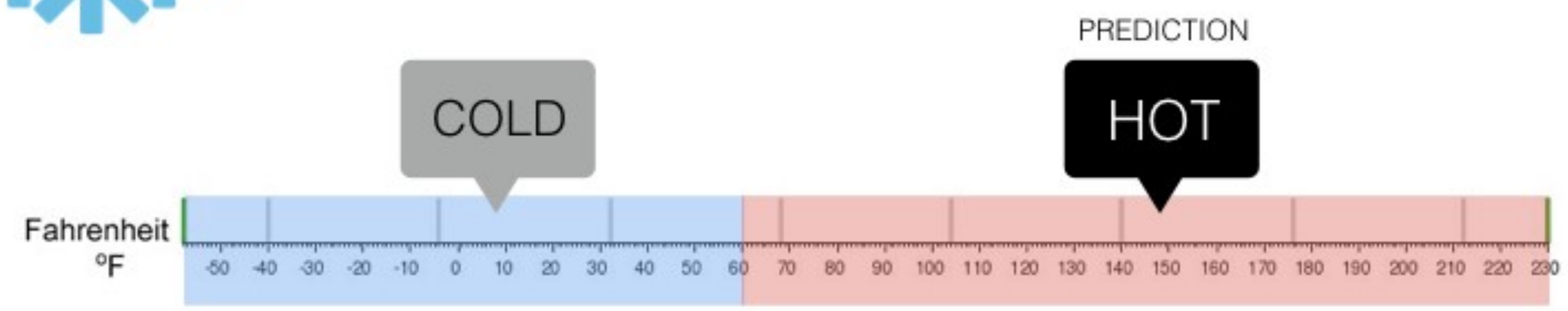
Regression
What is the temperature going to be tomorrow?



Minimize Squared errors

$$\frac{1}{N}\sum_{i}^{N}(y_i - \hat{y}_i)^2$$

Classification
Will it be Cold or Hot tomorrow?



Minimize cross entropy

$$-\sum_{c \in C} y_c \log(\hat{y}_c)$$

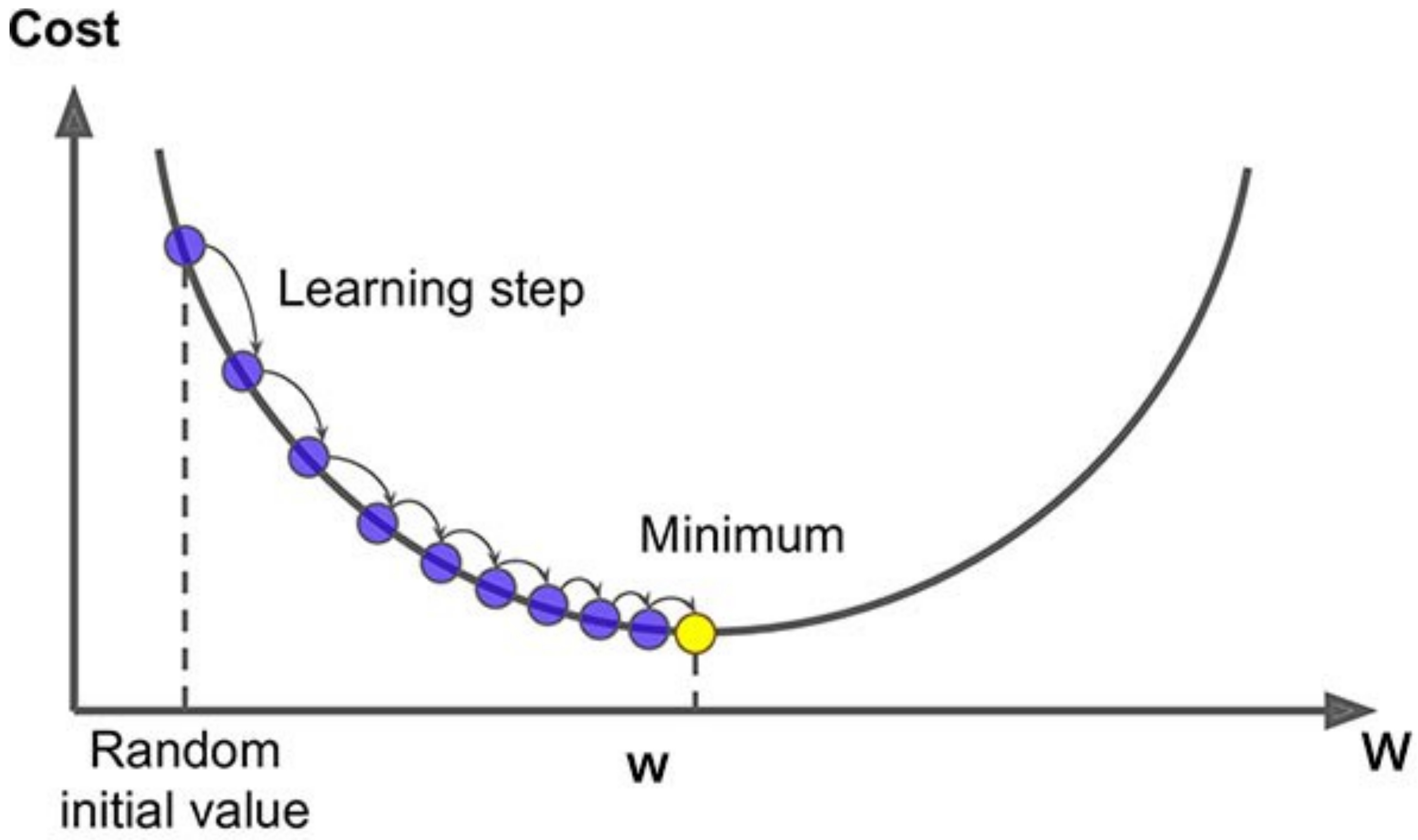
모델과 목표가 정해지면.

- 모델 : 인공신경망 모델
- 목표 : Loss, Cost function
- 학습을 진행해야 함. 즉 인공신경망의 weight parameter 학습.
  - Gradient descent method : general approach for iterative optimization
  - Error backpropagation : way to update parameters of inner layers

