Stochastic Gradient Descent Optimization

학번: 20191602 배용하, 수치해석 3분반 김상철 교수님

목차

1. SGD의 개요 및 동작 원리
   1.1. Gradient Descent와 SGD의 정의
   1.2. Gradient Descent와 SGD의 장단점
2. SGD의 동작 코드 및 단위 테스트
   2.1. Keras를 이용한 SGD 구현 방법 및 코드
   2.2. Keras를 이용한 SGD 단위 테스트
   2.3. Keras를 이용한 SGD 시각화
3. SGD의 구체화
   3.1. Numpy를 이용한 SGD 구체화
4. 구체화한 모듈의 단위 테스트
   4.1. Numpy를 이용한 SGD 단위 테스트
5. Rosenbrock Function을 통한 SGD 성능 검증

---

1. SGD의 개요 및 동작 원리

Stochastic Gradient Descent(SGD) 를 이야기하기 전에, Gradient Descent에 대해서 먼저 이야기합니다.

1.1. Gradient Descent와 SGD의 정의

기존의 Gradient Descent에서의 값 변화는 아래 식과 같습니다.

$$\theta = \theta - \eta \nabla_\theta J(\theta)$$

η는 learning rate이면서 step size이다.

여기서, 오차함수 $J(\theta)$를 계산할 때, 모든 Training Set를 사용한다면, **Batch Gradient Descent**입니다.

하지만, 모든 Training Set이 아니라 일부의 Training Set를 사용한다면, **Mini-Batch Gradient Descent**라고 할 수 있습니다.

Training Set에서 한 개의 데이터만을 추출한다면, **Stochastic Gradient Descent**라고 할 수 있습니다.

엄격하게 따지자면, SGD와 Mini-Batch Gradient Descent는 다른 알고리즘입니다. (참조: https://towardsdatascience.com/batch-mini-batch-stochastic-gradient-descent-7a62ecba642a (https://towardsdatascience.com/batch-mini-batch-stochastic-gradient-descent-7a62ecba642a))

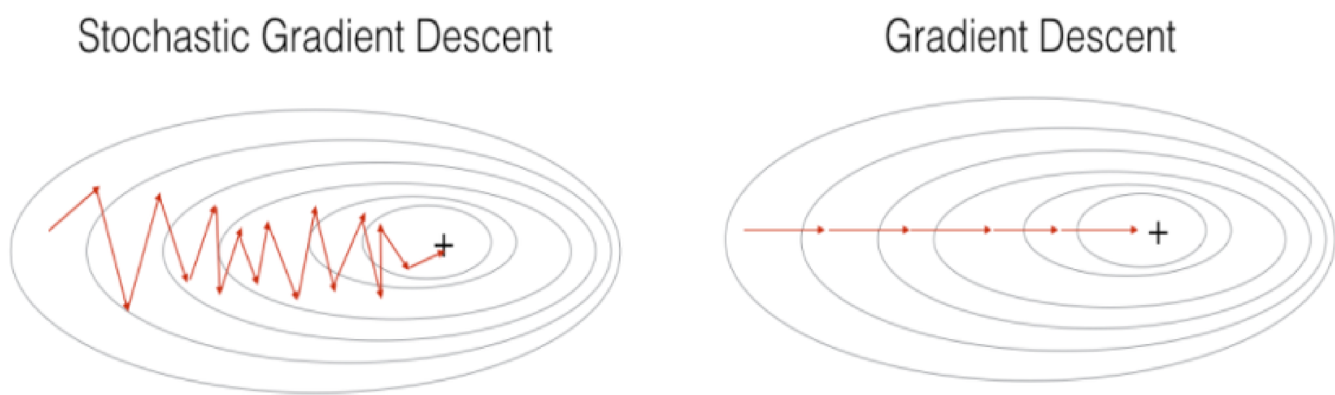
여기서는 SGD에 대해서 다루고 있으므로, Mini-Batch Gradient Descent의 설명은 생략합니다.

1.2. Gradient Descent와 SGD의 장단점

Gradient Descent는 Training Set를 전부 사용하므로, 속도는 느려질 수 있지만, 안정적으로 Optimal로 수렴한다.

SGD는 Training Set의 일부만 사용하므로, Optimal에 불안정하게 수렴할 수 있다.
하지만, Gradient Descent처럼 1 step에 모든 Training Set를 다 탐색하고 업데이트하는 것이 아니라, 1개의 Training Data만 가지고 업데이트하기 때문에, 1 step를 진행하는 속도는 Gradient Descent에 비해 SGD가 빠르다.

Gradient Descent는 안정적인 만큼, Local Optima(국소 최적해)에 빠지기 쉽지만, SGD는 변동성이 크기 때문에 Local Optima에 어느정도 빠지지 않는다.
하지만, Local Optima에 빠지지 않는 만큼 Global Optima(전역 최적해)를 탐색하는 것에 대해서 실패할 수도 있으니 주의해서 learning rate를 설정해야 합니다.
즉, SGD는 변동성이 강하므로 Global Optima에 도달하는 것 역시 Local Optima처럼 쉽게 도달하지 못하기 때문에 Original SGD 대신 변형 알고리즘을 사용합니다.



결국은 SGD(Naive Stochastic Gradient Descent)는 Global Optimal에 도달하는 속도는 느리고, 성능이 낮을 수 밖에 없다.

그러한 단점을 보안한 SGD의 변형 알고리즘으로 Momentum, RMSProp, Adam 등이 있습니다.
https://emiliendupont.github.io/optimization-rosenbrock/ (https://emiliendupont.github.io/optimization-rosenbrock/) 를 통해 SGD, Momentum, RMSProp, Adam의 시각화 과정을 볼 수 있습니다.

2. SGD의 동작 코드 및 단위 테스트

2.1. Keras를 이용한 SGD 구현 방법 및 코드

아래 코드에서는 Keras, Numpy, scikit-learn을 이용한 SGD 구현 코드를 나타내고 있습니다.

