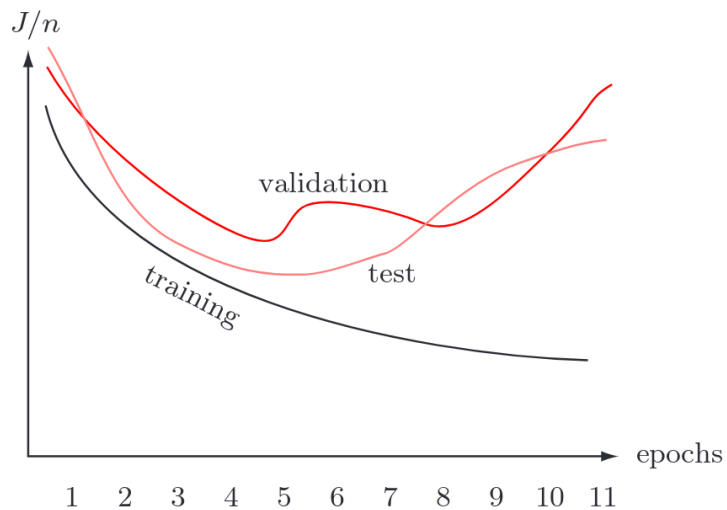
Generalizacja i regularyzacja sieci MLP

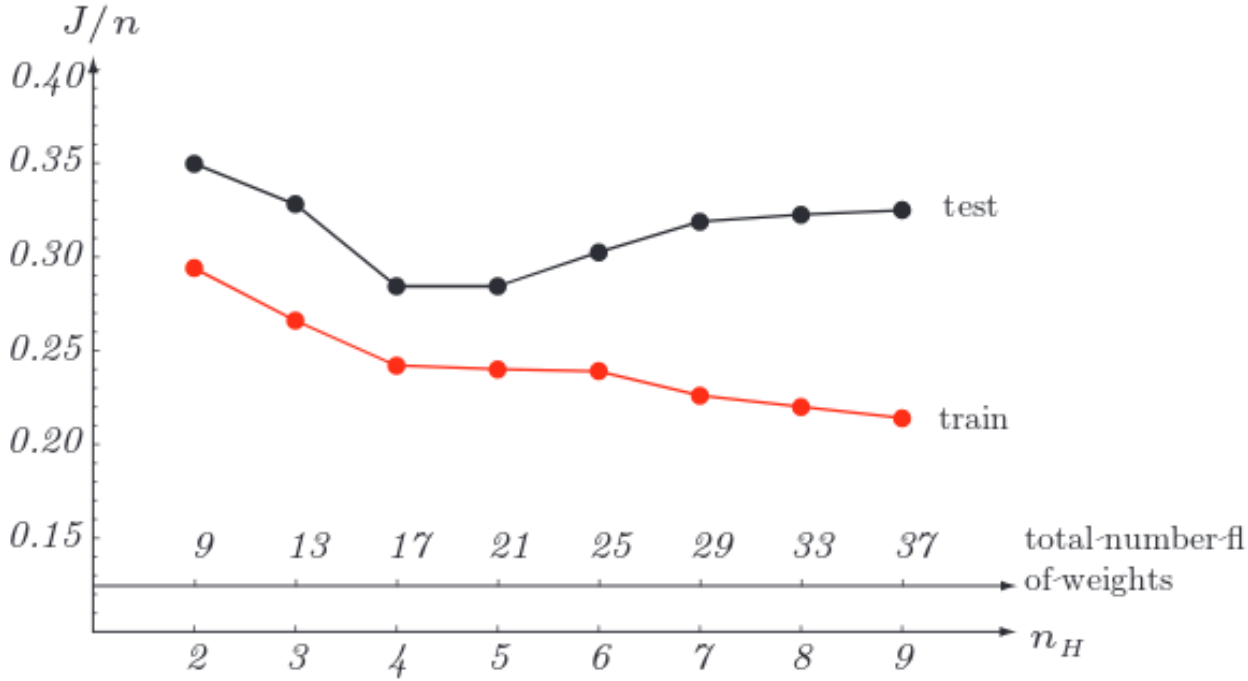
Generalizacja

- Na zbiorze treningowym błąd jest w stanie zawsze osiągnąć 0
- **Generalizacja** jest celem uczenia - uogólnienie reguły, która wytworzyła dane. Dążymy do minimalizacji błędu na danych, które nie zostały użyte w treningu.
- Zbiór **walidacyjny** - wyodrębniony fragment danych (np. ze zbioru uczącego) pozwala na ocenę błędu generalizacji - przydatny przy określaniu punktu zatrzymania treningu



