Réseaux de neurones

Partie 2

Fonction erreur

- Un système est décrit comme un vecteur aléatoire $\mathbf{x}$ dont les valeurs sont régies par la densité de probabilité $p(\mathbf{x})$.
- A chaque vecteur $\mathbf{x}$ est associée un vecteur $\mathbf{y}$ qui se réalise suivant la loi conditionnelle $p(\mathbf{y}/\mathbf{x})$.
- L'apprentissage consiste à ajuster les paramètres $\mathbf{W}$, pour une famille de fonctions $\{F(\mathbf{x}, \mathbf{W})\}_w$, en minimisant l'erreur d'apprentissage calculée sur un ensemble de n exemples:

$$D = \{(\mathbf{x}_1, \mathbf{y}_1), (\mathbf{x}_2, \mathbf{y}_2), \dots, (\mathbf{x}_n, \mathbf{y}_n)\}$$

$$E_D = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \|y_i - F(x_i, w)\|^2$$

Mais la fonction $F(\mathbf{x}, \mathbf{W}^*)$ ne minimise pas nécessairement l'erreur en généralisation.

$$E_{\text{gene}} = \int \|y_i - F(x_i, w)\|^2 p(x) \cdot p(y/x) dx dy$$

Soit :

$$\mu(x) = \int yp(y/x)dy = E(y/x)$$

•On démontre le résultat suivant :

$$\text{Min}E_{\text{géné}} \Leftrightarrow \text{Min} \int \|\mu(x) - F(x, w)\|^2 p(x) dx$$

Remarque

•La meilleure fonction en généralisation est celle qui approxime au mieux $\mu(x)$

Démonstration (cas où $y \in \mathcal{R}$)

$$\begin{aligned} E_{\text{géné}} &= \int (y - \mu(x) + \mu(x) - F(x, w))^2 p(x, y) dx dy \\ &= \int (y - \mu(x))^2 p(x, y) dx dy + \int (\mu(x) - F(x, w))^2 p(x, y) dx dy \\ &\quad + 2 \int (y - \mu(x))(\mu(x) - F(x, w)) p(x, y) dx dy \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{(3)} &= 2 \int (\mu(x) - F(x, w)) \left[\int (y - \mu(x)) p(y/x) dy \right] p(x) dx \\ &\quad \underbrace{\hspace{10em}} \\ &= \int yp(y/x)dy - \mu(x) = 0 \end{aligned}$$

Donc $E_{\text{géné}} = \text{(1)} + \text{(2)}$ et comme (1) est indépendant de w

On tire $\text{Min } E_{\text{géné}} \Leftrightarrow \text{Min (2)}$

- But de l'apprentissage : $F^*(\mathbf{x}, \mathbf{W}) \cong \mu(\mathbf{x})$
- $E_{\text{géné}}$ et $\mu(\mathbf{x})$ sont inconnus
- Dans la pratique, on cherche à estimer $\mu(\mathbf{x})$ à partir d'un ensemble d'apprentissage :

$$D = \{(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_N, y_N)\}$$

- L'apprentissage consiste à minimiser la fonction erreur E_D :

$$E_D = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \|y_i - F(x_i, w)\|^2$$

- La solution obtenue dépend alors de l'ensemble d'apprentissage D : $F(x, w^*/D)$

Remarque

Ce résultat reste valable dans le cas de l'erreur quadratique pondérée :

$$E_{\text{géné}} = \int \frac{\|\mu(x) - F(x, W)\|^2}{\sigma^2(x)} p(x)p(y/x) dx dy$$

Ainsi,

$$\text{Min } E_{\text{géné}} \Leftrightarrow \text{Min} \int \|\mu(x) - F(x, w)\|^2 \frac{p(x)}{\sigma(x)^2} dx$$

Cas de la Classification

Exemple : 2 classes

L'ensemble d'apprentissage est réparti en 2 classes. On code les réponses désirées :

$$y \begin{cases} = a & \text{si } x \in C_1 \\ = b & \text{si } x \in C_2 \end{cases} \quad \text{avec } a \neq b$$

Problème : déterminer $f(\cdot, \mathbf{W})$ qui minimise :

$$E = \int (f(x, w) - y)^2 p(x, y) dx dy$$

$$\text{Min}_w E \Leftrightarrow \text{Min}_w \int (f(x, w) - E(y/x))^2 p(x) dx$$

$f(x, \mathbf{W})$ « approxime »

$$\mu(x) = E(y/x) = a \times p(C_1/x) + b \times p(C_2/x)$$

• **Interprétation** :

$$\text{Si } a = 1 \text{ et } b = 0 \quad d(x) = p(C_1/x)$$

$$\text{Si } a = 1 \text{ et } b = -1 \quad d(x) = p(C_1/x) - p(C_2/x)$$

Fonction discriminante de Bayes

Problème : Déterminer aux moindres carrés $f(\bullet, \mathbf{W})$ qui minimise :

$$E = \frac{1}{N} \left[\sum_{x \in C_1} (f(x, w) - a)^2 + \sum_{x \in C_2} (f(x, w) - b)^2 \right]$$

•Hypothèses :

N grand

$$p(C_1) \approx \frac{n_1}{N} \quad n_1 = \text{Card}(C_1)$$

$$p(C_2) \approx \frac{n_2}{N} \quad n_2 = \text{Card}(C_2)$$

Remarque :

- La précision des approximations de $\mu(x)$ dépend de l'architecture choisie.
- La précision ponctuelle de cette approximation diffère selon la répartition des exemples $p(x)$.

$$p(x) \text{ grand} \Leftrightarrow f(x, w) \text{ proche de } \mu(x)$$

$$p(x) \text{ petit} \Leftrightarrow f(x, w) ?$$

- Les régions sous représentées sont plus ou moins ignorées.