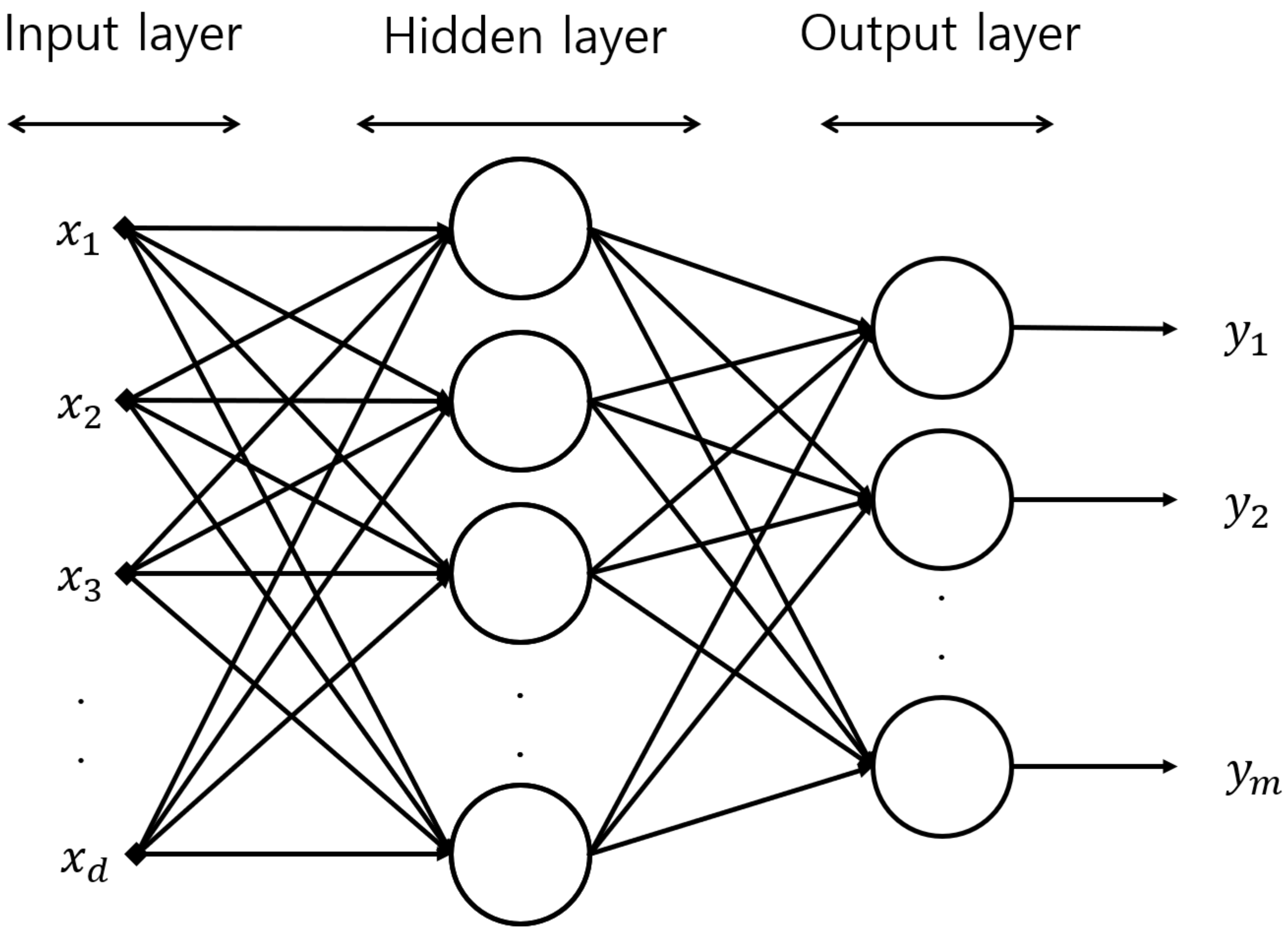
경사하강법

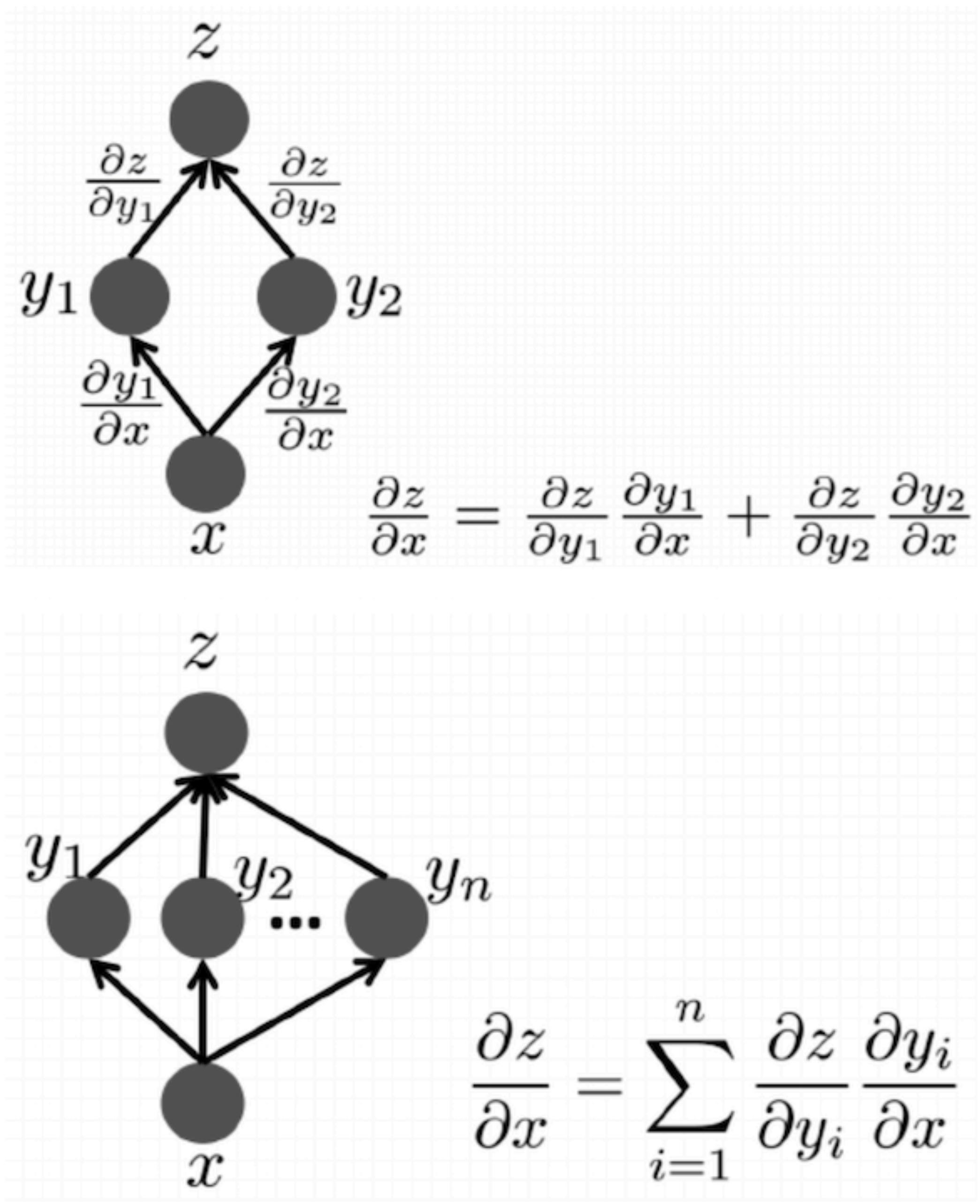
1. $w_0 \rightarrow w_1 \rightarrow w_2 \rightarrow \cdots \rightarrow w_t$

