

네트워크 앙상블을 위한 관찰 학습 알고리즘

장민*○ 조성준**

* 포항공과대학교 컴퓨터공학과 *

** 서울대학교 산업공학과

jmin@postech.ac.kr, zoon@snu.ac.kr

Observational Learning Algorithm for Network Ensemble

Min Jang* Sungzoon Cho**

* Department of Computer Science & Engineering, POSTECH

** Department of Industrial Engineering, Seoul National University

요약

본 논문에서는 사회 학습의 이론의 하나인 관찰 학습 이론에 기반한 네트워크 앙상블을 위한 관찰 학습 알고리즘을 제안한다. 하나의 네트워크 학습할 때 함께 학습되는 다른 네트워크들을 이용하여 가상 데이터를 생성하여 학습에 이용함으로써 데이터가 부족한 경우 네트워크가 과학습 되는 것을 방지하고 각 네트워크의 일반화 성능을 향상시키는 동시에 앙상블의 성능도 향상시킨다. 제안된 방법을 사인 함수의 근사 문제와 중첩된 두 정규 분포의 분류 문제에 적용하고 단일 네트워크, 네트워크 위원회, Bagging 알고리즘과 비교하여 제안된 방법의 일반화 성능의 우수성을 보였다.

1 Introduction

사회학습 이론에 따르면 아이들의 학습은 여러가지 지식을 통하여 일어나는데, 관찰 학습이란 다른 아이들의 행동을 관찰하고 그 관찰된 내용을 일반화하는 학습 방법이다 [2]. 본 논문에서는 관찰 학습 이론을 바탕으로 신경망 앙상블을 학습시키는 관찰 학습 알고리즘(observational learning algorithm, OLA)을 제안한다. 특히, 최근에 제안된 가상 데이터를 생성을 통한 일반화 향상 방법을 더욱 발전시켜 정형화된 알고리즘으로 발전시킨다 [4].

알고리즘의 주 아이디어는 아이들을 네트워크 앙상블을 구성하는 각 네트워크로 간주하고, 아이들 서로서로의 관찰을 네트워크들 사이에 서로의 학습 상태를 관찰하여 정보를 얻어 학습하는 것으로 간주하는 것이다. 즉, 처음에 각 네트워크는 다르게 주어진 초기 데이터를 이용하여 학습한다. 학습을 한 후 각 네트워크는 자신을 제외한 나머지 네트워크들을 관찰한다. 자신이 가지고 있지 않은 데이터에 대한 정보를 얻기 위하여 특정 입력값에 대한 다른 네트워크들의 출력값들을 수집하는 것을 말한다. 다시 가상 데이터를 처음 주어진 학습 데이터에 추가하여 학습을 다시 수행한다. 이와 같은 학습과 관찰을 반복하여 네트워크들을 학습한 후 최종적으로 학습된 네트워크들을 결합하여 최종 네트워크를 구성한다.

2 관찰 학습 알고리즘

데이터의 수가 n 인 데이터 집합 $D = \{(\vec{x}_k, \vec{y}_k) | k = 1..n\}$ 와 L 개의 신경망 f_i , $i = 1..L$ 이 주어졌다고 하자. 먼저 각 네트워크의 초기 학습 데이터를 구하기 위하여 집합 D 로부터 n 번 복원추출(resampling with replacement)하여 D_i 를 생성하였다 [6]. 즉, 1에서 n 까지의 정수중에서 $1/n$ 의 확률로 n 번 추출한 index를 $\{s_1, s_2, \dots, s_n\}$ 라 하면 D_i 는

$\{(\vec{x}_{s_1}, \vec{y}_{s_1}), (\vec{x}_{s_2}, \vec{y}_{s_2}), \dots, (\vec{x}_{s_n}, \vec{y}_{s_n})\}$ 가 된다. 이와 같은 부트스트랩(bootstrapping) 방법은 제한된 데이터가 주어졌을 때 예측 에러를 추정(estimation)하는 방법으로 알려져 있지만 최근 신경망과 같은 불안전 추정기(unstable estimator)에 적용되어 좋은 성능 향상이 보고 되고 있다 [3].