Duda, Hart, Pattern Recognition

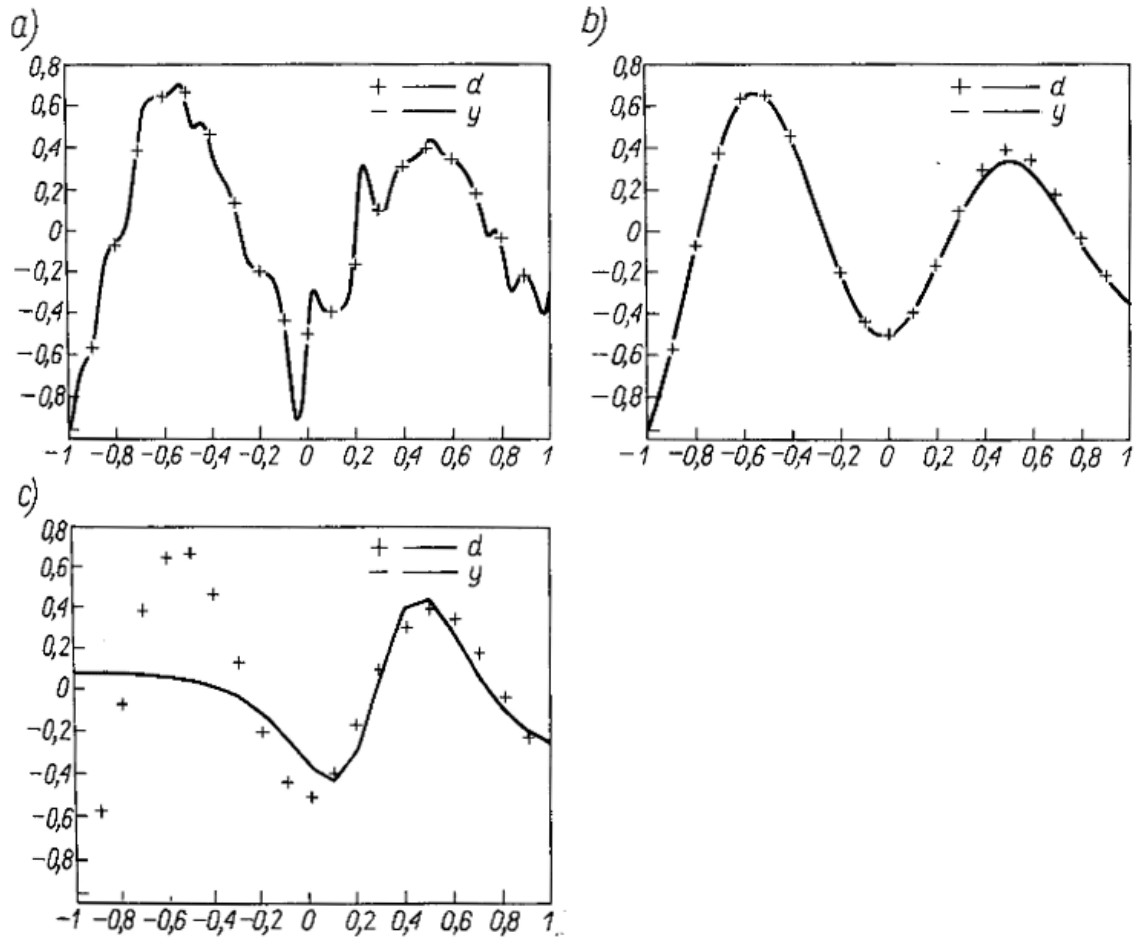
Rozmiar sieci



- ilość wag określa ilość stopni swobody - nie powinna przekraczać liczby przypadków uczących (np. $n/10$)
- za dużo wag - model uczy się na pamięć (przeuczenie)
- za mało wag - model zbyt prosty (niedouczony)