아래 코드에서, ModuleError가 발생할 경우 해결하는 방법

```
pip install numpy==1.18
pip install scipy==1.1.0
pip install scikit-learn==0.21.3
```

In [72]:

```
from sklearn.datasets import make_regression
import numpy as np
import tensorflow as tf

class KerasSGD:

    def __init__(self, n_samples, learning_rate = 0.001):
        self.learning_rate = learning_rate
        self.n_samples = n_samples
        self.X, self.Y = self.DataGeneration()
        self.Y = np.expand_dims(self.Y, axis = 1)
        self.model = self.modelGeneration()

    def DataGeneration(self):
        return make_regression(n_samples = self.n_samples,
                               n_features = 1,
                               bias = 10.0,
                               noise = 10.0, random_state = 2)

    def modelGeneration(self):

        # variables definition
        model = tf.keras.Sequential()
        linear = tf.keras.layers.Dense(1, activation = 'linear')
        optimizer = tf.keras.optimizers.SGD(lr = self.learning_rate)

        model.add(linear)
        model.compile(loss = 'mse',
                      optimizer = optimizer,
                      metrices = ['mse'])

        return model

    def Fitting(self, maxsteps):
        self.X_test = self.X[:int(self.n_samples / 4 + 1)]
        self.Y_test = self.Y[:int(self.n_samples / 4 + 1)]
        self.X_train = self.X[int(self.n_samples / 4 + 1):]
        self.Y_train = self.Y[int(self.n_samples / 4 + 1):]
        return self.model.fit(self.X_train, self.Y_train, batch_size = 10,
                       epochs = maxsteps, shuffle = True, validation_data = (self.X_
test, self.Y_test))

    def evaluateTestData(self):
        return self.model.evaluate(self.X_test, self.Y_test)
```

KerasSGD Class

KerasSGD 클래스는 선형 회귀(Linear Regression)을 `tf.keras.optimizers.SGD` 로 구현하는 과정을 보여주고 있습니다.

n_samples는 Sampling Data의 크기를 의미합니다.

DataGeneration는 n_samples만큼의 X, Y의 데이터를 랜덤하게 생성합니다. 여기서, make_regression()은 선형회귀 데이터를 생성합니다.
그리고, `self.Y = np.expand_dims(self.Y, axis = 1)` 의 의미는 무엇일까요?

X의 shape와 Y의 shape를 맞춰주기 위해서 Dimension를 늘리는 것입니다. `[100] -> [100, 1]`

modelGeneration는 keras linear model를 만들고, SGD optimizer를 정의합니다.
lr은 learning rate를 의미합니다. 즉, η가 lr입니다. 그렇게 모델을 설계완료합니다.

Fitting은 X와 Y를 훈련 데이터와 테스트 데이터로 나뉘어 피팅하는 과정입니다. 훈련 데이터는 75%, 테스트 데이터는 25%로 나뉘어 피팅합니다. epochs는 Max Step를 의미하고, `shuffle = True`은 데이터를 섞는 것을 의미합니다.

또한, evaluateTestData는 학습한 model를 가지고, 아까 분할했던 테스트 데이터를 실험해보는 함수입니다.