관찰 학습 알고리즘의 초기화가 끝난 후 정해진 G 회(epoch) 동안 “학습 단계(training step, T-step)”와 “관찰 단계(observation step, O-step)”가 번갈아 가면서 수행된다. 반복 횟수가 t 일때, 학습 단계에서는 초기 학습 데이터 (D_i)와 직전 단계에서 생성된 가상 데이터(V_i^t)를 이용하여 각 네트워크 f_i^t 를 학습한다. 단, 관찰 학습 알고리즘에서는 $t=0$ 에서는 가상 데이터가 없기때문에 D_i 만을 가지고 학습한 후 네트워크 웨이트를 수정한다. 네트워크 f_i 의 웨이트를 w_i 라 하면

$$w_i^{t+1} = w_i^t + \Delta w_i^t \quad (1)$$

와 같이 수정한다. 여기서 Δw_i^t 는 t 에서의 웨이트 변화로서, 오역전파(BP, backpropagation) 학습 알고리즘에서는 $\Delta w_i^t = -\eta_t \nabla E(w_i)$ 이고 η_t 는 학습률(learning rate)이다. 만약 BP 이외의 다른 알고리즘을 사용한다면 거기에 맞는 Δw_i^t 를 사용해야 한다.

학습단계에서 웨이트의 수정이 수행된 후 관찰 단계에서는 네트워크 f_i^t 를 제외한 나머지 네트워크들의 앙상블(\vec{f}_{-i}^t)을 이용하여 가상 데이터 집합 V_{-i}^{t+1} 를 생성한다. 먼저, 네트워크 f_i^t 의 초기 학습 데이터(D_i)의 하나의 입력 값 \vec{x}_{s_j} 를 평균으로 하고 공분산 Σ 를 갖는 정규 확률 분포에서 가상 데이터의 입력 값 \vec{v}_{s_j} 을 생성한다. 그리고, \vec{f}_{-i}^t 를 네트워크 반복횟수 t 에서 f_i^t 를 제외한 나머지 네트워크들의 앙상블이라 하자. 가상 데이터의 입력 값 \vec{v}_{s_j} 를 \vec{f}_{-i}^t 에 입력 하면 가상 데이터의 출력값 $\vec{f}_{-i}^t(\vec{v}_{s_j})$ 이 생성된다. 이 방법을 D_i 에 있는 n 개의 모든 데이터에 적용하면 f_i^t 의 가상 데이터 집합 $V_{-i}^{t+1} = \{(\vec{v}_{s_j}, \vec{f}_{-i}^t(\vec{v}_{s_j})) | \vec{v}_{s_j} \sim N(\vec{x}_{s_j}, \Sigma) \text{ and } \vec{x}_{s_j} \in D_i, j = 1..n\}$ 이 생성된다. 이와같이 생성된 가상 데이터는 다음 반복에서 학습 단계에서 학습에 이용된다.

* 원주소: 151-742 서울시 판곡구 신림동 산56-1 서울대학교 산업공학과

이와 같은 학습과 관찰을 정해진 G 횟수 동안 반복한 후에 마지막 네트워크(f_i^G)들을 결합 가중치 α_i 를 이용하여 결합한다. 자세한 관찰 학습 알고리즘은 표 1에 있다.

Table 1: 관찰학습 알고리즘

1. Let $\{f_i|i=1..L\}$ be a set of networks in the ensemble.
2. Let $\{D_i|i=1..L\}$ be bootstrapping replicates of original data set D .
3. for ($t=0; t \leq G; t++$)
 - **T-step** For each network, w_i is updated as follows.

$$E_i^t(w_i) = \sum_{(\vec{x}, \vec{y}) \in D_i \cup V_i^t} (f_i^t(\vec{x}) - \vec{y})^2$$

$$w_i^{t+1} = w_i^t - \eta_i \nabla E_i^t(w_i) \tag{2}$$

- **O-step** For each network, observational data sets are created as follows.

$$\vec{f}_{-i}^t = \sum_{j=1, j \neq i}^L \beta_j^t f_j^t$$

$$V_{-i}^{t+1} = \{(\vec{v}_{s_j}, \vec{f}_{-i}^t(\vec{v}_{s_j})) | \vec{v}_{s_j} \sim N(\vec{x}_{s_j}, \Sigma) \text{ and } \vec{x}_{s_j} \in D_i, j=1..n\}$$

4. The final network ensemble output is computed as

$$f^G = \sum_{i=1}^L \alpha_i f_i^G.$$

알고리즘의 파라미터로서 α_i 와 β_i^t 가 있다. 각각은 모든 학습이 끝난 후 네트워크 앙상블을 만들 때와 반복 횟수 t 의 관찰단계에서 가상 데이터를 만들 때 이용되는 네트워크들의 결합 가중치 값들이다. 본 논문에서는 이 값들을 단순히 단순 평균 (simple averaging) 또는 다수 투표 (majority voting) 방법을 이용하였다.