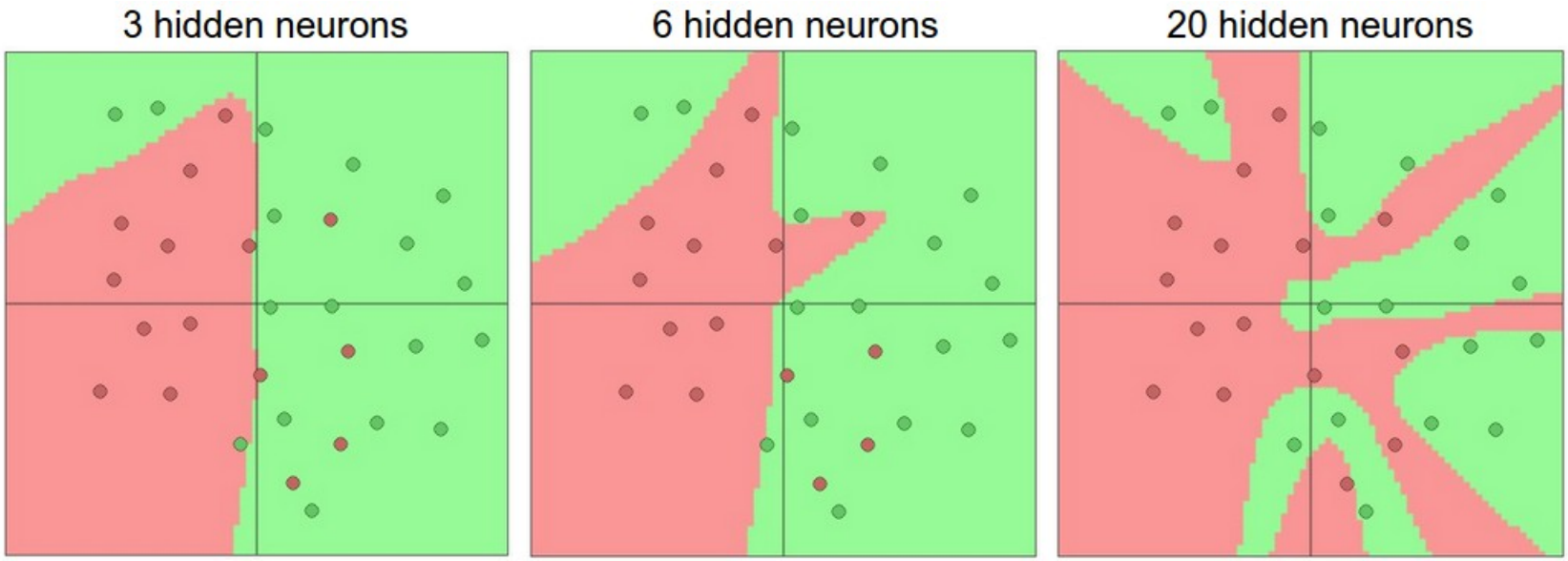
Rozmiar warstwy ukrytej

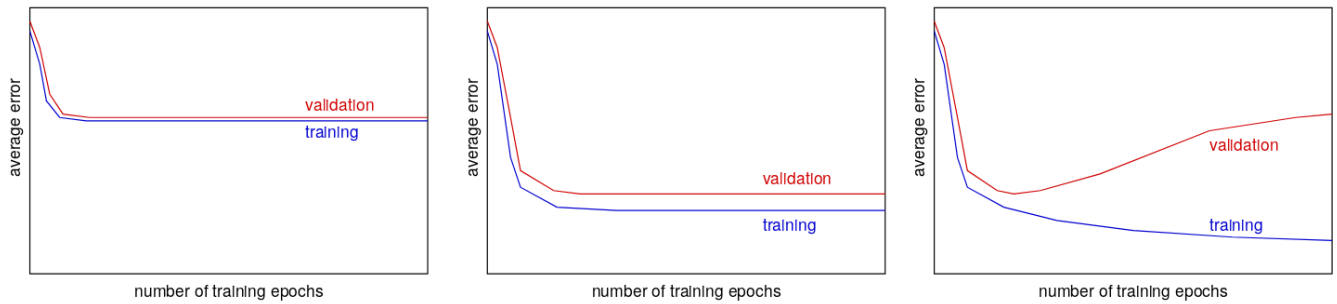
Zdolność uogólniania w problemie aproksymacji



Rozmiar warstwy ukrytej

Zdolność uogólniania w problemie klasyfikacji





- niedouczenie - błąd treningowy i walidacyjny pozostają duże
- przeuczenie - bład walidacyjny rośnie a bład treningowy maleje

Rys: Riedmiller, Machine Learning

Regularyzacja

Regularyzacja to metody, których celem jest poprawienie generalizacji

- dobór wielkości (liczby neuronów) modelu, preferowane najprostsze rozwiązania (brzytwa Ockhama)
  - z pośród wielu modeli wybierz ten o najmniejszym błędzie walidacyjnym i najmniejszej liczbie parametrów (neuronów)
  - metody konstrukcyjne (rosnące) - zacznij od najprostszego modelu i zwiększaj jego złożoność w kolejnych iteracjach
  - pruning - usuwanie nadmiarowych połączeń lub neuronów z wytrenowanej sieci
  - sieci ontogeniczne (rozrastające się i kurczące się)
- małe wartości wag są preferowane
  - wagi zerowe oznaczają brak połączenia
  - neurony sigmoidalne z małymi wagami są w przybliżeniu liniowe

Regularyzacja

- modyfikacje funkcji kosztu wymuszające odpowiednią strukturę sieci, np. wymuszające minimalizację wartości wag

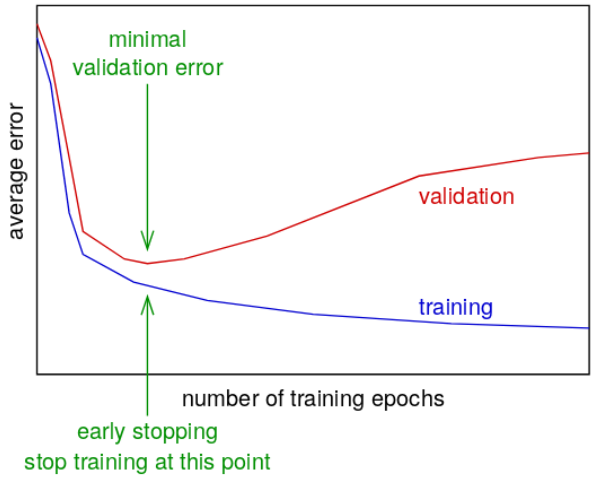
$$\bar{E}(\mathbf{w}) = E(\mathbf{w}) + \lambda\Omega(\mathbf{w})$$

  gdzie $\lambda > 0$ steruje wielkością regularyzacji
- wczesne zatrzymanie treningu, zanim błąd walidacyjny wzrośnie
- zwiększenie liczby danych lub przetransformowanie cech do „przyjemniejszej” postaci
- dodanie szumu do wag lub danych treningowych
- selekcja cech - wypór tylko istotych cech do czuenia
- uśrednianie wyników z wielu modeli, boosting, baging

Trening i walidacja

- uczenie sieci minimalizuje bład treningowy a nie błąd generalizacji
- zbiór walidacyjny pozwala oszacować bład generalizacji w trakcie treningu
- zbiór testowy - uzywany wyłacznie do ewalucaji nauczonego modelu
- kroswalidacja - metoda pozwalająca na oszacowanie błędu generaliazcji i wariancji modelu poprzez powtaraznie treningu i ewaluacji na kolejnych podziałach zbioru uczącego
- k krotna kroswalidacja - dzieli zbiór na k częśći, gdzie $k-1$ jest używanych do treningu a reszta do testu
- wyznaczamy średni bład z k treningów
- kroswalidacja leave-one-out - gdy N rózne liczbie wektorów uczących

Wczesne zatrzymanie



- przerwij trening, gdy błąd walidacyjny zacznie rosnąć, często wystarczy tylko kilka iteracji
- zapamiętaj model o najmniejszym błędzie walidacyjnym
- wymaga wydzielenia części zbioru treningowego, więc zmniejszenie liczby próbek uczących

