Εκπαίδευση ΤΝΔ με ελαχιστοποίηση του τετραγωνικού σφάλματος εκπαίδευσης

Διαφάνειες από ΕΑΠ-ΠΛΗ31

Α. Λύκας, Παν. Ιωαννίνων

Ελαχιστοποίηση συνάρτησης σφάλματος

- Εκπαίδευση ΤΝΔ: μπορεί να διατυπωθεί ως **πρόβλημα ελαχιστοποίησης μιας συνάρτησης σφάλματος E(w) ως προς το διάνυσμα $w=(w_1,\ldots w_L)$** των παραμέτρων του ΤΝΔ (βάρη και πολώσεις).
- Συνήθως αυτό που χρειάζεται είναι ο υπολογισμός των **μερικών παραγώγων $\partial E/\partial w_i$** του σφάλματος ως προς τις παραμέτρους του ΤΝΔ
- Πολλές αποδοτικές **μέθοδοι αριθμητικής ελαχιστοποίησης** βασίζονται στις μερικές παραγώγους
- Πιο δημοφιλής μέθοδος για τα ΤΝΔ: **gradient descent** (κάθοδος βασισμένη στην κλίση)
- Είναι και η απλούστερη

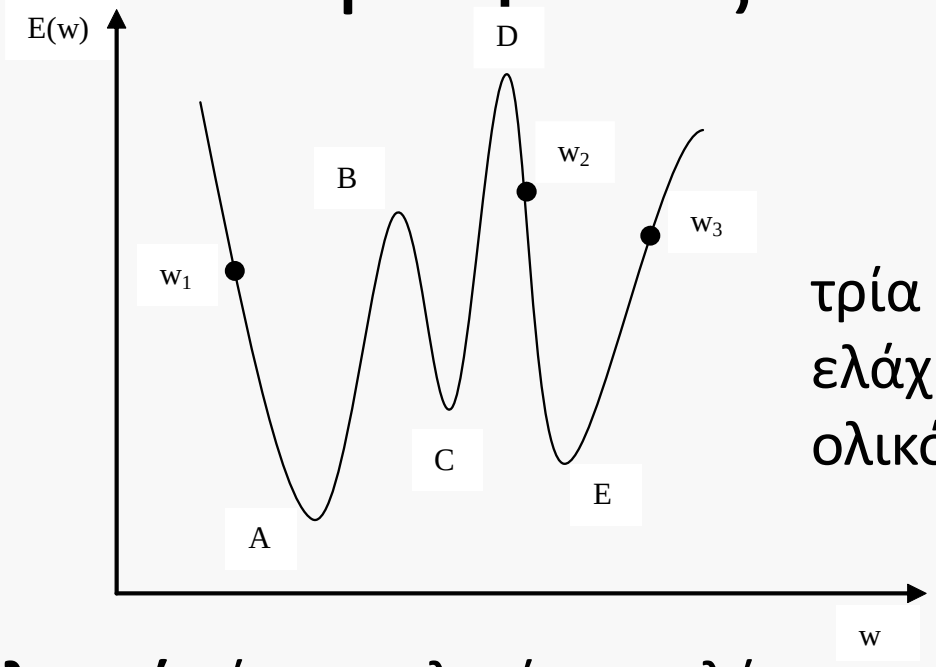
Ελαχιστοποίηση συνάρτησης σφάλματος

- Εστω συνάρτηση σφάλματος E(w) την οποία θέλουμε να ελαχιστοποιήσουμε ως προς w:

  να βρούμε το **σημείο ελαχίστου $\mathbf{w^*}$** στο οποίο η συνάρτηση $E(w^*)$ γίνεται ελάχιστη.

- Τα **ακρότατα** μιας συνάρτησης ικανοποιούν τη συνθήκη ότι η $\mathbf{\partial E/\partial w_i=0}$ για κάθε i=1,…,L.
- Μια συνάρτηση μπορεί να έχει περισσότερα του ενός ελάχιστα που ονομάζονται **τοπικά ελάχιστα**.
- Το καλύτερο (αυτό με την μικρότερη τιμή) από τα τοπικά ελάχιστα ονομάζεται **ολικό ελάχιστο**.