2.2. Keras를 이용한 SGD 단위 테스트

kerasSGD Initialize

In [94]:
```
ksgd = KerasSGD(100)
```

ksgd의 X와 Y의 모양 출력

In [95]:
```
print(ksgd.X.shape, ksgd.Y.shape)
```

```
(100, 1) (100, 1)
```

In [96]:

```
# SGD Fitting: maxsteps = 100
print("===================Fitting===================")
hist = ksgd.Fitting(maxsteps = 100)
```

```
===================Fitting===================
Train on 74 samples, validate on 26 samples
Epoch 1/100
74/74 [==============================] - 0s 3ms/sample - loss: 4071.9967 - val_loss:
3408.7874
Epoch 2/100
74/74 [==============================] - 0s 336us/sample - loss: 3938.1549 - val_los
s: 3292.7692
Epoch 3/100
74/74 [==============================] - 0s 283us/sample - loss: 3804.9760 - val_los
s: 3180.8870
Epoch 4/100
74/74 [==============================] - 0s 391us/sample - loss: 3672.8578 - val_los
s: 3058.9840
Epoch 5/100
74/74 [==============================] - 0s 337us/sample - loss: 3535.9230 - val_los
s: 2950.9554
Epoch 6/100
74/74 [==============================] - 0s 337us/sample - loss: 3412.2826 - val_los
s: 2853.5216
Epoch 7/100
74/74 [==============================] - 0s 310us/sample - loss: 3300.9928 - val_los
s: 2752.3291
Epoch 8/100
74/74 [==============================] - 0s 310us/sample - loss: 3185.2178 - val_los
s: 2660.3755
Epoch 9/100
74/74 [==============================] - 0s 323us/sample - loss: 3081.3880 - val_los
s: 2572.8854
Epoch 10/100
74/74 [==============================] - 0s 310us/sample - loss: 2979.4035 - val_los
s: 2490.6857
Epoch 11/100
74/74 [==============================] - 0s 350us/sample - loss: 2884.3122 - val_los
s: 2404.5123
Epoch 12/100
74/74 [==============================] - 0s 297us/sample - loss: 2785.1794 - val_los
s: 2325.0436
Epoch 13/100
74/74 [==============================] - 0s 323us/sample - loss: 2693.7132 - val_los
s: 2251.8367
Epoch 14/100
74/74 [==============================] - 0s 310us/sample - loss: 2609.3506 - val_los
s: 2176.3361
Epoch 15/100
74/74 [==============================] - 0s 292us/sample - loss: 2522.8794 - val_los
s: 2107.1185
Epoch 16/100
74/74 [==============================] - 0s 283us/sample - loss: 2442.4360 - val_los
s: 2038.0226
Epoch 17/100
74/74 [==============================] - 0s 229us/sample - loss: 2362.6006 - val_los
s: 1973.8969
Epoch 18/100
74/74 [==============================] - 0s 336us/sample - loss: 2288.9613 - val_los
s: 1904.7784
Epoch 19/100
```

```
74/74 [==============================] - 0s 310us/sample - loss: 2209.1394 - val_los
s: 1842.1961
Epoch 20/100
74/74 [==============================] - 0s 445us/sample - loss: 2137.4624 - val_los
s: 1783.0361
Epoch 21/100
74/74 [==============================] - 0s 310us/sample - loss: 2070.2935 - val_los
s: 1724.4491
Epoch 22/100
74/74 [==============================] - 0s 418us/sample - loss: 2001.9152 - val_los
s: 1663.5150
Epoch 23/100
74/74 [==============================] - 0s 283us/sample - loss: 1933.4059 - val_los
s: 1610.7951
Epoch 24/100
74/74 [==============================] - 0s 418us/sample - loss: 1873.0937 - val_los
s: 1553.6201
Epoch 25/100
74/74 [==============================] - 0s 323us/sample - loss: 1808.1160 - val_los
s: 1504.4794
Epoch 26/100
74/74 [==============================] - 0s 364us/sample - loss: 1751.4269 - val_los
s: 1453.1770
Epoch 27/100
74/74 [==============================] - 0s 351us/sample - loss: 1692.1223 - val_los
s: 1407.6467
Epoch 28/100
74/74 [==============================] - 0s 337us/sample - loss: 1640.2769 - val_los
s: 1362.9353
Epoch 29/100
74/74 [==============================] - 0s 350us/sample - loss: 1588.2437 - val_los
s: 1317.3389
Epoch 30/100
74/74 [==============================] - 0s 377us/sample - loss: 1536.4762 - val_los
s: 1269.7745
Epoch 31/100
74/74 [==============================] - 0s 364us/sample - loss: 1481.9997 - val_los
s: 1229.3166
Epoch 32/100
74/74 [==============================] - 0s 431us/sample - loss: 1436.1884 - val_los
s: 1188.2051
Epoch 33/100
74/74 [==============================] - 0s 270us/sample - loss: 1388.2249 - val_los
s: 1152.3352
Epoch 34/100
74/74 [==============================] - 0s 458us/sample - loss: 1347.0936 - val_los
s: 1117.1073
Epoch 35/100
74/74 [==============================] - 0s 297us/sample - loss: 1306.5658 - val_los
s: 1080.6034
Epoch 36/100
74/74 [==============================] - 0s 512us/sample - loss: 1264.3865 - val_los
s: 1042.4036
Epoch 37/100
74/74 [==============================] - 0s 323us/sample - loss: 1220.5964 - val_los
s: 1009.2029
Epoch 38/100
```

```
74/74 [==============================] - 0s 499us/sample - loss: 1182.4918 - val_los
s: 976.9802
Epoch 39/100
74/74 [==============================] - 0s 364us/sample - loss: 1145.8115 - val_los
s: 947.6006
Epoch 40/100
74/74 [==============================] - 0s 445us/sample - loss: 1111.4906 - val_los
s: 916.7462
Epoch 41/100
74/74 [==============================] - 0s 337us/sample - loss: 1075.5438 - val_los
s: 888.6560
Epoch 42/100
74/74 [==============================] - 0s 310us/sample - loss: 1043.8076 - val_los
s: 861.4692
Epoch 43/100
74/74 [==============================] - 0s 337us/sample - loss: 1012.1153 - val_los
s: 834.7015
Epoch 44/100
74/74 [==============================] - 0s 270us/sample - loss: 981.1977 - val_los
s: 809.7301
Epoch 45/100
74/74 [==============================] - 0s 256us/sample - loss: 952.6982 - val_los
s: 784.9738
Epoch 46/100
74/74 [==============================] - 0s 216us/sample - loss: 924.2130 - val_los
s: 760.1361
Epoch 47/100
74/74 [==============================] - 0s 377us/sample - loss: 895.9213 - val_los
s: 738.2445
Epoch 48/100
74/74 [==============================] - 0s 310us/sample - loss: 871.0352 - val_los
s: 716.9569
Epoch 49/100
74/74 [==============================] - 0s 458us/sample - loss: 846.3764 - val_los
s: 695.8575
Epoch 50/100
74/74 [==============================] - 0s 364us/sample - loss: 822.6038 - val_los
s: 674.3466
Epoch 51/100
74/74 [==============================] - 0s 418us/sample - loss: 797.6397 - val_los
s: 654.6083
Epoch 52/100
74/74 [==============================] - 0s 243us/sample - loss: 774.9137 - val_los
s: 634.5090
Epoch 53/100
74/74 [==============================] - 0s 364us/sample - loss: 752.0222 - val_los
s: 615.8660
Epoch 54/100
74/74 [==============================] - 0s 229us/sample - loss: 730.8922 - val_los
s: 596.9225
Epoch 55/100
74/74 [==============================] - 0s 323us/sample - loss: 708.2655 - val_los
s: 579.0525
Epoch 56/100
74/74 [==============================] - 0s 256us/sample - loss: 687.7067 - val_los
s: 562.3810
Epoch 57/100
```

```
74/74 [==============================] - 0s 310us/sample - loss: 668.8831 - val_los
s: 546.5217
Epoch 58/100
74/74 [==============================] - 0s 270us/sample - loss: 650.1614 - val_los
s: 528.9737
Epoch 59/100
74/74 [==============================] - 0s 431us/sample - loss: 629.9187 - val_los
s: 514.0419
Epoch 60/100
74/74 [==============================] - 0s 283us/sample - loss: 612.4218 - val_los
s: 498.0370
Epoch 61/100
74/74 [==============================] - 0s 364us/sample - loss: 594.0994 - val_los
s: 482.6998
Epoch 62/100
74/74 [==============================] - 0s 243us/sample - loss: 576.5633 - val_los
s: 468.8351
Epoch 63/100
74/74 [==============================] - 0s 310us/sample - loss: 560.4282 - val_los
s: 453.9289
Epoch 64/100
74/74 [==============================] - 0s 283us/sample - loss: 543.4809 - val_los
s: 441.7898
Epoch 65/100
74/74 [==============================] - 0s 283us/sample - loss: 529.3887 - val_los
s: 429.6076
Epoch 66/100
74/74 [==============================] - 0s 257us/sample - loss: 515.1744 - val_los
s: 417.1306
Epoch 67/100
74/74 [==============================] - 0s 296us/sample - loss: 500.6802 - val_los
s: 405.5990
Epoch 68/100
74/74 [==============================] - 0s 283us/sample - loss: 487.4474 - val_los
s: 394.6937
Epoch 69/100
74/74 [==============================] - 0s 269us/sample - loss: 474.6114 - val_los
s: 383.7329
Epoch 70/100
74/74 [==============================] - 0s 310us/sample - loss: 461.4453 - val_los
s: 373.5948
Epoch 71/100
74/74 [==============================] - 0s 283us/sample - loss: 449.5364 - val_los
s: 364.0987
Epoch 72/100
74/74 [==============================] - 0s 269us/sample - loss: 438.4462 - val_los
s: 354.6640
Epoch 73/100
74/74 [==============================] - 0s 310us/sample - loss: 427.4227 - val_los
s: 344.4698
Epoch 74/100
74/74 [==============================] - 0s 310us/sample - loss: 415.4269 - val_los
s: 335.8419
Epoch 75/100
74/74 [==============================] - 0s 337us/sample - loss: 405.3829 - val_los
s: 327.4572
Epoch 76/100
```

```
74/74 [==============================] - 0s 310us/sample - loss: 395.2542 - val_los
s: 319.0251
Epoch 77/100
74/74 [==============================] - 0s 256us/sample - loss: 385.4527 - val_los
s: 310.3940
Epoch 78/100
74/74 [==============================] - 0s 323us/sample - loss: 375.3242 - val_los
s: 301.7794
Epoch 79/100
74/74 [==============================] - 0s 304us/sample - loss: 365.2181 - val_los
s: 293.9113
Epoch 80/100
74/74 [==============================] - 0s 256us/sample - loss: 355.7429 - val_los
s: 286.3615
Epoch 81/100
74/74 [==============================] - 0s 323us/sample - loss: 346.8676 - val_los
s: 279.2854
Epoch 82/100
74/74 [==============================] - 0s 418us/sample - loss: 338.4110 - val_los
s: 272.5591
Epoch 83/100
74/74 [==============================] - 0s 330us/sample - loss: 330.5431 - val_los
s: 266.0343
Epoch 84/100
74/74 [==============================] - 0s 270us/sample - loss: 322.5934 - val_los
s: 258.9752
Epoch 85/100
74/74 [==============================] - 0s 323us/sample - loss: 314.1884 - val_los
s: 252.8593
Epoch 86/100
74/74 [==============================] - 0s 256us/sample - loss: 307.0312 - val_los
s: 247.3170
Epoch 87/100
74/74 [==============================] - 0s 283us/sample - loss: 300.4314 - val_los
s: 241.8383
Epoch 88/100
74/74 [==============================] - 0s 297us/sample - loss: 293.7336 - val_los
s: 235.9183
Epoch 89/100
74/74 [==============================] - 0s 297us/sample - loss: 286.7642 - val_los
s: 230.3753
Epoch 90/100
74/74 [==============================] - 0s 270us/sample - loss: 279.9219 - val_los
s: 225.2871
Epoch 91/100
74/74 [==============================] - 0s 350us/sample - loss: 273.6872 - val_los
s: 220.0008
Epoch 92/100
74/74 [==============================] - 0s 243us/sample - loss: 267.3240 - val_los
s: 214.9457
Epoch 93/100
74/74 [==============================] - 0s 323us/sample - loss: 261.2577 - val_los
s: 210.1666
Epoch 94/100
74/74 [==============================] - 0s 283us/sample - loss: 255.4180 - val_los
s: 205.3034
Epoch 95/100
```

```
74/74 [==============================] - 0s 256us/sample - loss: 249.4822 - val_los
s: 201.2181
Epoch 96/100
74/74 [==============================] - 0s 297us/sample - loss: 244.3615 - val_los
s: 196.5678
Epoch 97/100
74/74 [==============================] - 0s 323us/sample - loss: 238.7927 - val_los
s: 192.7006
Epoch 98/100
74/74 [==============================] - 0s 283us/sample - loss: 233.9872 - val_los
s: 188.8532
Epoch 99/100
74/74 [==============================] - 0s 296us/sample - loss: 229.2936 - val_los
s: 185.4021
Epoch 100/100
74/74 [==============================] - 0s 310us/sample - loss: 224.9133 - val_los
s: 181.7528
```