2. $w_{t+1} = w_t - \gamma \dfrac{\partial L}{\partial w}$



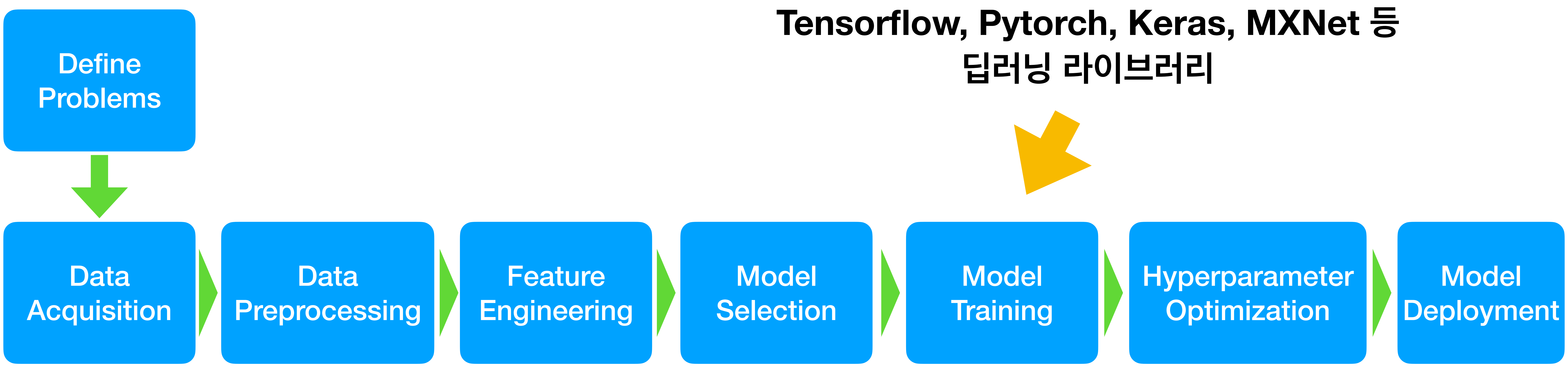
오류 역전파





Rumelhart, David E., Geoffrey E. Hinton, and Ronald J. Williams. "Learning representations by back-propagating errors." *nature* 323.6088 (1986): 533-536.

머신 러닝 모델 개발 프로세스



Keras를 통한 신경망 구성

```
# 모델 구성
model = Sequential()
model.add(Dense(512, activation = 'relu', input_shape = (28*28,)))
model.add(Dense(10, activation = 'softmax'))

# 모델 컴파일
model.compile(optimizer = 'rmsprop',
              loss = 'categorical_crossentropy',
              metrics = ['accuracy'])

# 모델 훈련
model.fit(train_images, train_labels, epoch = 5, batch_size = 128)

# 모델 평가
test_loss, test_acc = model.evaluate(test_images, test_labels)
```