Rys: Riedmiller, Machine Learning

Dobór liczby neuronów

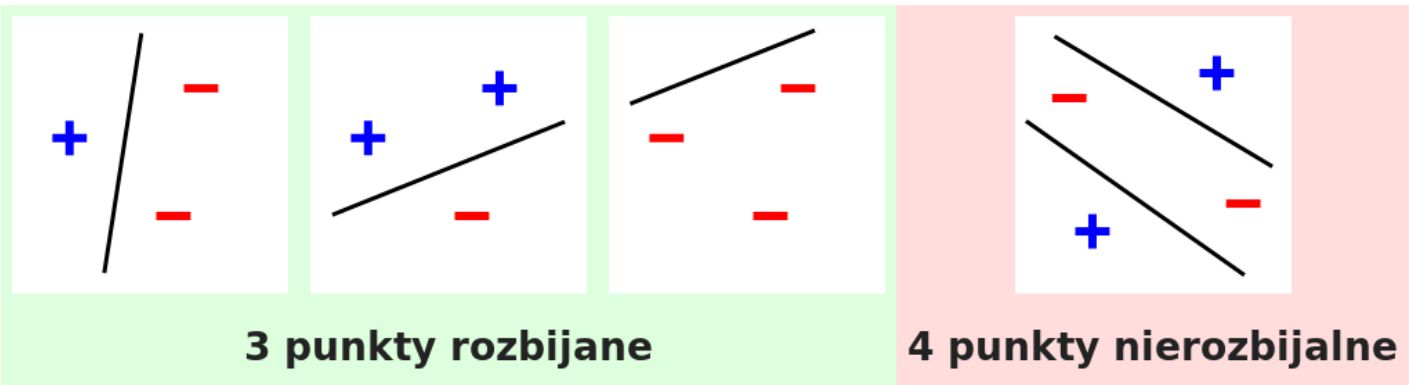
Probabilistyczne oszacowanie błędu generalizacji sieci MLP klasyfikującej

$$E_G(\mathbf{w}) \leq E_T(\mathbf{w}) + \epsilon\left(\frac{N}{D}, E_T\right)$$

gdzie
N - liczba wzorców uczących,
D - miara złożoności Vapnika-Chervonenkisa (VC dimension)
ϵ - przedział ufności maleje ze wzrostem $\frac{N}{D}$
Przeuczenie może zajść gdy $D > N$

Wymiar VC

Wymiar VC klasyfikatora to największa liczba punktów, którą klasyfikator jest w stanie rozbić, tj. podzielić przy dowolnej kombinacji etykiet (2^N możliwości)



Dla perceptronu $D = 3$

Wymiar VC dla MLP

Dla sieci MLP

$$2\left\lceil \frac{N_h}{2} \right\rceil d \leq D \leq 2N_w(1 + \log N_n)$$

N_h - ilość neuronów ukrytych
d - ilość cech (wymiar przestrzeni wejściowej)
N_w - liczba wag
N_n - liczba wszystkich neuronów

- w praktyce $D \approx N_w$
- liczba próbek powinna być kilkukrotnie (np. 10 razy) większa od wymiaru VC

Regularyzacja L_2

Regularyzacja L_2 (weight decay, regularyzacja Tichonova) - czynnik regularyzacyjny dążący do zmniejszenia wartości wag

$$\hat{E}(\mathbf{w}) = E(\mathbf{w}) + \frac{1}{2}\lambda \sum_{ij} w_{ij}^2$$

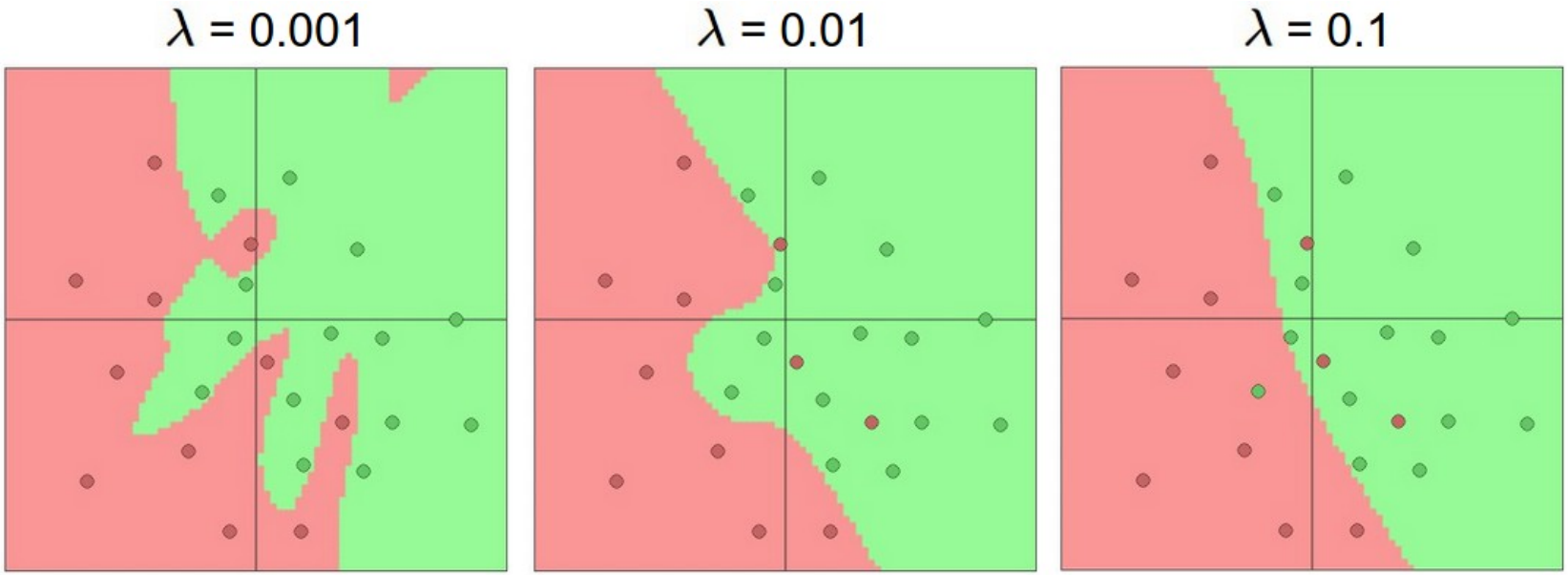
gdzie $\lambda > 0$ decyduje o sile regularyzacji
Zmniejszone są wszystkie wagi w trakcie uczenia

$$\hat{w}_{ij} = (1 - \lambda\eta) w_{ij}$$

Możliwe modyfikacje:

- wagi, które zmalały poniżej pewnego progu mogą być usunięte
- usuwamy neurony dla których $\sum |w_i|$ jest bliskie zeru

Regularyzacja



Rys: http://cs231n.github.io/neural-networks-1/

Zmodyfikowany człon kary:

$$\hat{E}(\mathbf{w}) = E(\mathbf{w}) + \frac{1}{2}\lambda \sum_{ij} \frac{w_{ij}^2}{1 + \sum_k w_{ik}^2}$$

Minimalizacja E powoduje:

- zmniejszenie wartości wag w_{ij}
- eliminację neuronów dla których $\sum_k |w_{ik}|$ jest bliskie zera

Regularyzowana zmiana wag zależna jest od wartości w_{ij}

$$\hat{w}_{ij} = \left(1 - \lambda\eta \frac{1 + 2\sum_{k \neq j} w_{ij}^2}{\left(1 + \sum_k w_{ik}^2\right)^2} \right) w_{ij}$$

Dla neuronów z dużym $\sum_k |w_{ik}|$ czynnik regularyzacyjny zanika

Regularyzacja L_1

$$\hat{E}(\mathbf{w}) = E(\mathbf{w}) + \lambda \sum_{ij} |w_{ij}|$$

$$\nabla \hat{E}(\mathbf{w}) = \nabla E(\mathbf{w}) + \lambda \operatorname{sgn} \mathbf{w}$$

regularyzacja wpływa na gradient ze stałą wartością (zależy tylko od znaku w_{ij})

$$\hat{w}_{ij} = \begin{cases} w_{ij} - \lambda\eta & \text{dla} \quad w_{ij} > 0 \\ w_{ij} + \lambda\eta & \text{dla} \quad w_{ij} < 0 \end{cases}$$

Regularyzacja L_1 daje rzadsze rozwiązanie od L_2

Metody wrażliwościowe redukcji sieci

- Eliminacja wag na podstawie jej wpływu na wartość błędu
- Wagi o małej wartości $|w_i|$ są mniej istotne od dużych wag
- wrażliwość połączenia

$$S_{ij} = E - E(w_{ij} = 0)$$

- połączenia o najmniejszej wrażliowści usuwa się po czym sieć jest douczana
- usuwamy neuron dla którego wszystkie dochodzące (lub wychodzące) połączenia są wyzerowane

Optimal Brain Damage (LeCun)

Założenie: hesjan $\mathbf{H}$ jest diagonalnie dominujący, więc uwzględniamy tylko składową diagonalną.

Z rozwinięcia w szereg Tylora i przyjmując $\Delta E = 0$ (punkt zbieżności, sieć wytrenowana)

$$\Delta E = \frac{1}{2}\Delta \mathbf{w}^T \mathbf{H} \Delta \mathbf{w} = \frac{1}{2}\sum_i H_{ii} \Delta w_i^2$$

Miara ważności wagi

$$S_i = \frac{1}{2}\frac{\partial^2 E}{\partial^2 w_i} w_i^2$$

Wagi o najmniejszym S_i mogą być usunięte z wytrenowanej sieci.

Optimal brain Damage

1. Wytrenuj sieć dowolnym algorytmem uczenia
2. Wyznacz diagonalne elementy hesjanu oraz wartości wrażliwości S_i
3. Posortuj wagi zgodnie z rosnącymi wartościami S_i i obetnij te o najmniejszych wartościach.
4. Wróć do punktu 1

Redukcja neuronów o małej aktywności

- Neurony o niewielkiej aktywności (których sygnał wyjściowy nie zmienia się dla zbioru treningowego) można usunąć bez szkody dla generalizacji
- duża aktywność neuronu świadczy o jego przydatności
- modyfikacja funkcji kosztu (Y. Chaurin)

$$\hat{E} = E + \lambda \sum_{i=1}^{k} \sum_{j=1}^{n} e(\Delta_{ij}^2)$$

gdzie Δ_{ij} oznacza zmianę sygnału wyjściowego i-tego neuronu dla j-tego wektora treningowego

- przykładowy czynnik korelacyjny

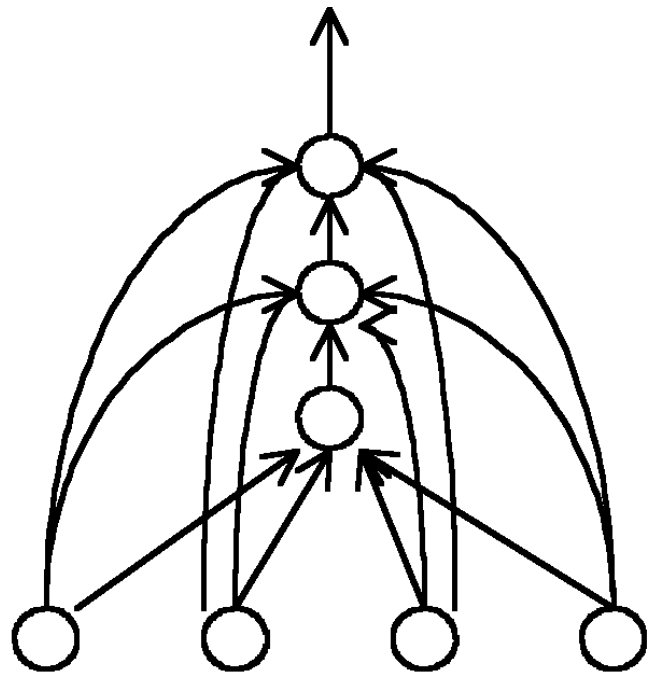
$$e = \frac{1}{1 + \Delta_{ij}^2}$$

Architektury konstruktywne (rozrastające się)