결과 분석

Train on 74 Samples: 말그대로, 100개의 데이터 중 훈련 데이터의 개수를 의미합니다.
Epoch는 Step과 동일한 개념으로 이해하면 됩니다.
Loss가 Epoch가 증가함에 따라, 점점 줄어드는 것을 보아 SGD가 잘 적용되었음을 알 수 있습니다.

Validate on 26 Samples: 100개의 데이터 중 테스트 데이터를 의미합니다.
val_loss는 test case를 적용한 loss data입니다. 즉, 검증 손실값입니다.

`hist = ksgd.Fitting(maxsteps = 100)` 여기서, hist에 반환값을 집어넣습니다.
hist는 History 객체입니다. 즉, Fitting한 결괏값을 History 객체에 저장합니다.
`hist.history` 는 dictionary입니다.

In [97]:
```
hist
```

Out[97]:
```
<tensorflow.python.keras.callbacks.History at 0x1c2a1e33828>
```

In [98]:
```python
# loss History & val_loss History
np.array([hist.history['loss'], hist.history['val_loss']])
```

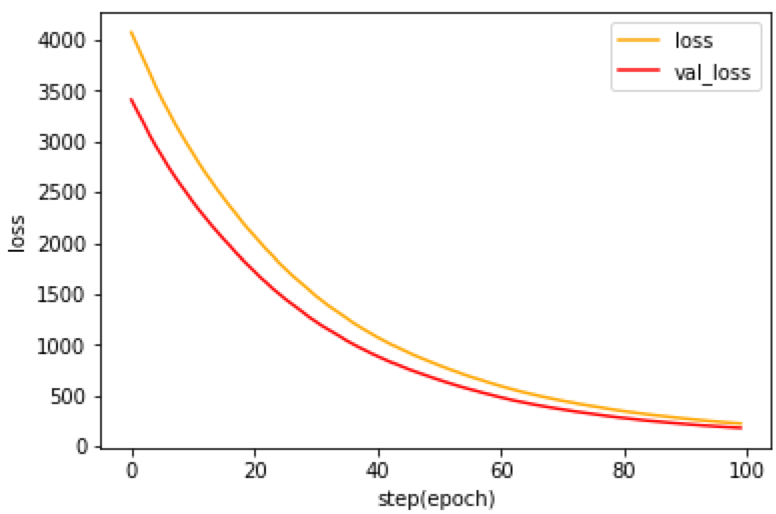
Out[98]:
```
array([[4071.9967074 , 3938.15490393, 3804.97602143, 3672.85782438,
        3535.92303962, 3412.28258618, 3300.99278136, 3185.21777344,
        3081.38795595, 2979.40354466, 2884.31224266, 2785.17941367,
        2693.71322054, 2609.35060243, 2522.87935824, 2442.43598402,
        2362.60063213, 2288.96134   , 2209.13942739, 2137.46243534,
        2070.29350322, 2001.91517103, 1933.40588379, 1873.09368896,
        1808.11602123, 1751.42694587, 1692.12226826, 1640.27688516,
        1588.24368699, 1536.47620454, 1481.99969812, 1436.1884246 ,
        1388.22490135, 1347.09360648, 1306.56576291, 1264.3864944 ,
        1220.5964405 , 1182.49183779, 1145.81145003, 1111.4905511 ,
        1075.54376386, 1043.80764193, 1012.1152517 ,  981.19766483,
         952.69823394,  924.21304156,  895.92130094,  871.03518842,
         846.37635267,  822.60378368,  797.63965998,  774.91371114,
         752.02215081,  730.89221026,  708.26546664,  687.70670298,
         668.88307479,  650.16137448,  629.91874819,  612.42179747,
         594.09936358,  576.56327284,  560.42821441,  543.48091249,
         529.38872549,  515.17435064,  500.68023187,  487.44741326,
         474.61137266,  461.44525229,  449.5364017 ,  438.44616122,
         427.42269176,  415.42685473,  405.38288962,  395.25416524,
         385.45269322,  375.32417669,  365.21814913,  355.74292137,
         346.86760361,  338.41095631,  330.54305164,  322.59339472,
         314.18837223,  307.03118979,  300.43138061,  293.73357288,
         286.76417583,  279.92193933,  273.68719297,  267.32395564,
         261.25768094,  255.41804917,  249.48216804,  244.36151247,
         238.79271389,  233.98718097,  229.29357168,  224.91331771],
       [3408.78742864, 3292.76924955, 3180.88696289, 3058.98396184,
        2950.95543495, 2853.5215595 , 2752.32912034, 2660.37553523,
        2572.88537598, 2490.68565017, 2404.51226337, 2325.04364483,
        2251.83665114, 2176.33614408, 2107.11849271, 2038.02264874,
        1973.89690693, 1904.77837665, 1842.19607309, 1783.03606708,
        1724.44905912, 1663.51495831, 1610.79505334, 1553.62007024,
        1504.47939359, 1453.17698787, 1407.64670974, 1362.9353356 ,
        1317.33892353, 1269.77446571, 1229.31659875, 1188.20512977,
        1152.33524733, 1117.10733736, 1080.60338886, 1042.40363488,
        1009.20289964,  976.98021991,  947.6006235 ,  916.74617826,
         888.65595187,  861.4691749 ,  834.7015287 ,  809.73008141,
         784.97379714,  760.13612483,  738.24445284,  716.95694439,
         695.85751812,  674.34661396,  654.60831158,  634.50903555,
         615.86599966,  596.92249474,  579.0524515 ,  562.38104248,
         546.52170387,  528.97373493,  514.0418842 ,  498.03699787,
         482.69980093,  468.83509357,  453.92890226,  441.78977732,
         429.60761202,  417.13056359,  405.59902132,  394.69370094,
         383.73287846,  373.59481753,  364.09868681,  354.66395217,
         344.46975004,  335.84192305,  327.45721905,  319.02509777,
         310.39396844,  301.77937669,  293.91131181,  286.361459  ,
         279.28540274,  272.55914013,  266.03429472,  258.97522618,
         252.85933451,  247.31697376,  241.83827151,  235.91826923,
         230.37526791,  225.28708326,  220.00082632,  214.94568693,
         210.16660837,  205.30340782,  201.2180883 ,  196.56779979,
         192.70064603,  188.85317377,  185.4020688 ,  181.75277328]])
```