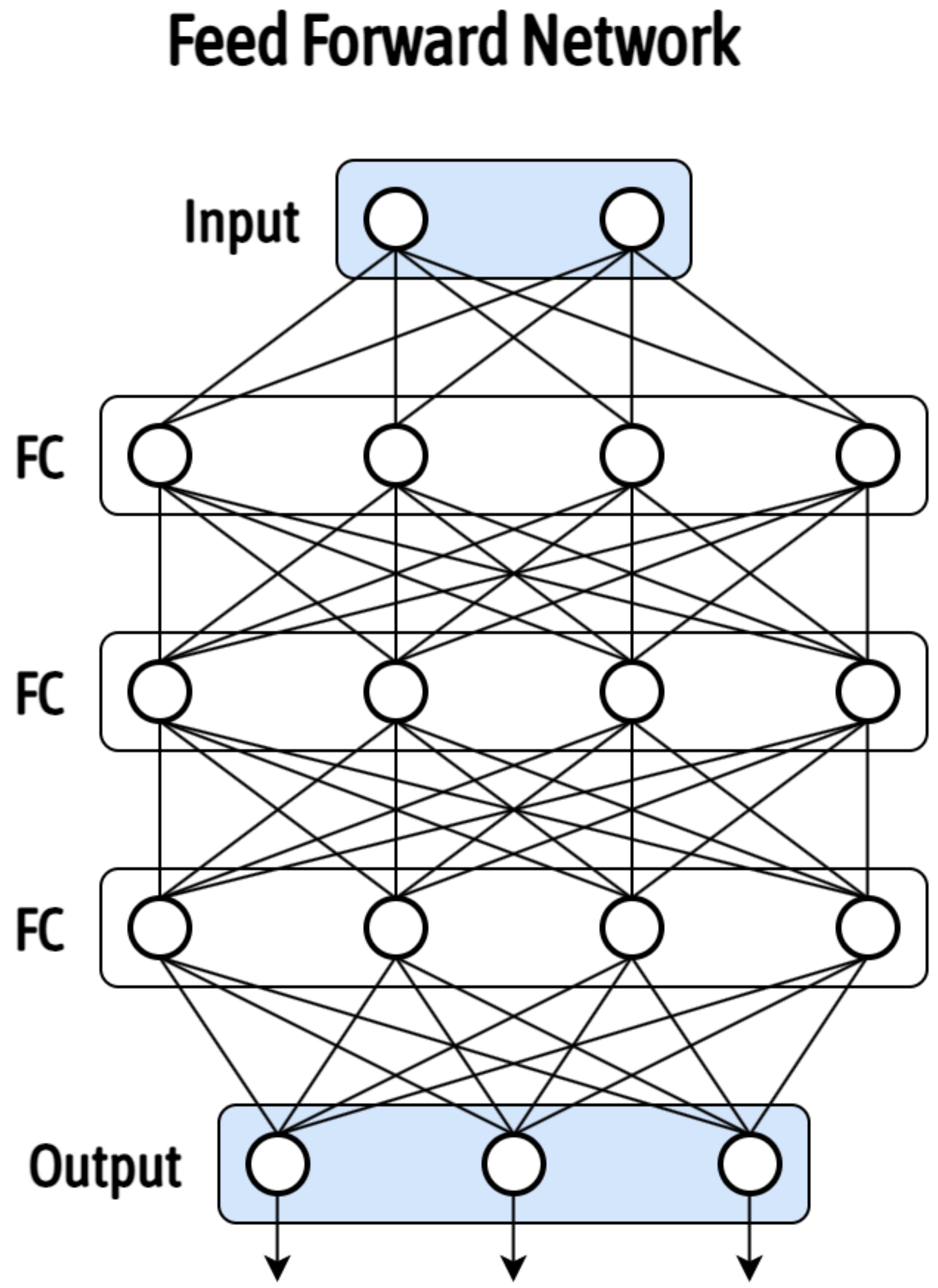
Chapter 2.
AutoKeras

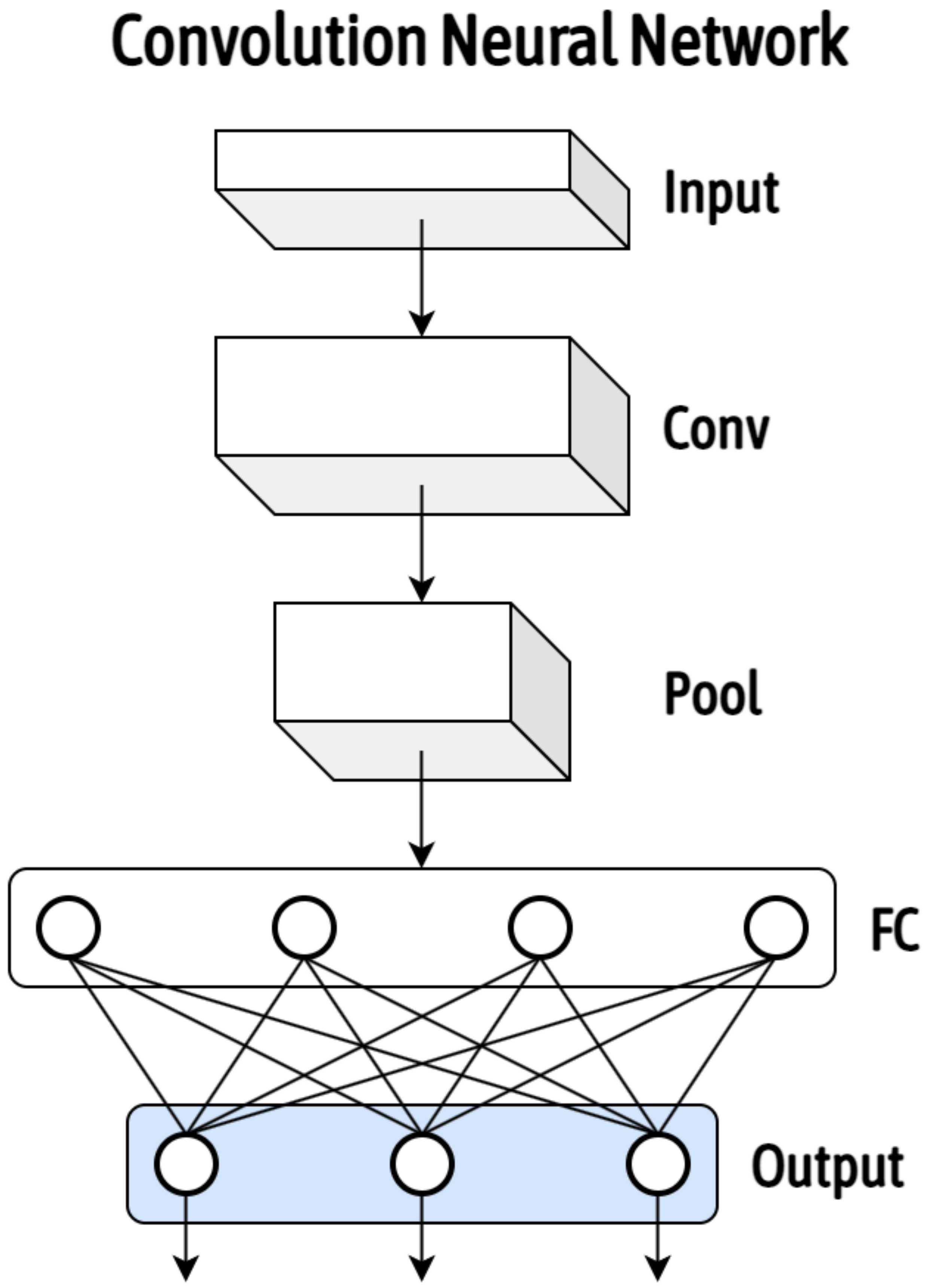
Dense layer를 사용했을때

```python
tf.keras.layers.Dense(
    units,
    activation=None,
    use_bias=True,
    kernel_initializer="glorot_uniform",
    bias_initializer="zeros",
    kernel_regularizer=None,
    bias_regularizer=None,
    activity_regularizer=None,
    kernel_constraint=None,
    bias_constraint=None,
    **kwargs
)
```

- Unit : neuron의 수 = 출력 차원
- Activation : 활성함수.
  e.g., ReLU, Sigmoid, SELU, Tanh, etc
- Initializer : weight 초기화 관련
- 레이어 수 등

간단한 형태의 신경망





https://wikidocs.net/165167

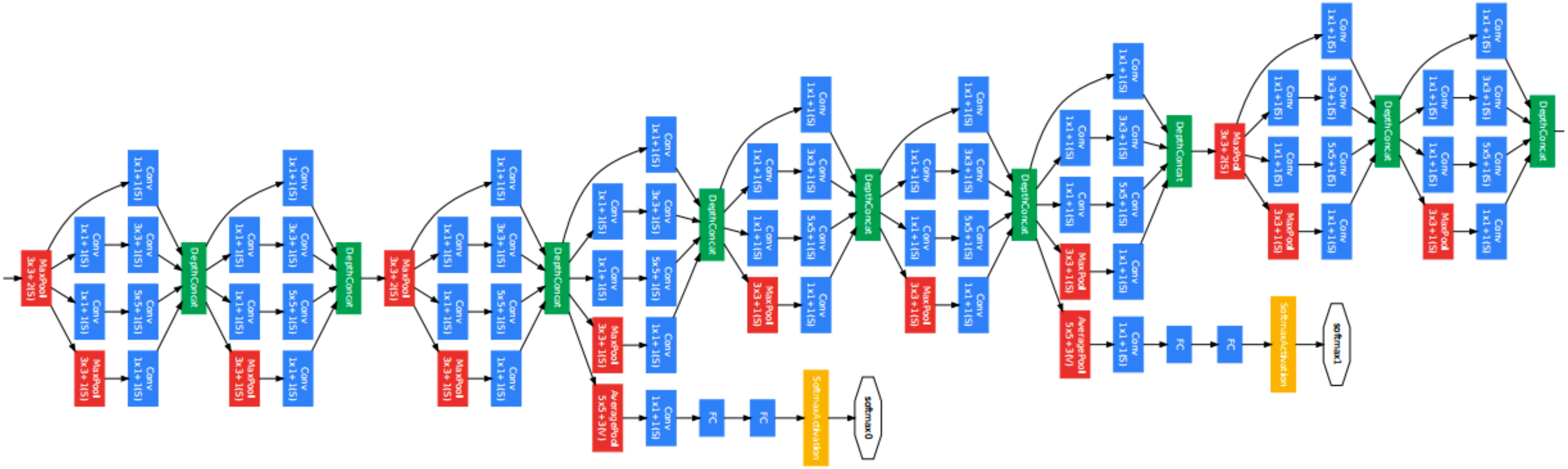
Keras를 통한 신경망 구성

```
# 모델 구성
model = Sequential()
model.add(Dense(512, activation = 'relu', input_shape = (28*28,)))
model.add(Dense(10, activation = 'softmax'))

# 모델 컴파일
model.compile(optimizer = 'rmsprop',
              loss = 'categorical_crossentropy',
              metrics = ['accuracy'])

# 모델 훈련
model.fit(train_images, train_labels, epoch = 5, batch_size = 128)

# 모델 평가
test_loss, test_acc = model.evaluate(test_images, test_labels)
```

