

Effizientes Online-Training neuronaler Netzwerke

Dissertation zur Erlangung des
naturwissenschaftlichen Doktorgrades
der Bayerischen Julius-Maximilians-Universität
Würzburg

vorgelegt von

Christoph Bunzmann

aus Seb/Ofr.

Institut für Theoretische Physik und Astrophysik
Bayerische Julius-Maximilians-Universität
Würzburg

Dezember 2002

Eingereicht am 3.12.2002
bei der Fakultät für Physik und Astronomie

Beurteilung der Dissertation:

1. Gutachter: PD Dr. M. Biehl
2. Gutachter: Prof. Dr. W. Kinzel

Mündliche Prüfung:

1. Prüfer: PD Dr. M. Biehl
2. Prüfer: Prof. Dr. A. Haase

Tag der mündlichen Prüfung: 16.12.2002

Berichte aus der Physik

Christoph Bunzmann

Effizientes Online-Training neuronaler Netzwerke

Shaker Verlag
Aachen 2003

Die Deutsche Bibliothek - CIP-Einheitsaufnahme

Bunzmann, Christoph:

Effizientes Online-Training neuronaler Netzwerke/Christoph Bunzmann.

Aachen : Shaker, 2003

(Berichte aus der Physik)

Zugl.: Würzburg, Univ., Diss., 2002

ISBN3-8322-1502-6

Copyright Shaker Verlag 2003

Alle Rechte, auch das des auszugsweisen Nachdruckes, der auszugsweisen oder vollständigen Wiedergabe, der Speicherung in Datenverarbeitungsanlagen und der Übersetzung, vorbehalten.

Printed in Germany.

ISBN 3-8322-1502-6

ISSN 0945-0963

Shaker Verlag GmbH • Postfach 101818 • 52018 Aachen

Telefon: 02407 / 95 96 - 0 • Telefax: 02407 / 95 96 - 9

Internet: www.shaker.de • eMail: info@shaker.de

Zusammenfassung

Das Lernen aus Beispielen ist eine Fähigkeit, die man bei Menschen und Tieren beobachtet. Eine naturwissenschaftliche Beschäftigung mit diesem Phänomen zeigt Modellsituationen auf, in denen die wesentlichen Eigenschaften eines solchen komplexen Vorgangs durch relativ einfache mathematische Modelle beschrieben werden können. Während diese Bemühungen bald in technische Anwendungen mündeten, blieb man doch der informationsverarbeitenden Einheit treu, mit der alles angefangen hatte: dem Neuron – nun als mathematisches Modell einer Informationsverarbeitung durch einfache Einheiten.

Inzwischen existiert eine Vielzahl von Algorithmen, um komplizierte neuronale Netzwerke an Beispieldaten anzupassen. Der begrenzende Faktor ist dabei oft, dass nicht genügend Beispiele zur Verfügung stehen, um gute Lernergebnisse zu erzielen. In dieser Arbeit werden zwei Ansätze vorgestellt, um mit einer begrenzten Anzahl von Beispielen ein Netzwerk an die Regel hinter den Daten anzupassen.

Kapitel 1 ist eine allgemeine Einleitung zum Lernen aus Beispielen durch das Training neuronaler Netzwerke.

Kapitel 2 stellt existierende Ansätze und Probleme beim Training von Netzwerken mit zwei informationsverarbeitenden Schichten dar. Als Modell solcher Netzwerke wird die Komitee-Maschine gewählt. Betrachtet man die Anzahl der Beispiele, die pro Freiheitsgrad des Netzwerks benötigt werden, um ein gutes Lernergebnis zu erzielen, so wächst diese bei herkömmlichen Lernverfahren mit der Dimension der Eingabeschicht.

Im Kapitel 3 wird ein Lernalgorithmus vorgestellt, der dieses Problem löst. Dabei wird die schrittweise Optimierung des Netzwerkes durch ein Lernen mit zwei grundsätzlich verschiedenen Abschnitten ersetzt: Vor der Anwendung der schrittweise Optimierung wird die Dimension des Lernproblems reduziert. Dazu wird aus einem Teil der Beispieldaten eine Matrix erstellt. Durch die Hauptkomponentenanalyse dieser Matrix können entscheidende Informationen über die zu lernende Abbildung gesammelt werden. Die Lösung des Optimierungsproblems kann damit in einem niedrig dimensionalen Raum gesucht werden. Nachdem die technische Umsetzung gezeigt wurde, wird im thermodynamischen Limes einer unendlich dimensionalen Eingabeschicht die Effizienz des Algorithmus theoretisch analysiert. In einem Grenzfall werden die optimalen Parameter analytisch identifiziert.