2.3. Keras를 이용한 SGD 시각화

KerasSGD의 모델링 결과를 matplotlib를 이용하여 시각화합니다.

In [99]:
```
# Import Matplotlib
import matplotlib.pyplot as plt
%matplotlib inline
```

In [109]:
```
# Data List Initialize
loss_list = []
step_list = []
val_loss_list = []
for step in range(0, len(hist.history['loss'])):
    loss_list.append(hist.history['loss'][step])
    val_loss_list.append(hist.history['val_loss'][step])
    step_list.append(step)

# Visualization
plt.figure(1)
plt.plot(step_list, loss_list, color = 'orange', label = 'loss')
plt.plot(step_list, val_loss_list, color = 'red', label = 'val_loss')
plt.xlabel('step(epoch)')
plt.ylabel('loss')
plt.legend()

plt.show()
```



3. SGD의 구체화

2번에서는 sklearn, numpy, keras를 이용해서 SGD를 구현합니다.
3번에서는 numpy 레벨에서만 구현합니다.

3.1. Numpy를 이용한 SGD 구체화

아래 코드는 선형회귀(Linear Regression)을 SGD로 구현합니다.

In [1]:
```
%reset
```

```
Once deleted, variables cannot be recovered. Proceed (y/[n])? y
```

일단, Util Class를 정의합니다.

In [309]:

```python
# Basic Settings
import numpy as np
import random # np.random

class SGDUtil:

    def __init__(self):
        pass

    @staticmethod
    def mse(w, x, y):
        t = (w[0] * x + w[1])
        return np.mean((y - t) ** 2) / (2 * len(x))

    @staticmethod
    def hill(x, y, t_w0, t_w1, g):
        w0 = np.linspace(t_w0 - g, t_w0 + g, 100)
        w1 = np.linspace(t_w1 - g, t_w1 + g, 100)
        x, y = np.array(x), np.array(y)

        J = np.zeros(shape = (len(w0), len(w1)))
        for i0 in range(len(w0)):
            for i1 in range(len(w1)):
                J[i0, i1] = SGDUtil.mse([w0[i0], w1[i1]], x, y)

        w0, w1 = np.meshgrid(w0, w1)

        return [w0, w1], J

    @staticmethod
    def make_regression(X_n):
        X = -3 + 13 * np.random.rand(X_n)
        Prm_c = [170, 108, 0.2] # parameter
        Y = Prm_c[0] - Prm_c[1] * np.exp(-Prm_c[2] * X) ₩
        + 4 * np.random.randn(X_n)
        X, Y = np.array(X), np.array(Y)
        return X, Y

    @staticmethod
    def shuffle(x, y):
        seed = random.random()
        random.seed(seed)
        random.shuffle(x)
        random.seed(seed)
        random.shuffle(y)
```

SGDUtil method description

mse 함수는 선형식에서의 오차함수를 의미합니다.

hill 함수는 고정된 x, y에서 기울기 w_0와 y절편 w_1를 다양한 범위내에서 loss를 계산해 meshgrid 값을 돌려줍니다. 특히, 반환값은 등고선을 그리는 데에 사용합니다.

make_regression 함수는 교재에서 사용되던 인공 데이터 생성 함수입니다.

shuffle 함수는 x와 y를 섞는 함수입니다. seed을 동일하게 하여 섞기 전과 섞은 후 대응되는 (x, y)는 여전하게 만듭니다.

SGD Class를 정의합니다.