CNN 예시

```
model = Sequential()
model.add(Conv2D(32, (3, 3), activation='relu', input_shape=(64, 64, 3)))
# 32개의 3x3 필터를 가진 컨볼루션 레이어
model.add(MaxPooling2D((2, 2)))
# 2x2 크기의 맥스 풀링 레이어
model.add(Conv2D(64, (3, 3), activation='relu'))
# 64개의 3x3 필터를 가진 컨볼루션 레이어
model.add(MaxPooling2D((2, 2)))
# 2x2 크기의 맥스 풀링 레이어
model.add(Conv2D(128, (3, 3), activation='relu'))
# 128개의 3x3 필터를 가진 컨볼루션 레이어
model.add(MaxPooling2D((2, 2)))
# 2x2 크기의 맥스 풀링 레이어
model.add(Flatten())
# 1차원으로 평탄화
model.add(Dense(128, activation='relu'))
# 128개의 뉴런을 가진 fully connected layer
model.add(Dense(10, activation='softmax'))
# 10개의 클래스에 대한 softmax 출력
```

보다 복잡한 신경망



Google Inception architecture

Neural Architecture Search

- 인공신경망의 구조 설계 과정을 자동화하여 최적의 구조를 찾는 방법.

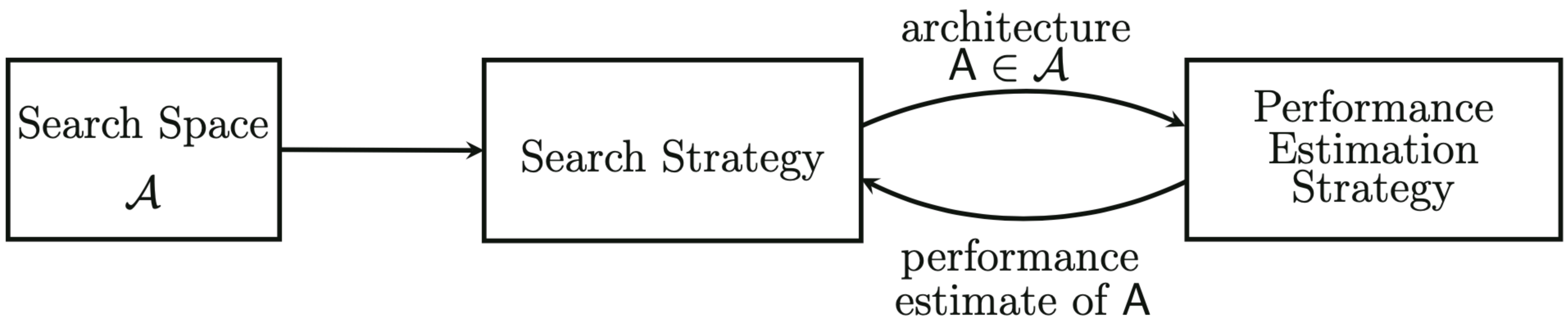
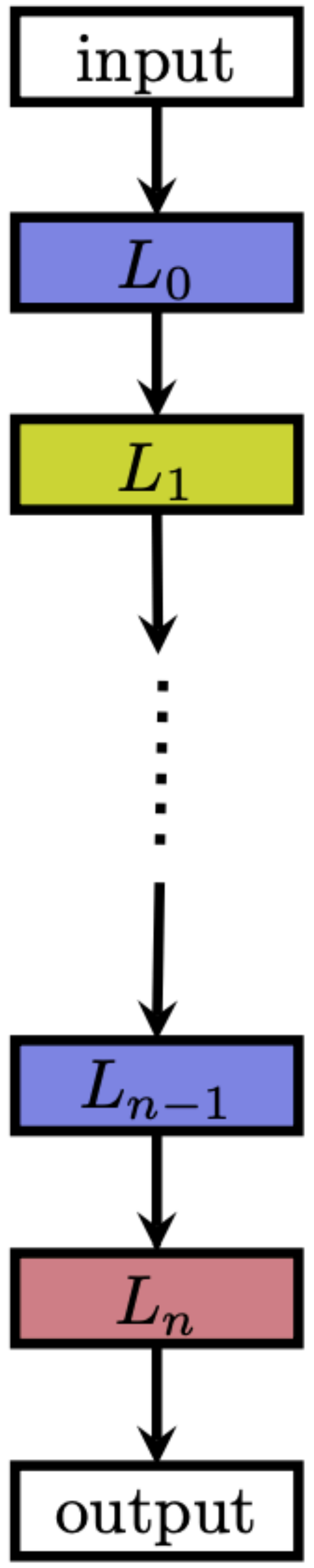
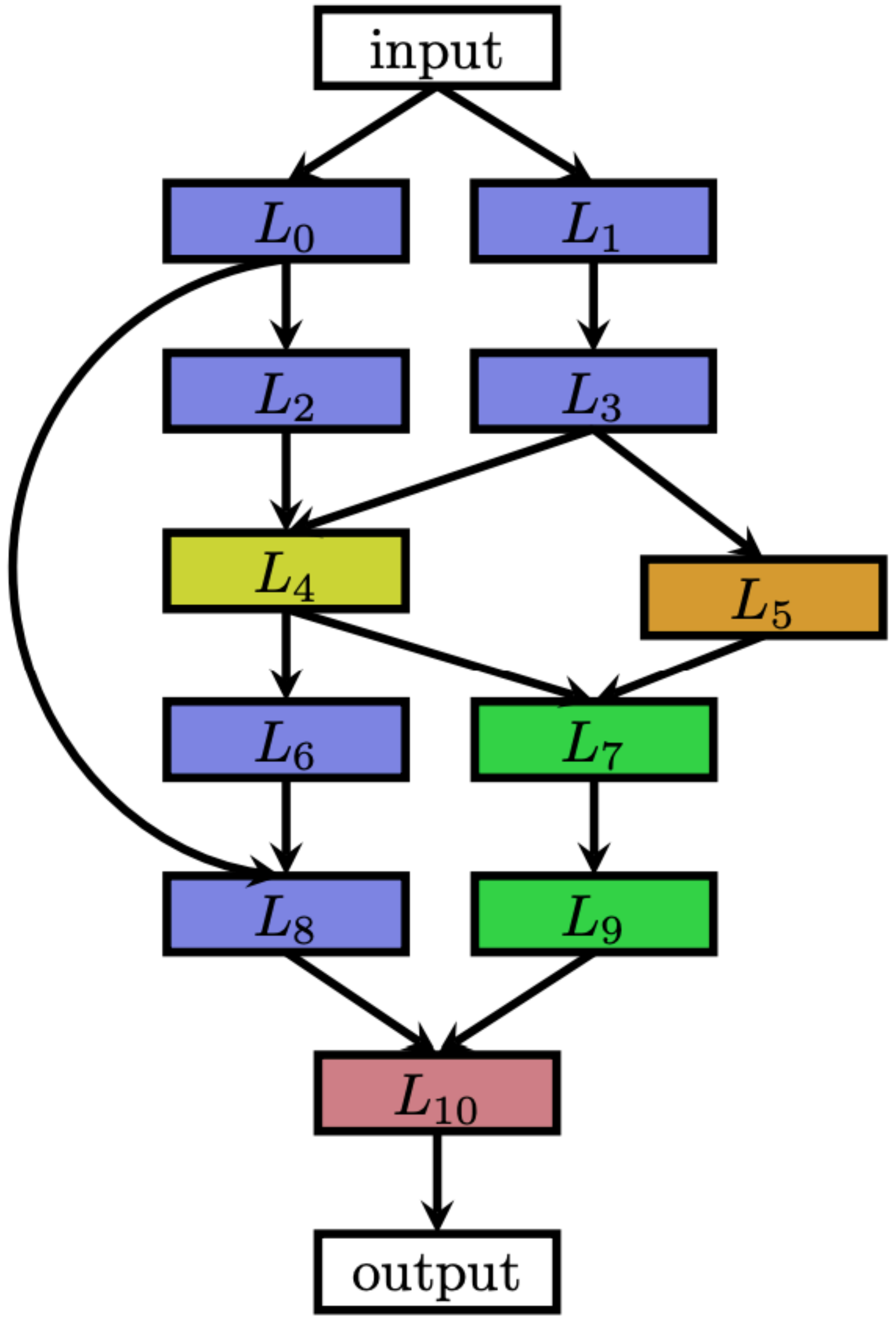