3 실험 결과

3.1 사인 함수 회귀 문제

3.1.1 문제 설명

제안된 관찰학습 알고리즘을 [1]의 실험에서 사용된 사인 곡선의 회귀 문제에 적용하였는데 함수식은

$$y = \sin 3(x + 0.8)^2 + \epsilon \tag{3}$$

이다. 여기서 ϵ 는 평균이 0이고 표준 편차가 0.4인 정규 분포이고 위의 식에서 총 20개의 데이터 $D = \{(x_k, y_k) | k=1..20\}$ 를 -1과 1 사이에서 균일한 간격으로 생성하였다. 신경회로망의 구조는 1-10-1이고 은닉 노드에서의 전달 함수 (transfer function)는 $\tanh(x)$ 을 이용하였다. 회귀 문제이기 때문에 출력 노드의 전달 함수는 선형 (linear)을 사용하였다. 관찰학습 알고리즘에서 사용하는 앙상블의 크기 L 은 20으로 고정시키고 D 를 부트스트랩

하여 각 네트워크의 초기 데이터 $D_i, i=1..L$ 을 생성하였다. 가상 데이터의 생성 범위를 결정하는 변수인 Σ 는 입력이 스칼라이기 때문에 σ^2 으로 나타내고 값은 0.01로 고정시켰다. α_i 와 β_i^t 는 t, i 및 j 에 상관없이 각각 $1/L, 1/(L-1)$ 로 놓았고 최대 학습 반복 횟수 G 는 20으로 고정시켰다. 학습은 quasi-Newton 방법과 유사한 학습 방법인 Levenberg-Marquardt 학습 알고리즘을 이용하였다 [7]. 테스트 데이터로 식(3)에서 노이즈 없이 1000개의 데이터를 $[-1, 1]$ 의 구간에서 균일하게 생성하여 이용하였다.

3.1.2 실험 결과

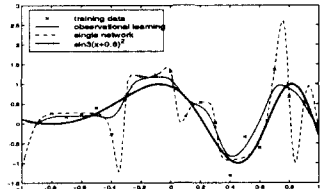


Figure 1: 단일 신경망과 관찰학습 알고리즘을 이용한 앙상블의 테스트 결과. x는 학습 데이터를 나타낸다.

실험 결과는 그림 1에 나와있다. 점선은 단일 네트워크를 사용한 결과를 나타내는데 학습 데이터에 과학습(overfitting) 되었음을 볼 수 있다. 가는 선은 관찰학습 알고리즘의 테스트 결과로서 테스트 데이터에 대체적으로 잘 맞고 있으며 학습 데이터에 존재하는 노이즈에는 학습되어 있지 않음을 볼 수 있다. 그러므로, 관찰학습은 단일 네트워크를 이용한 결과보다 좋은 일반화 성능을 가지고 있음을 알 수 있다.

제안된 관찰학습 알고리즘의 성능을 기존에 제안된 방법들 중 단순 네트워크 위원회 및 Bagging과 비교하였다. 실험 결과는 표 2에 나와있다. 각 방법으로 25번씩 실험한 후 테스트 MSE(Mean Squared Error)의 평균, 최소, 최대값 등을 구하였다. 학습 데이터가 부족하기 때문에 검증 데이터(validation data)를 사용하지 않았다. 그리고, 모든 네트워크를 충분히 학습시키기 위하여 단순 네트워크 위원회와 Bagging에서는 충분한 학습 횟수동안 학습했다.

실험 결과 관찰학습 알고리즘은 단순 위원회 방법보다 약 3배, Bagging보다 약 두배 정도 성능이 좋았다. 또한, Bagging과 관찰학습 알고리즘 모두 부트스트랩을 이용하고 있지만 Bagging의 경우 초기 데이터에 민감하여 최대치와 최소치의 차이가 큰 반면에 관찰학습은 보다 안정된 성능을 보이고 있다.