In [310]:
```
# Basic Settings
import numpy as np
#import SGDUtil          # deactivate in jupyter notebook

class SGD:

    def __init__(self, x, y):
        self.x = (x - min(x)) / (max(x) - min(x))
        self.y = (y - min(y)) / (max(y) - min(y))
        pass

    def process(self, epoch, w, lr = 0.2):
        x, y = self.x, self.y
        step, w_list, loss_list, step_list = 1, [], [], []

        while(step <= epoch):
            SGDUtil.shuffle(x, y)
            loss = 0
            dw0, dw1 = 0.0, 0.0

            for i in range(len(x)):
                pre_y = w[0] * x[i] + w[1]
                loss = ((y[i] - pre_y) ** 2) / 2

                dw0 = (pre_y - y[i]) * x[i]
                dw1 = (pre_y - y[i])

                w[0] = w[0] - lr * dw0
                w[1] = w[1] - lr * dw1

                w_list.append([w[0], w[1]])
                loss_list.append(loss)
                step_list.append(step)

                step += 1

                if(step > epoch):
                    return {'w': w_list, 'loss': loss_list, 'step': step_list}
```

SGD 작동 방식

Batch Gradient Descent에서는 모든 x에서의 mse를 구한 후, 1 step를 증가했다면

Stochastic Gradient Descent에서는 각 x에서의 평균을 구한 후, 1 step를 증가했습니다.

w의 업데이트 방식은 Batch Gradient Descent, Stochastic Gradient Descent, Mini-batch Gradient Descent 전부 동일합니다.

$$f = w_0 x + w_1$$

$$\frac{\partial f}{\partial w_0} = x, \frac{\partial f}{\partial w_1} = 1$$

$$w_0 = w_0 - learning\_rate * \frac{\partial f}{\partial w_0}$$

$$w_1 = w_1 - learning\_rate * \frac{\partial f}{\partial w_1}$$

4. 구체화한 모듈의 단위 테스트

SGDUtil 모듈과 SGD 모듈의 단위 테스트를 진행합니다.

4.1. Numpy를 이용한 SGD 단위 테스트

단위 테스트에 사용되는 인공 데이터는 직접 제작합니다.

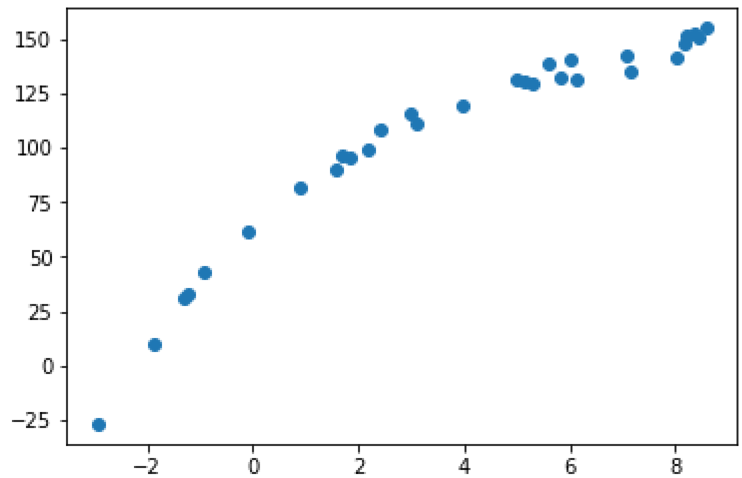
또한, 단위 테스트의 결과를 `matplotlib` 모듈을 이용해 시각화합니다.

In [311]:
```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from mpl_toolkits.mplot3d import Axes3D
import random
%matplotlib inline
```

SGDUtil Class의 `make_regression(X_n)`를 이용해 인공 데이터를 생성합니다. 일부러 seed를 정하지 않아 항상 값이 다르게 나옵니다.

In [312]:
```
# X, Y Data
#x = np.array([22, 15, 17, 31, 24, 28, 46, 45, 50])
#y = np.array([11, 34, 43, 49, 56, 74, 77, 91, 107])
x, y = SGDUtil.make_regression(30)
```

In [313]:
```
# X, Y Visualization
plt.figure(1)
plt.plot(x, y, marker='o', linestyle='None')
# linestyle='None' 선 제거
plt.show()
```



SGD 모듈 단위 테스트

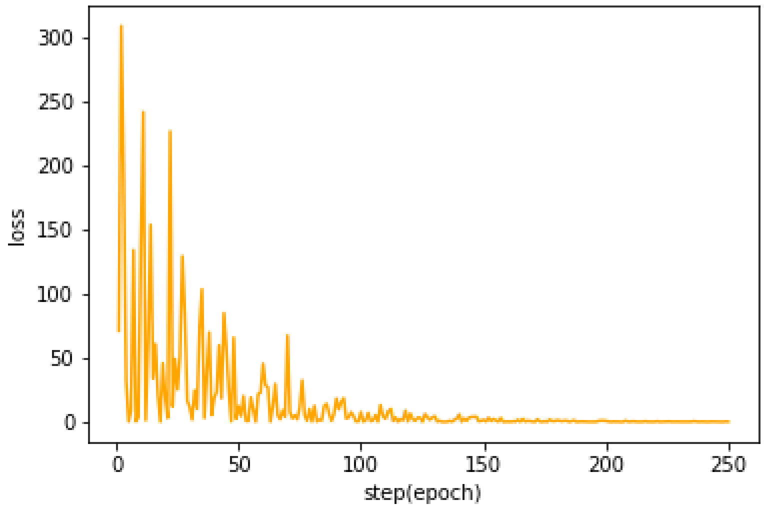
In [314]:
```
sgd = SGD(x, y)
dict_result = sgd.process(epoch = 250,
                          w = np.array([30., -40.]), lr = 0.2)
```

loss_list는 각 step마다 loss값이 저장되어 있습니다.

In [315]:
```
w_list = dict_result['w']
loss_list = dict_result['loss']
step_list = dict_result['step']
```

In [316]:
```
plt.figure(1)
plt.xlabel('step(epoch)')
plt.ylabel('loss')
plt.plot(step_list, loss_list, color = 'orange')
```

Out[316]: [<matplotlib.lines.Line2D at 0x20f98ce9588>]



step-loss 그래프를 보게 되면, 초기 step에서는 loss가 굉장히 높은 것을 알 수 있지만, 갈수록 낮아지고 있습니다.

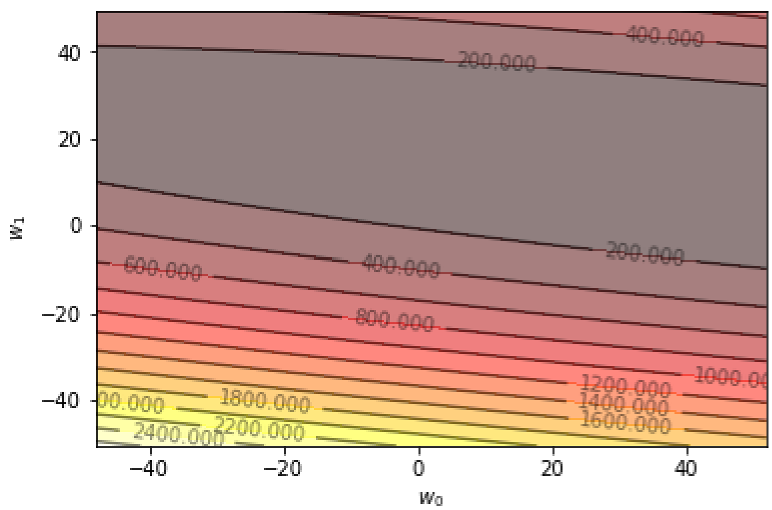
하지만, SGD 특성상, 안정성이 낮기 때문에, 초기에 많이 흔들리는 것을 볼 수 있습니다.