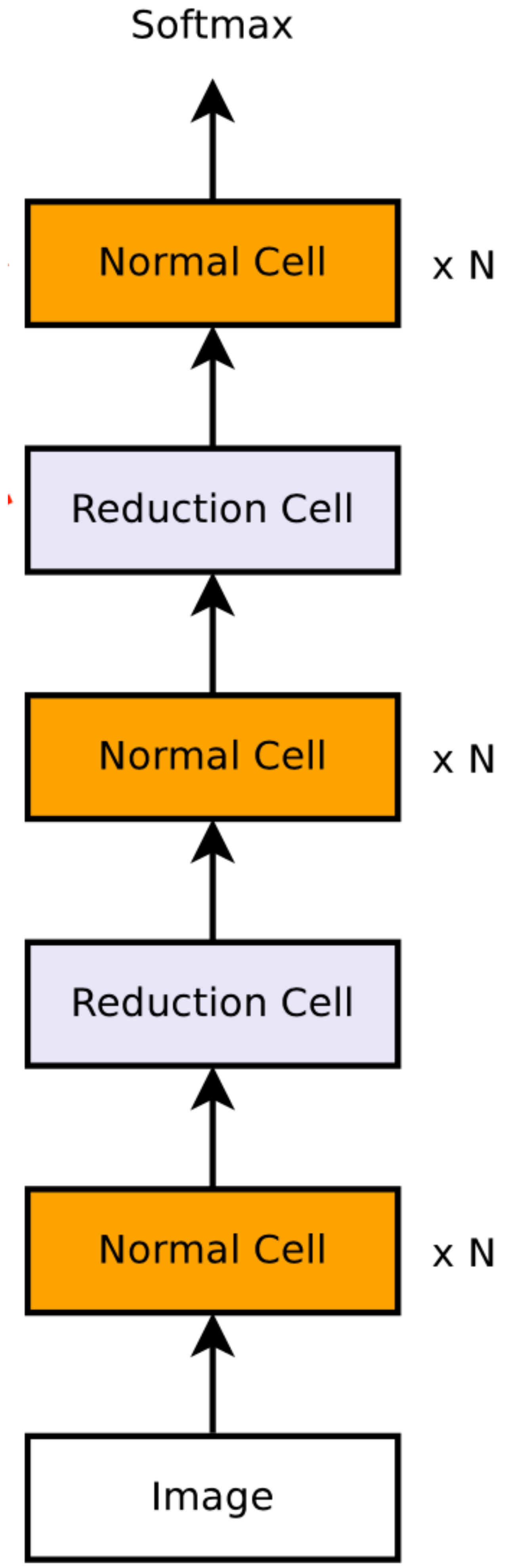
Fig. 3.1 Abstract illustration of Neural Architecture Search methods. A search strategy selects an architecture A from a predefined search space $\mathcal{A}$. The architecture is passed to a performance estimation strategy, which returns the estimated performance of A to the search strategy

Search Space

- Chain-structured NN:
  - 레이어 수, 레이어 타입, 레이어 파라미터
- Multi-branch NN
- Cell-based approach
  - Normal cell (차원유지), Reduction cell (차원감소)
  - 셀단위 구조 탐색 후 쌓기