Ελαχιστοποίηση συνάρτησης σφάλματος



τρία τοπικά ελάχιστα: (A, C, E)
ολικό ελάχιστο: A

- **Αναλυτική** εύρεση ελαχίστων: λύση του συστήματος εξισώσεων **$\partial E/\partial w_i=0$, i=1,…,L. Δυνατή μόνο όταν η E(w) είναι τετραγωνική.**
- Καταφεύγουμε σε **μεθόδους αριθμητικής ανάλυσης (επαναληπτικές)**

Ελαχιστοποίηση συνάρτησης σφάλματος

Επαναληπτικές μέθοδοι:

- ξεκινούν από μια αρχική τιμή (συνήθως τυχαία) $w^{(0)}$.
- Σε κάθε επανάληψη t το διάνυσμα των βαρών τροποποιείται κατά Δw(t):

$$w(t+1) = w(t) + \Delta w(t)$$

ώστε η συνάρτηση να μειώνεται:

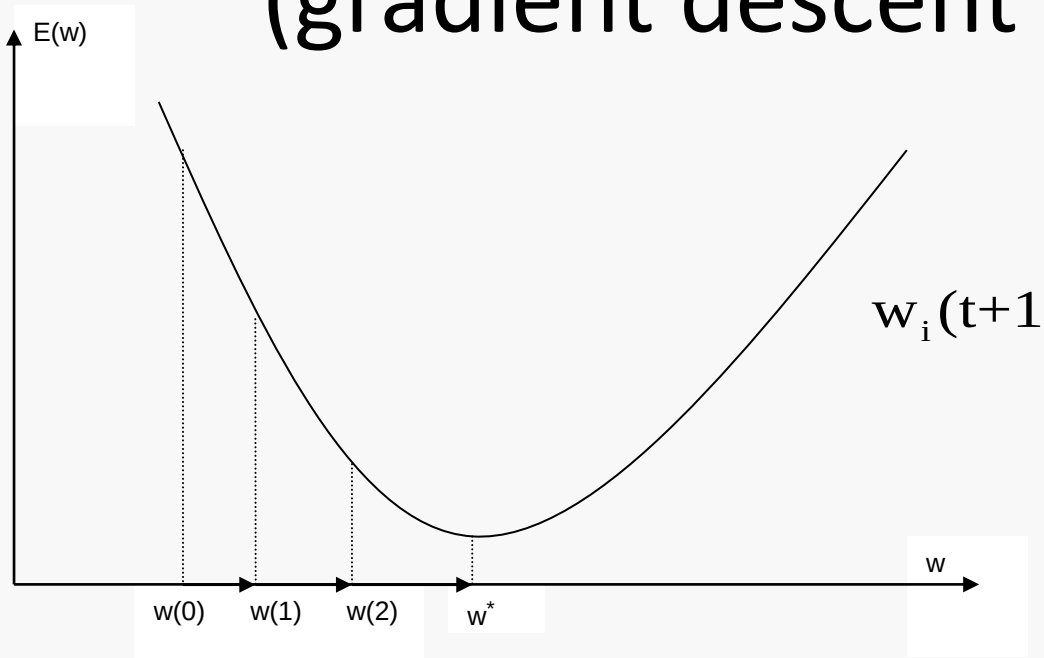
$$E(w(t+1)) \leq E(w(t)).$$

- **Οι αλγόριθμοι βελτιστοποίησης διαφοροποιούνται στον τρόπο με τον οποίο υπολογίζεται η μεταβολή Δw(t).**
- Συνήθως χρησιμοποιείται πληροφορία σχετική με την κλίση της συνάρτησης.
-Η επαναληπτική διαδικασία συγκλίνει σε **ένα τοπικό ελάχιστο $\mathbf{w}^*$** της συνάρτησης E(w).

Ελαχιστοποίηση συνάρτησης σφάλματος

- Οι μέθοδοι υλοποιούν **τοπική ελαχιστοποίηση**.
- **Αν η συνάρτηση E(w) έχει πολλά τοπικά ελάχιστα, το ελάχιστο στο οποίο θα καταλήξει η μέθοδος εξαρτάται από την αρχική τιμή του διανύσματος $w^{(0)}$ (η οποία συνήθως επιλέγεται τυχαία).**
- Υπάρχει πιθανότητα ‘εγκλωβισμού’ σε ανεπιθύμητα (με υψηλή τιμή) τοπικά ελάχιστα της συνάρτησης σφάλματος.
- Μια απλή λύση: πολλές εκτελέσεις από διαφορετικές αρχικές τιμές. Κρατάμε την καλύτερη από τις λύσεις που βρίσκουμε.