안정성이 낮은 이유는 loss update하는 데에 있어서, 변수 1개만 적용하기 때문입니다.

In [320]:
```
# contour로 표시

t_w0, t_w1 = w_list[len(w_list) - 1]
t_loss = loss_list[len(loss_list) - 1]
print("t_w0: ", t_w0, "t_w1: ", t_w1, "t_loss: ", t_loss)

hW, hJ = SGDUtil.hill(x, y, t_w0, t_w1, 50)
plt.figure(1)
plt.contourf(hW[0], hW[1], hJ, 15, alpha = 0.5, cmap = plt.cm.hot)
C = plt.contour(hW[0], hW[1], hJ, 15, alpha = 0.5, colors='black')
plt.clabel(C,inline=True)
plt.xlabel('$w_0$')
plt.ylabel('$w_1$')
```

```
t_w0:  2.0200762496279485 t_w1:  -0.433411803967238 t_loss:  0.10517007835962683
```

Out[320]: `Text(0,0.5,'$w_1$')`



등고선의 해석

sgd.process로 작업한 w_list에서 가장 loss가 적은 w_0, w_1 기준으로 $w_i \pm g$ 즉, $[w_i - g, w_i + g]$ 범위에서 하나하나 MSE를 계산해서 등고선으로 표시한 것입니다.

특히나, sgd.process로 작업해서 나온 t_w0, t_w1 를 등고선에서 보면 차이가 크다는 것을 알 수 있습니다.

왜냐하면, SGD에서는 loss를 계산할 때, x_i 하나 가지고 계산을 했고, hill에서는 loss를 Batch Gradient Descent의 방식처럼 계산했기 때문입니다.

그렇다면, w_list 가지고 직선을 그릴 수 있을까?

가능은 하겠지만, 확률(Probability)이 낮습니다. 확률은 Epoch 값에 따라서 달라지기도 합니다.

Batch Gradient Descent보다 Local Optimal를 빠져나갈 수 있는 것은 **사실**이나, 안정성이 낮기 때문에, learning_rate와 epoch값에 따라서 오히려 안 좋은 값을 출력할 수도 있습니다.

그렇기 때문에, SGD의 변형으로 Momentum을 통해 더 좋은 값을 유도할 수 있습니다.

그렇다면, 어떻게 SGD의 성능을 보일 것인가?

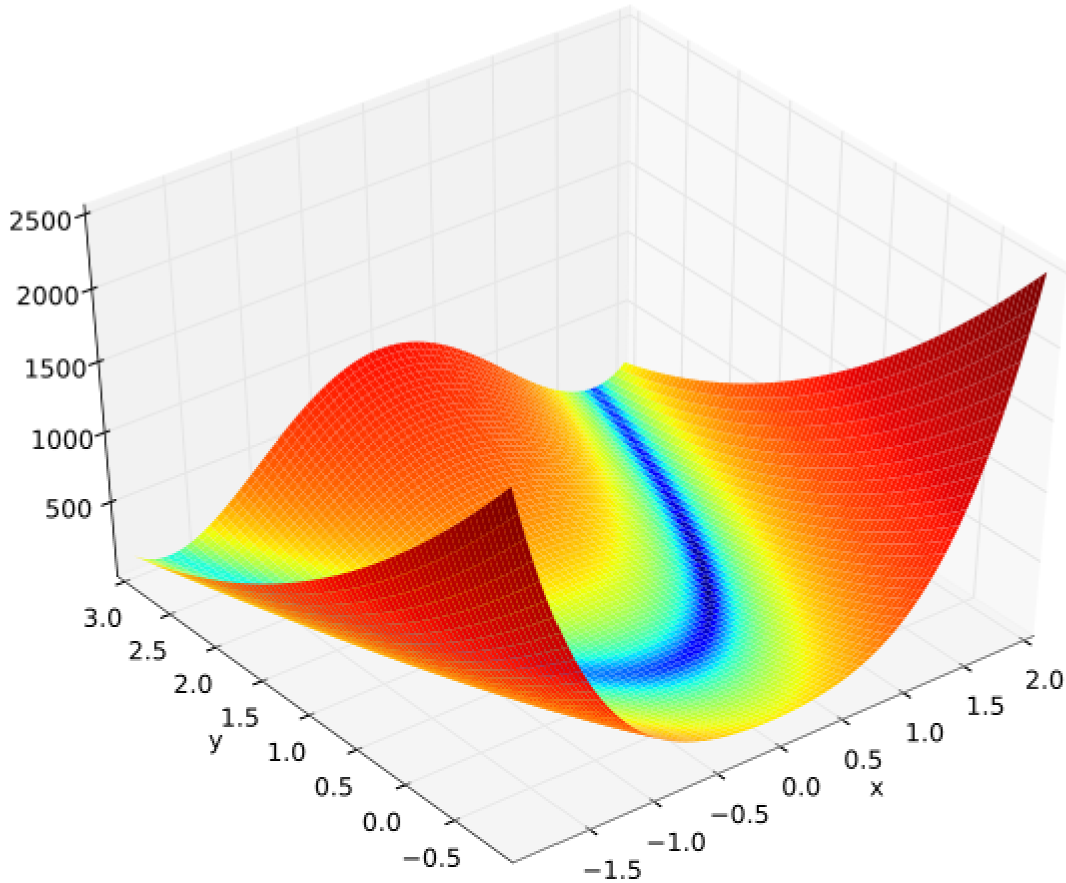
여기서는, SGD의 성능을 로젠브룩(RosenBrock) 함수를 통해 보일 예정입니다.

사실상 'SGD의 성능'이라는 표현 보다는 `경사하강법(Gradient Descent)의 성능` 이라 보는 게 맞을 것 같습니다.

그 이유에 대해서는 아래 5번 문단에서 설명합니다.

5. Rosenbrock Function을 통한 SGD 성능 검증

Rosenbrock Function은 최적화 알고리즘을 테스트하는 용도로 사용하는 함수이다.



Rosenbrock Function은 다음과 같다.

$$f(x, y) = (a - x)^2 + b(y - x^2)^2$$

$f(x, y) = 0$ 을 만족하기 위해서는 $(x = a, y = a^2)$이 일반적이다.

Rosenbrock Function을 회귀(Regression) 관점에서 바라본다면?

이 로젠브룩 함수를 회귀(Regression) 관점에서 바라본다면 선형회귀랑은 정반대의 결과가 나오게 됩니다.