- automatycznie dobierają złożoność modelu do złożoności problemu
- od prostych do złożonych modeli, strategia zachłanna
- przedwczesne przerwanie uczenia nie musi być katastrofą
- (zazwyczaj) niski koszt obliczeniowy, np. w każdym cyklu douczamy tylko dodatkowy neuron, reszta połączeń jest „zamrożona”
- możliwość budowania sieci o różnorodnych funkcjach aktywacji

Algorytm wieżowy

1. dodaj neuron tworząc nową warstwę
2. trenuj do uzyskania zbieżności
3. zamróź wagi
4. wróć do punktu 1

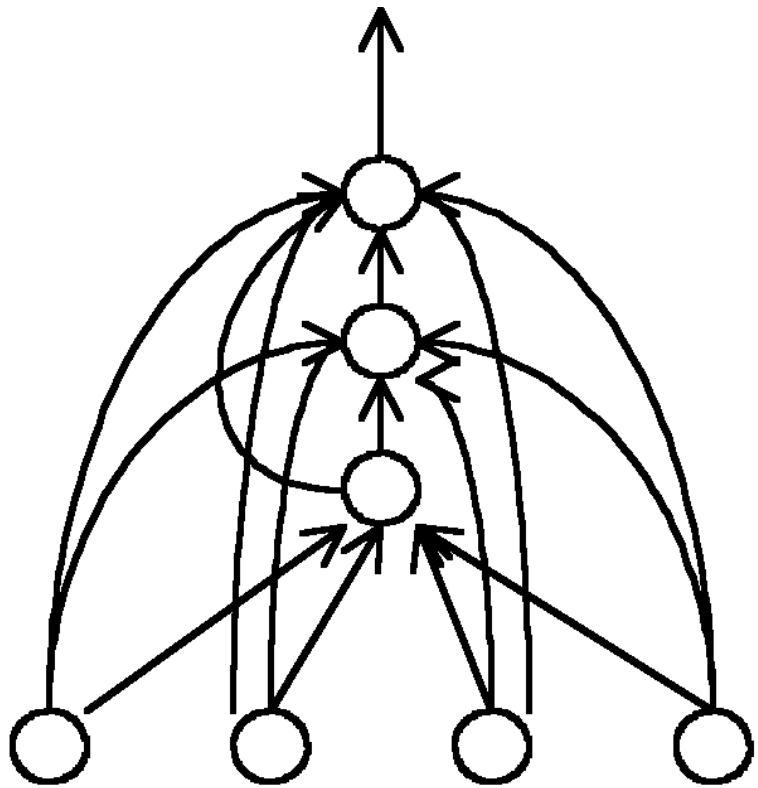


Zbiega się po skończonej liczbie kroków dla wypukłych danych.

Każda warstw usuwa przynajmniej jeden błąd, ale generalizacja może być kiepska.

Algorytm piramidalny

Uczenie - podobnie jak w algorytmie wieżowym.
Każdy neuron posiada wejście do wszystkich poprzednich warstw.



Korelacja kaskadowa (Fahlman i Labiere, 1989)

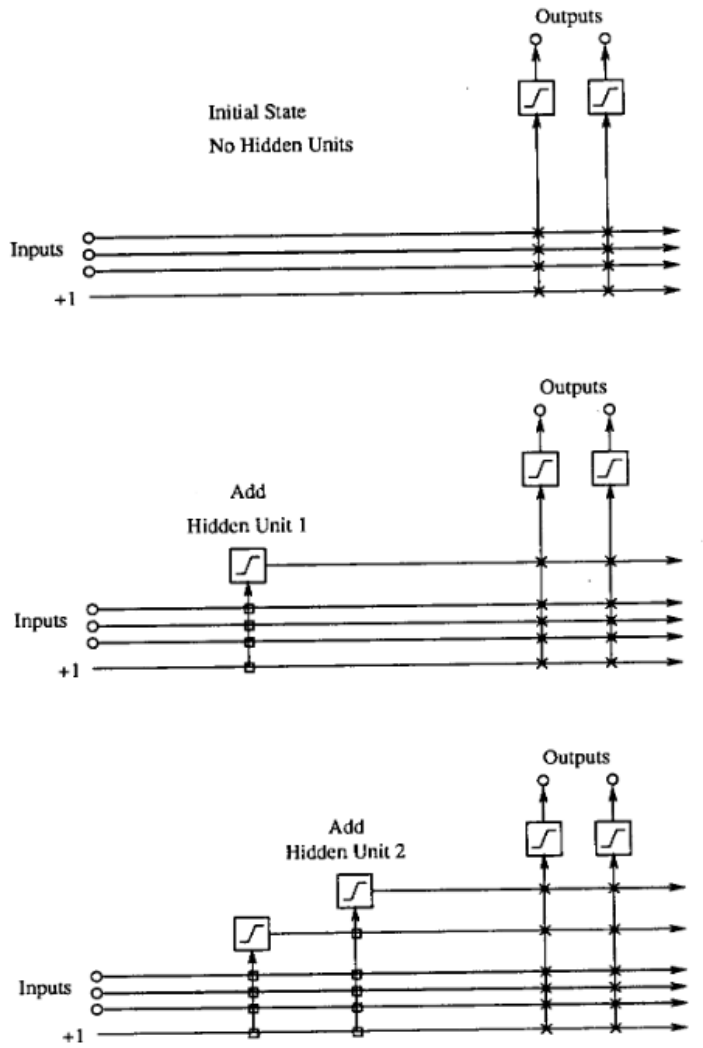
Sieć rozrastająca się:

- zaczynamy od treningu sieci bez warstwy ukrytej
- w kolejnych krokach dodawany jest neuron do warstwy ukrytej, wejścia neuronu połączone są ze wszystkimi wejściami sieci i wyjściami poprzednio dodanych neuronów ukrytych
- wagi neuronu dobierane są w procesie maksymalizacji korelacji nowego neuronu k z błędem wykazywanym przez neurony wyjściowe

$$C = \sum_{j=1}^{M} \left| \sum_{i=1}^{N} (o(\mathbf{x}_i) - \overline{o}) \left((y_{ij} - f_j(\mathbf{x}_i)) - (\overline{y}_{ij} - \overline{f}_j(\mathbf{x}_i)) \right) \right|$$

gdzie N - liczba wzorców, M - liczba wyjść sieci

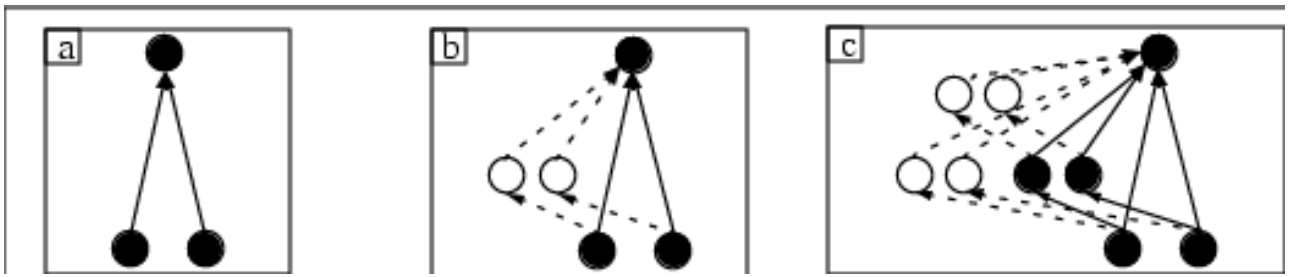
Korelacja kaskadowa



Kaskadowa korelacja

- wagi kandydata maksymalizujące korelację są „zamrażane” - douczaniu podlegają wyłącznie wagi wyjściowe sieci
- jeśli wyjścia neuronu kandydata są skorelowane dodatnio z błędem to w wyniku treningu wykształci wagi, które mają szansę zniwelować ten błąd
- w każdym kroku rozpatruje się zbiór kandydatów (od 5 do 10), mogą posiadać różne funkcje aktywacji (sigmoidalna, gaussowaka, itp.),
- kandydaci trenowani są równolegle konkurując ze sobą, wybiera się najlepszego (o największej korelacji)

Flex net (Mohraz, Protzel 1996)



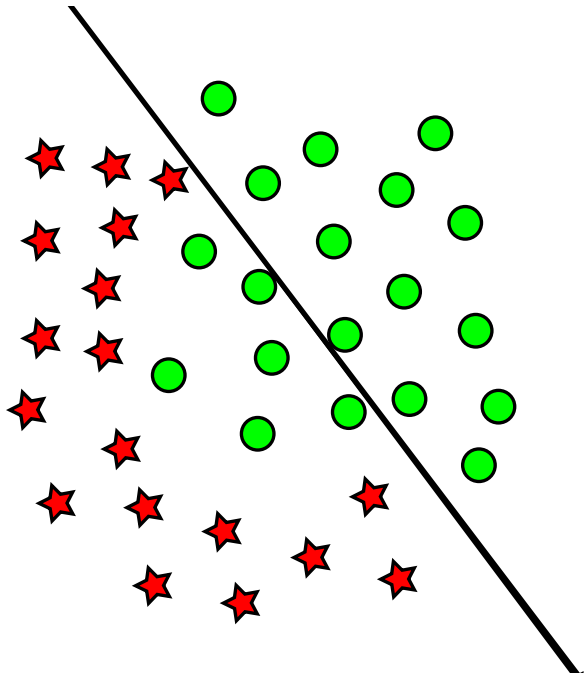
1. startuj bez warstwy ukrytej
2. dodaj kandydatów i trenuj sieci niezależnie
   Kandydaci mogą pojawić się w istniejących warstwach lub tworzyć nowe warstwy
3. z pośród kandydatów wybierz te, które najlepiej poprawiły wynik
4. wróć do punktu 2 aż do uzyskania zadowalających rezultatów

Klasyfikator cząstkowy

Niech $\mathbb{Q}^+ \cup \mathbb{Q}^- \subset \mathbb{X} \quad \wedge \quad \mathbb{Q}^+ \cap \mathbb{Q}^- = \emptyset$

Klasyfikator cząstkowy f_c

daje odpowiedź $+1$ dla co najmniej jednego obiektu ze zbioru $\mathbb{Q}^+$ oraz odpowiedź -1 dla wszystkich elementów ze zbioru $\mathbb{Q}^-$



Niech $\mathbb{R} = \{(\mathbf{x}_i, y_i) : f_c(\mathbf{x}_i) = +1\} \subset \mathbb{Q}^+$