Κάθοδος με βάση την κλίση (gradient descent (GD))



$$w_i(t+1)=w_i(t)-\eta\frac{\partial E}{\partial w_i},\ i=1,\ldots,L$$

- Ξεκινάμε από μια αρχική τιμή των βαρών $w_i(0)$ (συνήθως τυχαία).
- Σε κάθε επανάληψη t:
  - Υπολογισμός της κλίσης και **ενημέρωση των w_i**
  - Ελέγχουμε για τερματισμό της μεθόδου
  - Αν ναι, τερματίζουμε, αλλοιώς t:=t+1 και συνεχίζουμε.

Ρυθμός μάθησης

- η: ονομάζεται **βήμα καθόδου**
- Στην περίπτωση της εκπαίδευσης των ΤΝΔ ονομάζεται **ρυθμός μάθησης (learning rate).**
- Καθορίζει εάν θα μετακινηθούμε στην κατεύθυνση μείωσης της συνάρτησης με μικρά ή μεγάλα βήματα.
- Μικρός ρυθμός μάθησης συνεπάγεται ομαλή κάθοδο προς το τοπικό ελάχιστο, αλλά απαιτούνται περισσότερες επαναλήψεις.
- Μεγάλος ρυθμός μάθησης συνεπάγεται ταχύτερη κάθοδο (μεγαλύτερα βήματα, λιγότερες επαναλήψεις), αλλά και αυξημένη πιθανότητα εμφάνισης **ταλαντώσεων** γύρω από το σημείο ελαχίστου.

Εκπαίδευση του απλού νευρώνα με ελαχιστοποίηση σφάλματος

- Σύνολο παραδειγμάτων εκπαίδευσης $D=\{(x^n,t^n)\}$, $n=1,\ldots,N$
- $x^n=(x_{n1,\ldots,}x_{nd})^T$ και t^n αριθμός
- Εκπαίδευση απλού νευρώνα με βάρη $w=(w_{0,}w_{1,}\ldots,w_d)^T$ και συναρτ. ενεργοποίησης $g(u)$.
- Για είσοδο το x^n: $u(x^n; w)=\Sigma_i\, w_i\, x_i + w_0$, $o(x^n; w)=g(u(x^n; w))$

- Στην περίπτωση που για κάποιο διάνυσμα βαρών η εκπαίδευση είναι τέλεια θα ισχύει:

$$o(x^n; w)=t^n \text{ για κάθε } n=1,\ldots,N$$

- δηλαδή η έξοδος του νευρώνα για είσοδο x^n θα είναι ίση με την επιθυμητή t^n.

Εκπαίδευση του απλού νευρώνα με ελαχιστοποίηση σφάλματος

- Επομένως μπορούμε να ορίσουμε την **τετραγωνική συνάρτηση σφάλματος εκπαίδευσης:**

$$E(w)=\frac{1}{2}\sum_{n=1}^{N}(t^n-o(x^n;w))^2 \Leftrightarrow E(w)=\sum_{n=1}^{N}E^n(w),\ E^n(w)=\frac{1}{2}(t^n-o(x^n;w))^2$$

- Ως άθροισμα τετραγώνων έχουμε κάτω φράγμα την τιμή μηδέν η οποία προκύπτει όταν έχουμε τέλεια εκπαίδευση.
- Η πιο σημαντική κατηγορία μεθόδων εκπαίδευσης ΤΝΔ για μάθησης με επίβλεψη προκύπτει από την **ενημέρωση του διανύσματος των βαρών w με σκοπό την ελαχιστοποίηση του τετραγωνικού σφάλματος E(w)**.
- Ευρύτερα χρησιμοποιούμενη μέθοδος ελαχιστοποίησης: κάθοδος με βάση την κλίση (gradient descent).