선형회귀(Linear Regression)의 기억을 다시 복기해본다면,

고정적인 X, Y 데이터에서 선형식을 유추했습니다.

선형식을 유추했다는 것은 $w_0(\text{기울기}), w_1(y\text{절편})$ 를 알아내는 것과 동일합니다.

loss function은 MSE(Mean Square Error)을 사용했습니다.

하지만, 로젠브룩에서의 회귀(Regression)는 반대입니다.

유동적인 X, Y 데이터가 $f(X, Y) = 0$ 를 만족할 때까지 움직인다고 생각하면 됩니다.

여기서, 선형 회귀에서 X, Y는 1개이상인 반면, 로젠브룩에서의 회귀는 X, Y가 항상 1개씩입니다.

4번에서 언급했던 `SGD의 성능`을 Rosenbrock Function에서 검증하게 된다면, `Gradient Descent(경사하강법)의 성능`와 동일하다고 말한 부분이 있습니다.

Batch Gradient Descent는 데이터 N개에서 N개를 가지고 Loss를 계산하는 것이 1 step입니다.

Mini-Batch Gradient Descent는 데이터 N개에서 K개를 가지고 Loss를 계산하는 것이 1 step입니다. $(K \leq N)$

Stochastic Gradient Descent는 데이터 N개에서 1개를 가지고 Loss를 계산하는 것이 1 step입니다.

하지만, Rosenbrock Function에서는 데이터가 결국은 1개이므로, $N = 1$이게 됩니다. 즉, **Batch Gradient Descent**, **Mini-batch Gradient Descent**, **Stochastic Gradient Descent**는 데이터 1개에서 항상 1개를 뽑게 됩니다.

결국은, 결과를 달리 하고 싶으면, SGD의 변형 알고리즘인 Momentum 등을 사용해야 합니다.

일단, SGD도 경사하강법이므로 Rosenbrock Function의 편미분값을 구해야 합니다.

$$f(x, y) = (a - x)^2 + b(y - x^2)^2$$

$$\frac{\partial\ f(x, y)}{\partial x} = (-2)(a - x) + 2b * (-2x) * (y - x^2)$$

$$\frac{\partial\ f(x, y)}{\partial x} = (-2)(a - x) + (-4bx) * (y - x^2)$$

$$\frac{\partial\ f(x, y)}{\partial y} = 2b * (y - x^2)$$

여기서는, $a = 1, b = 2$ 적용하면 $f(1, 1) = 0$가 성립한다.

In [78]:
```
import numpy as np
import random
import matplotlib.pyplot as plt
%matplotlib inline
```

In [79]:
```
def rosenbrock(x, y):

    a, b = np.float(1.0), np.float(2.0)
    return (a - x) ** 2 + b * (y - x ** 2) ** 2
```

In [145]:
```
def d_rosenbrock(x, y):

    a, b = np.float(1.0), np.float(2.0)
    dx = (-2) * (a - x) + (-4 * b) * (y - x ** 2) * x
    dy = 2 * b * (y - x ** 2)
    return dx, dy
```

In [147]:
```
def rosenbrock_sgd(x, y, epoch, lr = 8e-4, eps = 1.0e-6):
    history_x, history_y = [], []
    step_list = []

    for step in range(epoch):

        mu = 1.4
        dx, dy = d_rosenbrock(x, y)
        xx = x - lr * mu * dx
        yy = y - lr * mu * dy

        history_x.append(xx)
        history_y.append(yy)
        step_list.append(step)

        x = xx
        y = yy

    return history_x, history_y, step_list
```

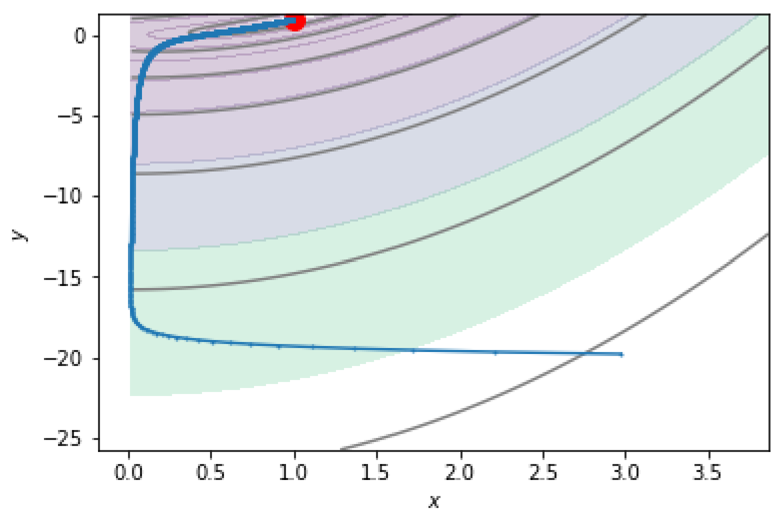
단위 테스트를 진행해봅니다.

In [148]:
```
x_list, y_list, step_list = ₩
rosenbrock_sgd(x = 5, y = -20, ₩
               epoch = 10000)
```

In [149]:

```
# Visualization

xx = np.linspace(min(x_list) * 1.3, max(x_list) * 1.3, 800)
yy = np.linspace(min(y_list) * 1.3, max(y_list) * 1.3, 600)
X, Y = np.meshgrid(xx, yy)
Z = rosenbrock(x = X, y = Y)

levels=np.logspace(-1, 3, 10)
plt.contourf(X, Y, Z, alpha=0.2, levels=levels)
plt.contour(X, Y, Z, colors="gray",
            levels=[0.4, 3, 15, 50, 150, 500, 1500, 5000])
plt.plot(1, 1, 'ro', markersize=10)
plt.xlabel('$x$')
plt.ylabel('$y$')

# ============================

#for i in range(len(x_list)):
    #plt.plot(x_list[i], y_list[i], 'bo')

plt.plot(x_list, y_list, marker='o', markersize = 1)
```

Out[149]: [<matplotlib.lines.Line2D at 0x2944d165be0>]



RosenBrock Function에서 SGD 학습은 결국, Gradient Descent와 같아 속도는 여전히 느리고, Epoch가 10000번 근처에 도달하자 (1, 1)에 도달한 것을 알 수 있습니다.

소감

이번 최적화 알고리즘 구체화 프로젝트는 다양한 Gradient Descent Optimization에 대해서 개념만 아는 것이 아닌 직접 구현까지 하면서 왜 그렇게 구현해야 하는지 부터 시작해서 시각적으로 결과를 직접 보니 시간은 오래 걸리지만 이해가 쉬웠습니다.