Im Kapitel 4 wird das Lernen mit Zurücklegen — d.h. mit mehrmaliger Verwendung derselben Beispiele — für ein einfaches Netzwerk analysiert. In diesem Fall besteht das Problem darin, den Endzustand des Lernens bezüglich der relevanten Größen zu charakterisieren. Diese werden entscheidend von der Größe der Optimierungsschritte beeinflusst. Während Methoden existieren, die den Einfluss der Schrittgröße auf das Lernergebnis wiedergeben, sind diese angesichts der recht einfachen Problemstellung überraschend aufwändig. Hier wird ein Ansatz vorgestellt, mit dem ohne den Rückgriff auf aufwändige mathematische Methoden der Zusammenhang zwischen Schrittgröße und der Verallgemeinerungsfähigkeit des Netzwerkes erfasst wird.

Inhaltsverzeichnis

| | | |
|----------|--|-----------|
| 1 | Einleitung | 3 |
| 1.1 | Lernen? | 3 |
| 1.2 | Verwendung von Beispieldaten | 4 |
| 1.3 | Lernverfahren | 5 |
| 1.4 | Bewertung von Lernverfahren | 7 |
| 1.5 | Netzwerke | 9 |
| 2 | Online-Training von Komitee-Maschinen | 13 |
| 2.1 | Notation | 13 |
| 2.2 | Online-Verfahren für Regression | 14 |
| 2.3 | Online-Verfahren für Klassifikation | 17 |
| 2.4 | Das Plateau Problem | 18 |
| 3 | Effizientes Training durch PCA | 25 |
| 3.1 | Überblick | 25 |
| 3.1.1 | Die modifizierte Kovarianzmatrix | 25 |
| 3.1.2 | Lernen mit reduziertem Parametersatz | 27 |
| 3.1.3 | Beispiel: Simulation mit künstlichen Daten | 28 |
| 3.2 | Grenzfall unendlich vieler Beispiele | 30 |
| 3.3 | Anwendung: Technik und einfache Tests | 32 |
| 3.3.1 | Technik | 32 |
| 3.3.2 | Simulationen mit künstlichen Daten | 35 |
| 3.3.3 | Reale Daten: Vorbereitung | 38 |
| 3.3.4 | Reale Daten: Durchführung | 41 |
| 3.4 | Näherung des Lehrerraums durch PCA | 44 |
| 3.4.1 | Die freie Energie | 44 |
| 3.4.2 | Einführung von Ordnungsparametern | 46 |
| 3.4.3 | Energetischer und entropischer Anteil | 48 |
| 3.4.4 | Auswertung der freien Energie am Sattelpunkt | 50 |

| | | |
|----------|---|------------|
| 3.5 | Verallgemeinerungsfehler im Unterraum | 54 |
| 3.5.1 | Regression | 54 |
| 3.5.2 | Klassifikation | 56 |
| 3.6 | Vergleich mit anderen Algorithmen | 57 |
| 3.7 | Grenzfall vieler versteckter Einheiten | 58 |
| 3.8 | Optimale Gewichtung | 63 |
| 3.8.1 | Optimale Gewichtung für die Regression | 64 |
| 3.8.2 | Optimale Gewichtung für die Klassifikation | 68 |
| 3.9 | Zusammenfassung | 71 |
| 4 | Endzustand des Lernens mit Zurücklegen | 73 |
| 4.1 | Einführung | 73 |
| 4.2 | Fokker-Planck-Gleichung | 76 |
| 4.3 | Endzustand für unendliche Trainingsmenge | 79 |
| 4.4 | Verallgemeinerungsfehler im Endzustand | 80 |
| 4.5 | Anwendung auf endliche Trainingsmenge | 83 |
| 4.6 | Zusammenfassung | 89 |
| 5 | Zusammenfassung | 91 |
| A | Konventionen und Notation | 95 |
| B | Online-Training von Komitee-Maschinen | 97 |
| B.1 | Gaußsche Mittelungen | 97 |
| B.1.1 | Limes großer K | 97 |
| B.1.2 | Endliche K | 98 |
| B.2 | Verallgemeinerungsfehler am Plateau | 99 |
| B.2.1 | Regression | 99 |
| B.2.2 | Klassifikation | 100 |
| B.3 | Hebbsches Lernen von Komitee-Maschinen | 100 |
| B.3.1 | Hebbscher Vektor und gemittelter Lehrervektor | 100 |
| B.3.2 | Regression | 102 |
| B.3.3 | Klassifikation | 102 |
| C | Endzustand des Lernens | 105 |
| C.1 | Stationäre Verteilung | 105 |
| C.2 | Mittelungen über die Trainingsmenge | 107 |
| | Literaturverzeichnis | 109 |