Μερική Παράγωγος του σφάλματος εκπαίδευσης

$$E(w)=\sum_{n=1}^{N} E^n(w),\ E^n(w)=\frac{1}{2}(t^n-o(x^n;w))^2 \qquad \frac{\partial E}{\partial w_i}=?$$

$$\frac{\partial E}{\partial w_i}=\sum_{n=1}^{N}\frac{\partial E^n}{\partial w_i} \qquad \frac{\partial E^n}{\partial w_i}=-(t^n-o(x^n;w))\frac{\partial o(x^n;w)}{\partial w_i}$$

$$\frac{\partial o(x^n;w)}{\partial w_i}=\frac{\partial g(u)}{\partial u}\frac{\partial u(x^n;w)}{\partial w_i}=g'(u)x_{ni},\ i=0,...,d,\ x_{n0}=1$$

$$\frac{\partial E^n}{\partial w_i}=-(t^n-o(x^n;w))g'(u(x^n;w))x_{ni},\ i=0,...,d,\ x_{n0}=1$$

$$\frac{\partial E}{\partial w_i}=-\sum_{n=1}^{N}(t^n-o(x^n;w))g'(u(x^n;w))x_{ni},\ i=0,...,d,\ x_{n0}=1$$

Μερική Παράγωγος του σφάλματος εκπαίδευσης

- Υπολογισμός της μερικής παραγώγου που αντιστοιχεί στο σφάλμα για ένα παράδειγμα εκπαίδευσης (x^n,t^n):
  - εφαρμογή του x^n ως είσοδο στον νευρώνα και υπολογισμός της συνολικής εισόδου $u(x^n;w)$ και της εξόδου $o(x^n;w)$
  - υπολογισμός του **σφάλματος**: $\delta^n = (t^n - o(x^n;w))$
  - υπολογισμός των μερικών παραγώγων ως προς w_i

$$\frac{\partial E^n}{\partial w_i} = -(t^n - o(x^n;w))g'(u(x^n;w))x_{ni},\ i=0,...,d,\ x_{n0}=1$$

Εκπαίδευση του απλού νευρώνα με gradient descent (ομαδική ενημέρωση)

1. Αρχικοποίηση: Θέτουμε t=0, αρχικές τιμές βαρών w(0) και ορίζουμε την τιμή του ρυθμού μάθησης *η*.
2. Σε κάθε επανάληψη t, έστω w(t) το διάνυσμα των βαρών.
   - Αρχικοποιούμε: $\frac{\partial E}{\partial w_i} = 0$, i=0,…,L
   - Για n=1,…,N:
     - εφαρμογή του x^n ως είσοδο στον νευρώνα και υπολογισμός της συνολικής εισόδου $u(x^n;w)$ και της εξόδου $o(x^n;w)$
     - υπολογισμός του *σφάλματος*: $\delta^n = (t^n - o(x^n;w))$.
     - $\frac{\partial E}{\partial w_i} := \frac{\partial E}{\partial w_i} - \delta^n g'(u(x^n;w))x_{ni},\ i=0,...,d,\ x_{n0} = 1$
   - Ενημερώνουμε τις τιμές των βαρών: $w_i(t+1)=w_i(t)-\eta\frac{\partial E}{\partial w_i},\ i=1,...,L$
3. Ελέγχουμε για τερματισμό της μεθόδου. Αν ναι, τερματίζουμε.
4. t:=t+1, μετάβαση στο βήμα 2.

Εκπαίδευση του απλού νευρώνα με gradient descent (ομαδική ενημέρωση)

- **Ομαδική ενημέρωση:** η ενημέρωση των βαρών πραγματοποιείται **μια φορά** στο τέλος κάθε εποχής με βάση την μερική παράγωγο του συνολικού σφάλματος, αθροίζοντας δηλαδή τις μερικές παραγώγους των επιμέρους σφαλμάτων.
- Ο μετρητής επαναλήψεων t μετράει τις **εποχές**.
- Η ομαδική ενημέρωση αντιστοιχεί στην μαθηματικά αυστηρή υλοποίηση της μεθόδου gradient descent για την ελαχιστοποίηση του σφάλματος E(w): $w_i(t+1)=w_i(t)-\eta\frac{\partial E}{\partial w_i},\ i=1,\ldots,L$

- Σε κάθε εποχή t το σφάλμα E(w) θα πρέπει να μειώνεται (εάν ο ρυθμός μάθησης είναι επαρκώς μικρός)