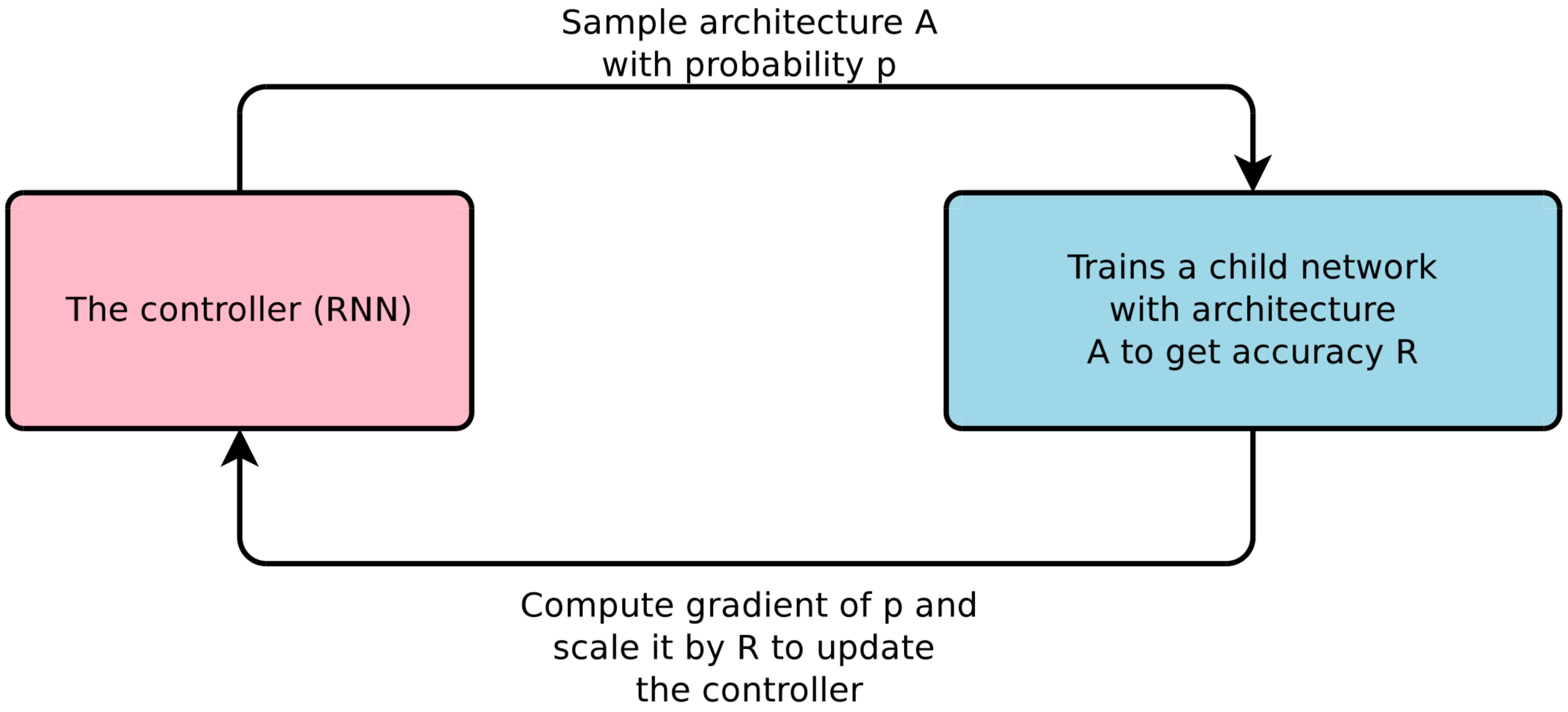




Search Strategy

- Random search
- Bayesian optimization: 베이지안 최적화를 활용하여 네트워크 구조 탐색
- Reinforcement learning: 에이전트의 액션 = 네트워크 구조 선택, 보상 = 모델 성능
- Evolutionary methods: 유전알고리즘을 바탕으로 모델 풀에서 교차/변이 수행
- Gradient-based methods: Discrete search space에 대한 relaxation을 통해 미분 가능한 구조로 만들어 Gradient descent를 통해 최적 구조 탐색

Neural Architecture Search with Reinforcement Learning



Neural Architecture Search with Reinforcement Learning

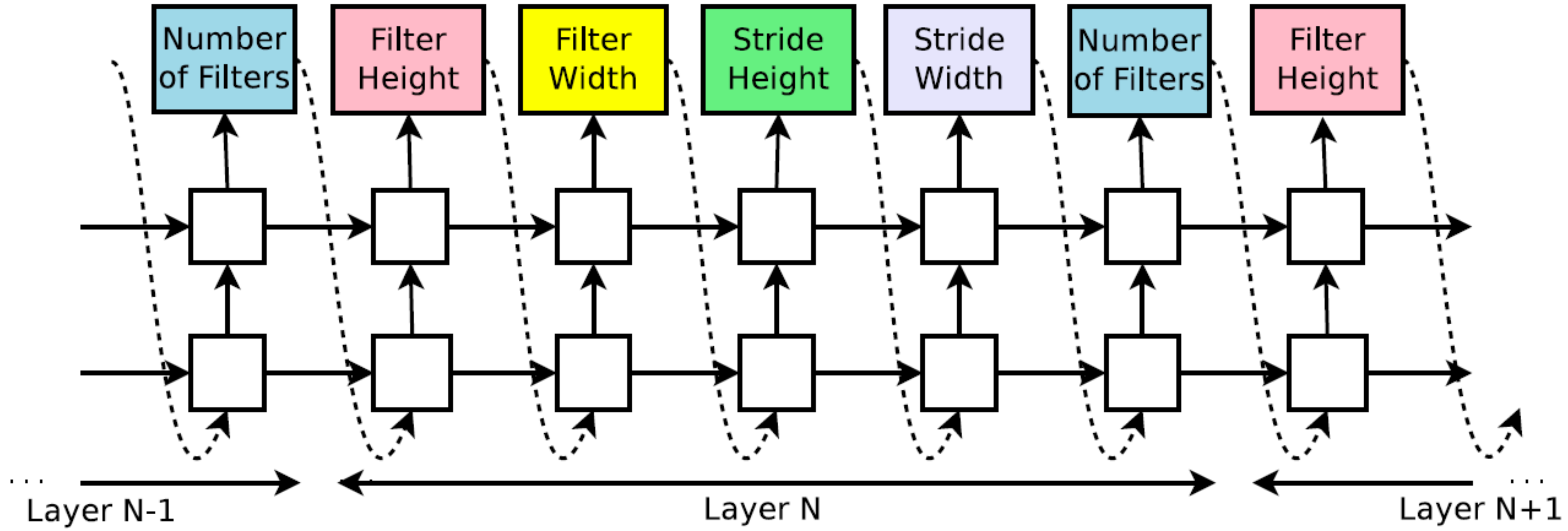


Figure 2: How our controller recurrent neural network samples a simple convolutional network. It predicts filter height, filter width, stride height, stride width, and number of filters for one layer and repeats. Every prediction is carried out by a softmax classifier and then fed into the next time step as input.