Table 2: 단일 네트워크(SN), 단순 위원회(SC), Bagging 그리고 관찰학습의 일반화 성능을 MSE로 표시하였다.

Methods		평균	최소	최대	표준편차
SN		0.291	0.061	1.700	0.340
앙상블	SC	0.226	0.085	0.747	0.176
	Bagging	0.120	0.048	0.236	0.050
	OLA	0.076	0.030	0.144	0.028

3.2 분류 문제

3.2.1 문제 설명

제안된 관찰학습 알고리즘을 분류 문제에 적용하였다. 이 실험을 통하여 분류 문제에도 회귀 문제에서와 같이 관찰학습 알고

리즘이 일반화 성능의 향상에 좋은 효과가 있으며 단순 위원회 및 Bagging 방법에 비해 월등히 좋은 일반화 성능을 가지고 있다는 것을 보인다.

적용 문제는 분류 문제에 많이 사용되고 있는 두개의 중첩된 정규 분포 (overlapping bivariate normal distribution)의 분류 문제이다. $N(\mu, \Sigma)$ 를 평균이 μ 이고 공분산 행렬이 Σ 인 정규 분포이라 하자. 두 분포의 평균은 각각 $\mu_{C_1} = (1, -1)$, $\mu_{C_2} = (-1, 1)$ 이고 공분산은 $\Sigma_{C_1} = \Sigma_{C_2}$ 2차원 단위 행렬로 같게 놓았다. 이 문제의 최적 분류기는 $x_1 = x_2$ 라고 알려져있다 [5].

실험에 사용된 학습데이터로는 두 클래스로부터 각 20개씩 총 40개의 데이터를 생성하여 이용하였다. 데이터의 입력값은 (x_1, x_2) 의 2차원 벡터이고 출력값은 1-of-c 코딩을 사용하였다. 즉, 클래스 C_1 의 출력값은 $(1, 0)$, C_2 의 출력값은 $(0, 1)$ 이다. 사용한 신경망의 구조는 2-10-2로 고정시켰고 은닉 노드와 출력 노드의 전달 함수는 각각 $\tanh(x)$ 와 sigmoid를 이용하였다. 네트워크의 학습 후 입력 값이 주어질때 출력 클래스를 결정하는 방법으로는 두개의 출력 노드의 값을 비교하여 큰 출력 값을 갖는 쪽의 클래스로 결정하였다. 학습 알고리즘은 회귀 문제에서와 같이 Levenberg-Marquardt 학습 알고리즘을 이용하였다. 일반화 성능을 측정하기 위한 테스트 데이터로는 학습 데이터를 생성하는 방법과 같은 방법으로 10000개의 데이터를 생성하여 이용하였다. 이미 이 분류 문제의 최소 분류 에러율은 8%라고 알려져있다.

분류 문제에 적용된 관찰학습 알고리즘은 회귀 문제에 적용된 알고리즘과 가상 데이터의 입력을 생성하는 방법은 같지만 가상 데이터의 출력 값의 생성방법에 약간의 차이가 있다. 분류 문제에서의 신경망의 출력값은 회귀 문제에서와 같이 연속적이지 않고 이산적이기 때문이다. 따라서 앞에서 제시한 관찰학습 알고리즘의 O-step부분을 분류 문제에 맞추도록 수정하여 사용하였다

3.2.2 실험 결과

그림 2(a)는 단일 네트워크를 사용하여 주어진 학습데이터를 이용하여 학습한 후 신경망의 분류 결과를 나타낸다. 최적 분류기는 $x_1 = x_2$ 로서 실선으로 나타내고 있다. 그림에서 보면 단일 네트워크는 주어진 학습데이터에는 모두 정확한 분류 결과를 보이고 있지만 최적 분류기와는 많은 차이가 있음을 볼 수 있다. 특히, 학습데이터에 매우 과학습되어 있어서 일반화 성능이 좋지 않음을 알 수 있다.