Εκπαίδευση του απλού νευρώνα με gradient descent (**σειριακή ενημέρωση**)

- Η συνάρτηση **E(w)** που θέλουμε να ελαχιστοποιήσουμε έχει την εξής χρήσιμη ιδιότητα: **εκφράζεται ως το άθροισμα των επιμέρους σφαλμάτων $E^n(w)$**.
- Μια εναλλακτική προσέγγιση για την ελαχιστοποίηση του E(w):
  - Σε κάθε επανάληψη τ εφαρμόζουμε τον κανόνα ενημέρωσης gradient descent για την ελαχιστοποίηση **κάποιου από τα επιμέρους σφάλματα $E^n(w)$:**

$$w_i(\tau+1)=w_i(\tau)+n(t^n-o(x^n;w))g'(u(x^n;w))x_{ni},\ i=0,...,d,\ x_{n0}=1$$

Εκπαίδευση του απλού νευρώνα με gradient descent (**σειριακή ενημέρωση**)

- Αποδεικνύεται ότι εάν όλοι οι όροι $E^n(w)$ επιλέγονται το ίδιο συχνά, τότε το τελικό αποτέλεσμα της μεθόδου είναι η ελαχιστοποίηση του συνολικού σφάλματος $E(w)$
- δηλαδή λειτουργώντας σε κάθε βήμα στην κατεύθυνση μείωσης ενός όρου, επιτυγχάνουμε στο τέλος τη μείωση του αθροίσματος των όρων.
- Αυτό το γεγονός δεν πρέπει να θεωρηθεί ως κάτι προφανές δεδομένου ότι σε κάθε βήμα η αλλαγή των βαρών για την μείωση του όρου $E^n(w)$ δεν μειώνει απαραίτητα και το συνολικό σφάλμα $E(w)$, διότι μπορεί να υπάρχουν άλλοι όροι $E^m(w)$ που να αυξάνουν με την αλλαγή των βαρών.

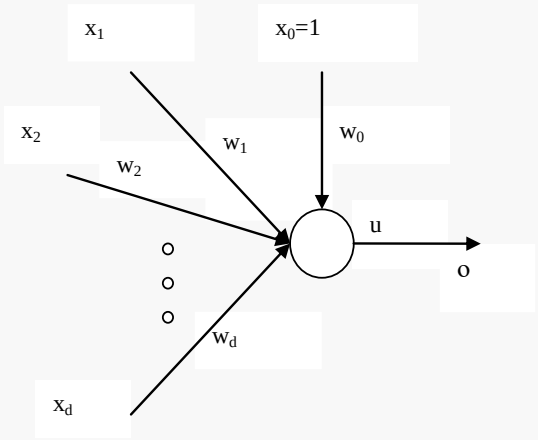
Εκπαίδευση του απλού νευρώνα με gradient descent (**σειριακή ενημέρωση**)

- Η παραπάνω διαδικασία ονομάζεται στοχαστική (stochastic) gradient descent ή on-line gradient descent ή σειριακή (sequential) gradient descent.

- Θα την ονομάζουμε μέθοδο gradient descent *με* **σειριακή ενημέρωση** των βαρών.

- Ενώ στην ομαδική ενημέρωση έχουμε μία ενημέρωση των βαρών ανά εποχή (κύκλος εκπαίδευσης), στην σειριακή ενημέρωση έχουμε N ενημερώσεις.

Εκπαίδευση του γραμμικού νευρώνα



- Ο γραμμικός νευρώνας έχει συνάρτηση ενεργοποίησης g(u)=u, επομένως g’(u)=1.

- **Ομαδική ενημέρωση**: $w_i(k+1)=w_i(k)+n\sum_{n=1}^{N}(t^n-o(x^n;w))x_{ni},\ i=0,...,d,\ x_{n0}=1$

- **Σειριακή ενημέρωση**: $w_i(\kappa+1)=w_i(\kappa)+n(t^n-o(x^n;w))x_{ni},\ i=0,...,d,\ x_{n0}=1$

- Αν $\delta^n=t^n-o(x^n;w)$: $w_i(\kappa+1)=w_i(\kappa)+n\,\delta^n x_{ni}$

κανόνας δέλτα (delta rule)