NAS with Evolutionary Computation

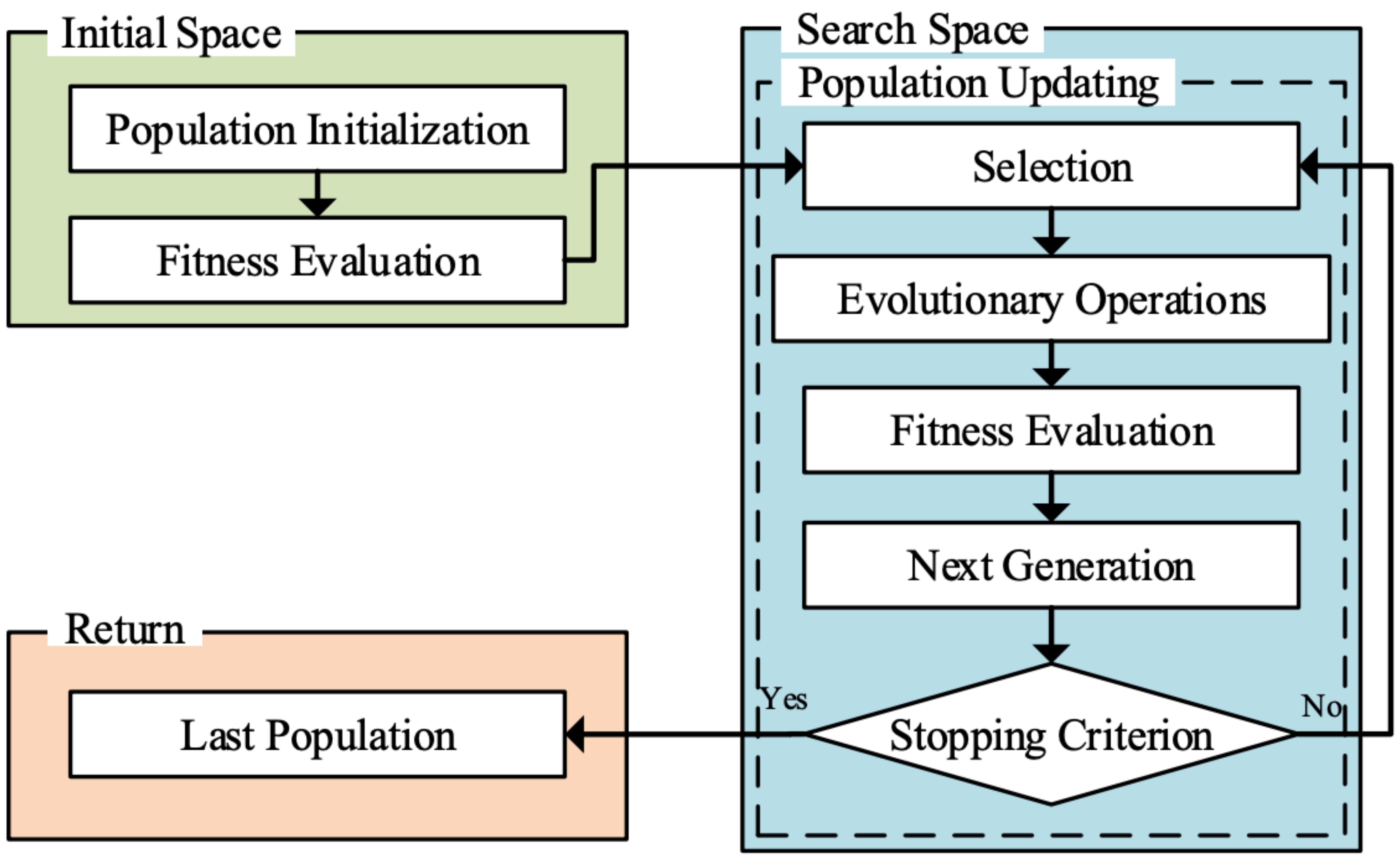


Fig. 2. The flowchart of a common ENAS algorithm.

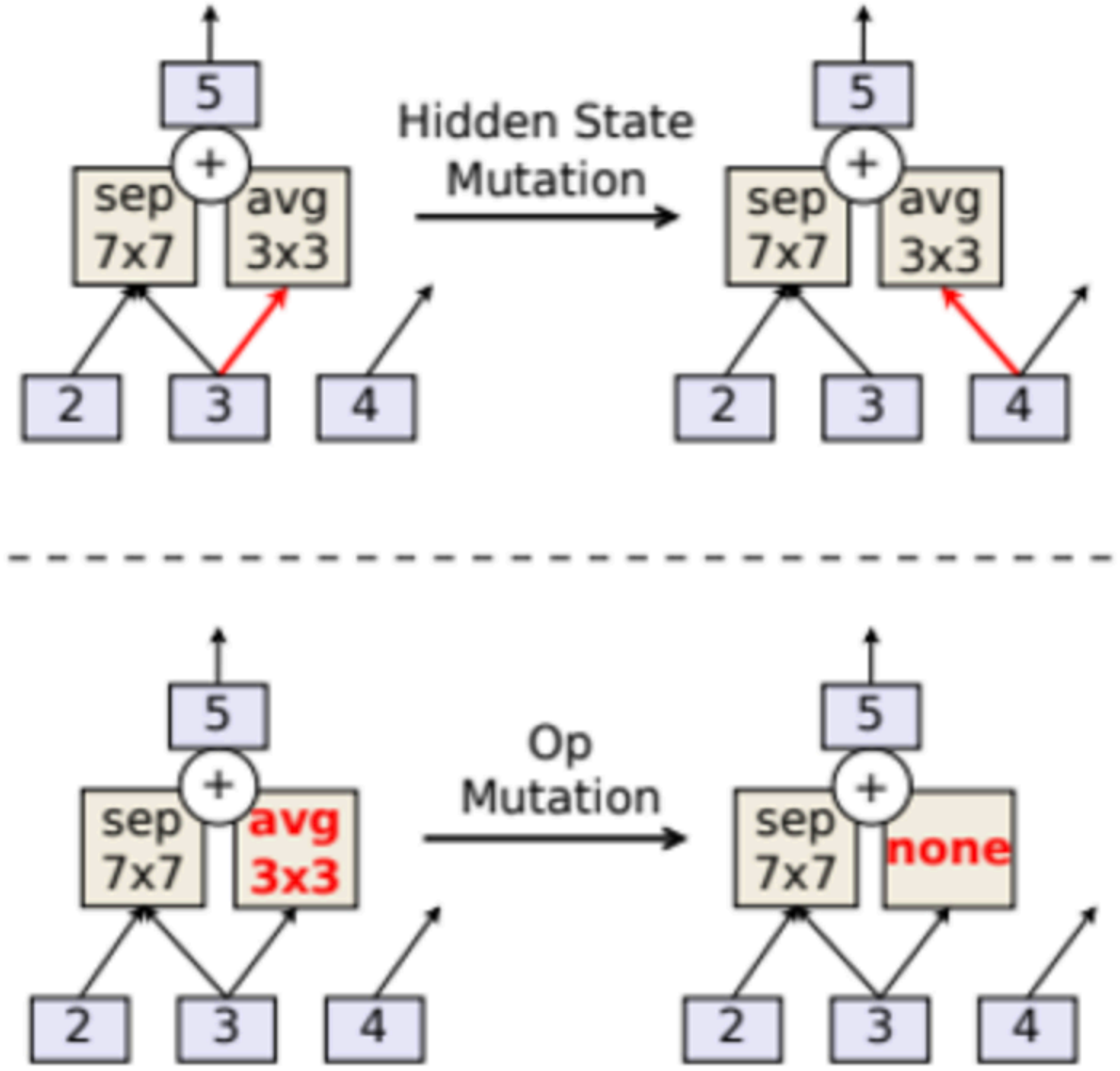


Figure 2: Illustration of the two mutation types.

AutoKeras

- Keras 기반 AutoML 시스템
- Bayesian optimization 기반 NAS 수행
- 다양한 태스크에 대한 간단한 인터페이스 제공
  - Image Classification/Regression
  - Text Classification/Regression
  - Structured Data Classification/Regression

In AutoKeras

```
# Initialize the structured data classifier.
clf = ak.StructuredDataClassifier(
    overwrite=True, max_trials=3
)  # It tries 3 different models.
# Feed the structured data classifier with training data.
clf.fit(
    # The path to the train.csv file.
    train_file_path,
    # The name of the label column.
    "survived",
    epochs=10,
)
# Predict with the best model.
predicted_y = clf.predict(test_file_path)
# Evaluate the best model with testing data.
print(clf.evaluate(test_file_path, "survived"))
```

감사합니다.