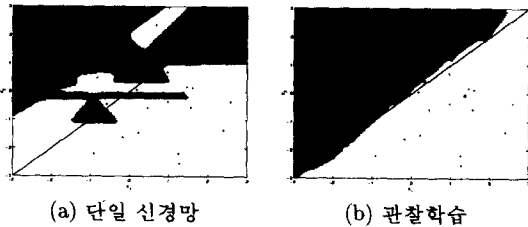


Figure 2: (a) 단일 네트워크의 학습 결과. 회색으로 표현된 영역은 클래스 1(C_1)이고 흰영역은 클래스 2(C_2)이다. o과 +는 각각 class C_1 과 C_2 로부터 생성되어 학습에 사용된 데이터이다. (b) 관찰학습 알고리즘의 분류 결과.

이에 반해, 관찰학습을 사용하여 학습한 결과는 그림 2(b)에서 보이고 있다. 사용된 파라미터는 $L = 10$ 이고 σ 로는 대각 원소가 모두 0.25인 2차원 대각 행렬(diagonal matrix)이다. 단일 네트워크의 결과와 비교할 때 관찰학습의 분류기는 노이즈에 매우 강하다는 것을 볼 수 있다.

Table 3: 단일 네트워크(SN), 단순 위원회(SC), 관찰학습 알고리즘 및 Bagging의 성능 비교. 각 방법에 대하여 25회 실험한 후 평균, 최대 및 최소 분류 에러율을 구하였다.

Methods	평균	최소	최대	표준편차
SN	14.37	8.80	60.14	9.97
SC	11.36	8.43	19.72	2.64
Bagging	9.88	8.44	12.79	1.21
OLA	8.95	8.34	11.10	0.62

표 3은 이 classification문제에 대하여 관찰학습 알고리즘과 단일 네트워크, 단순 위원회 및 Bagging을 이용하여 실험한 결과를 나타내고 있다. 모든 실험은 25회씩 수행되었고 평균과 최대 및 최소 분류 에러율을 구하였다. 단순 위원회와 Bagging에서 사용한 네트워크의 수는 관찰학습 알고리즘에서와 마찬가지로 10으로 놓고 실험하였다. 표에서 볼 수 있듯이 관찰학습 알고리즘은 분류문제에 대하여도 다른 방법들에 비해 매우 좋은 일반화 성능을 보인다는 것을 알 수 있다.

4 Conclusions

본 논문에서는 사회학습 이론인 관찰 학습을 근거로 새로운 앙상블 학습 알고리즘인 관찰 학습 알고리즘을 제안하였다. 현재까지 제안된 앙상블 학습 방법들은 각 개개의 네트워크를 독립적으로 학습한 후에 적당한 결합 가중치를 구해 합치는 방법들이 대부분 이었다. 그러나, 본 논문에서 제안한 관찰학습 알고리즘은 학습의 중간에 네트워크들간에 '관찰'이라는 네트워크 상호간에 정보 교환을 통해 개개의 네트워크의 일반화 능력을 향상시키며 결국 앙상블의 성능을 향상시키는 방법이다. 비록 단순한 문제였지만 회귀 과분류 문제에 적용한 결과 매우 탁월한 성능을 보였고 기존의 방법들에 비해 다양한 장점들을 가지고 있다. 또한, 제안된 알고리즘은 단순하고 적용하기 쉽기 때문에 신경회로망 뿐만 아니라 CART, $C4.5$, k -NN과 같은 일반적인 기계학습(machine learning)기법에 두루 적용이 가능하다는 장점이 있다.

References

- [1] AN, G. The effects of adding noise during backpropagation training on a generalization performance. *Neural Computation* 7, 2 (1996), 613-674.
- [2] BANDURA, A. *Social Learning Theory*. General Learning Press, New York, USA, 1971.
- [3] BREIMAN, L. Bagging predictors. *Machine Learning* 24 (1994), 123-140.
- [4] CHO, S., JANG, M., AND CHANG, S. Virtual sample generation using a population of networks. *Neural Processing Letters* 5, 2 (1997), 83-89.
- [5] DUDA, R., AND HART, P. E. *Pattern Classification and Scene Analysis*. Wiley, New York, USA, 1973.
- [6] EFRON, B., AND TIBSHIRANI, R. *An Introduction to the Bootstrap*. Chapman and Hall, 1993.
- [7] HAGAN, M., AND MENHAJ, M. Training feedforward networks with the marquardt algorithm. *IEEE transactions on Neural Networks* 5, 6 (1994), 989-993.