Dla funkcji logicznych (wejścia binarne) zawsze istnieje klasyfikator cząstkowy w postaci perceptronu

Ogólna konstruktywistyczna metoda sekwencyjna

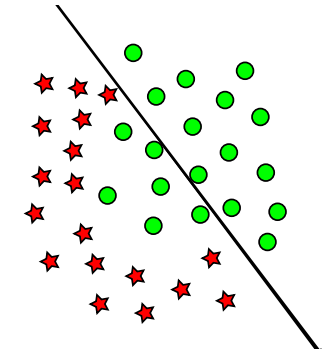
General Sequential Constructive Method (GSCM, Musseli, 1998)

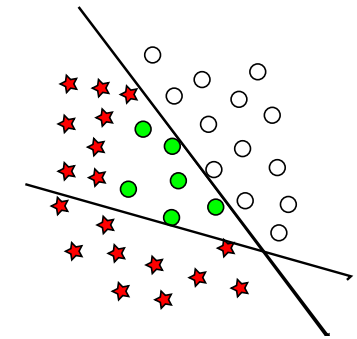
Algorytm 1 GSCM problem dwuklasowy

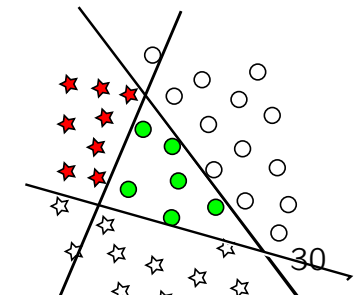
Input: Zbiór treningowy $\mathbb{D}$

Output: Sieć jednowarstwowa

1: $h \leftarrow 0$ ▷ pusta warstwa ukryta
2: **while** zbiór $\mathbb{D}$ zawiera przypadki z przeciwnych klas **do**
3: $h \leftarrow h + 1$
4: wybierz etykietę $d_h = \{-1, +1\}$
5: wytrenuj klasyfikator cząstkowy f_h dla klasy d_h
6: $\mathbb{D} \leftarrow \mathbb{D} \setminus \mathbb{R}_h$
7: Utwórz wynikową sieć zawierającą klasyfikatory cząstkowe w warstwie ukrytej







Przykładowe wagi połączeń do warstwy wyjściowej

$$u_0 = \sum_{j=1}^{h} u_j + d_{h+1}, \qquad u_j = d_j 2^{h-j} \quad \text{dla} \quad j = 1, \ldots, h$$

Przykłady algorytmów

Realizacja klasyfikatora cząstkowego za pomocą perceptronu:

Algorytm nieregularnego podziału (Irregular Partitioning IPA, Marchand, Golea, 1993)

1. startuje z pustego zbioru odseparowanych $\mathbb{R} = \emptyset$
2. dla kolejnych wektorów $\mathbf{x} \in \mathbb{Q}^+ \setminus \mathbb{R}$
   trenuje perceptron w poszukiwaniu hiperpłaszczyzny oddzielającej $\{\mathbf{x}\} \cup \mathbb{R}$ od $\mathbb{Q}^-$
   jeżeli istnieje separacja to $\mathbb{R} \leftarrow \mathbb{R} \cup \{\mathbf{x}\}$
3. zwróć ostatnio uzyskany perceptron

Przykłady algorytmów

Realizacja klasyfikatora cząstkowego za pomocą perceptronu:

Algorytm zamiany etykiet (Target Switch TSA, Campbell, Vicente, 1995)

1. wytrenuj perceptron dowolną metodą
2. jeżeli istnieje $\mathbf{x} \in \mathbb{Q}^-$, który jest źle klasyfikowany to znajdź najdalej oddalony od płaszczyzny decyzyjnej, błędnie klasyfikowany wektor z $\mathbb{Q}^+$ i zmień jego etykietę (przenieś do $\mathbb{Q}^-$)
3. powtarzaj aż do uzyskania perceptronu realizującego klasyfikator cząstkowy

Algorytmy rozrastające się - podsumowanie

- problem z przeuczeniem, kiedy zaprzestać rozrost? Za dużą sieć można przyciąć
- koszt obliczeń zależy od czasu uczenia pojedynczego KC
- złożone struktury danych mogą nie zostać wykryte przez dodanie pojedynczego neuronu, zachłanna strategia nie zawsze jest najlepsza
- algorytmy rosnące nie gwarantują najprostszych sieci
- niektóre tworzą specyficzne architektury
- sieci ontogeniczne - rosną i kurczą się w trakcie treningu
  - wyszukiwanie najlepszej architektury, stosuje się np. alg. genetyczne, ewolucyjne
  - zazwyczaj wymagające obliczeniowe

Rozmiar zbioru treningowego

- większa liczba danych zmniejsza ryzyko przeuczenia
- „there's is no data like more data"
- dodanie szumu do danych uodparnia sieć na drobne zmiany w przestrzeni wejściowej
- sztuczne zwielokrotnianie danych, często stosowane z dobrymi rezultatami
  - w klasyfikacji obrazów: zmiany kontrastów i nasycenia barw, przesunięcia, obroty, itp.
  - w analizie mowy: pogłos, szum otoczenia, zmiana głośności, przyspieszenie i zwolnienie mowy, itp..

Selekcja i ekstrakcja cech

- dane treningowe często zawierają cechy, które nie wnoszą wiele w treningu modelu i mogą wpływać negatywnie na trening
- selekcja cech usuwa nieistotne zmienne zmniejszając rozmiar zbioru treningowego
- dodanie cech, które niosą wartościową informację poprawia generalizację
- istnieje wiele metod, najczęściej dobierane są do specyfiki problemu
- niezbalansowane klasy - częsty problem w klasyfikacji