Tous ces résultats se généralisent à M classes.

Remarques :

- L'erreur quadratique tient compte des **erreurs absolues**.
- Il peut y avoir de **grandes** erreurs relatives pour les « petites » probabilités. On pourra utiliser la distance de Kullback-Leibler. *** **Ajouter la formule**
- En général les sorties du réseau ne donnent pas de vraies probabilités

$$\sum_{i=1}^M f_i(x, w) \neq 1$$

Il est possible d'utiliser alors pour les neurones de sorties des fonctions **softmax** :

Chaque neurone i de la couche de sortie calcule son état par :

$$S_i = \frac{\exp(A_i)}{\sum_{l \in \text{sortie}} \exp(A_l)}$$

A_i est la somme pondérée des entrées du neurone i .

Maximum de vraisemblance

$$D = \{(x_i, y_i); i = 1, 2, \dots, N\} \quad \text{avec } y_i \in \mathcal{R}$$

- Les données sont générées suivant une distribution de probabilités $p(x, y)$.
- On suppose que toutes les observations sont indépendantes.

Ainsi :

$$\begin{aligned} P(D) &= P((x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_N, y_N)) \\ &= p(x_1, y_1) \times p(x_2, y_2) \times \dots \times p(x_N, y_N) \end{aligned}$$

$$P(D) = \prod_{i=1}^N p(x_i, y_i) = \prod_{i=1}^N p(y_i/x_i) p(x_i)$$

- D'autre part, si on fait l'hypothèse :

$$x \longrightarrow y = \mu(x) + \varepsilon(x)$$

- Où $\mu(\cdot)$ est une fonction bien déterminée et $\varepsilon(x)$ une variable aléatoire qui suit une loi normale $N(0, \sigma(x)\mathbf{I})$.

Ainsi :

$$p(y/x) = \frac{1}{\sigma(x)\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2} \frac{\|y - \mu(x)\|^2}{\sigma^2(x)}\right]$$

$$P(D) = \frac{1}{(\sqrt{2\Pi})^N} \prod_{i=1}^N \frac{1}{\sigma(x_i)} \exp\left[-\frac{1}{2} \frac{\|y_i - \mu(x_i)\|^2}{\sigma^2(x_i)}\right] p(x_i)$$

 $P(x_i)$

- Soit une famille de fonctions :

$$F = \{f(x, W), W\}$$

- On désire approximer μ par une fonction $f(x, W)$ particulière de la famille F .

Ainsi :

$$P(D, W) = \frac{1}{(\sqrt{2\Pi})^N} \prod_{i=1}^N \frac{1}{\sigma(x_i)} \exp\left[-\frac{1}{2} \frac{\|y_i - f(x_i, w)\|^2}{\sigma^2(x_i)}\right]$$

Posons :

$$E(W) = -\ln P(D, W)$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \frac{\|y_i - f(x_i, w)\|^2}{\sigma^2(x_i)} + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \ln \sigma^2(x_i) + \text{Cont}$$

1

2

3

Méthode de maximum de vraisemblance.

Déterminer :

$$w^* = \text{Arg Max}_w P(D, w)$$

$$= \text{Arg Min}_w E(w)$$

Cas où $\sigma(x) = \sigma$ constante :

Dans ce cas, l'expression de **2** ne dépend pas de W .

On peut prendre :

$$E(W) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \frac{\|y_i - f(x_i, w)\|^2}{\sigma^2}$$

Ainsi :
$$\text{Min}_W E(W) = \text{Min}_W \left(\sum_{i=1}^N \|y_i - f(x_i, W)\|^2 \right)$$

On retrouve la somme des erreurs quadratiques.

Soit W^* un système de poids qui minimise cette erreur.

Estimation de σ :

En retenant w^* , l'erreur E devient :

$$E(w^*) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \frac{\|y_i - f(x_i, W^*)\|^2}{\sigma^2} + N \ln \sigma + \frac{N}{2} \ln 2\pi$$

La valeur de σ^2 qui minimise $E(w^*)$ est :

$$\sigma^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \|y_i - f(x_i, W^*)\|^2$$

Erreur moyenne quadratique

Cas où $\sigma(x)$ dépend de x . (cas où $y \in \mathfrak{R}$)

Il faut alors estimer en plus $\sigma(x)$.

On peut alors considérer un réseau de neurones multicouche avec deux neurones sur la couche de sortie.

- Le premier neurone est linéaire et calcule $f(x, W)$ qui estime $\mu(x)$.
- Le second neurone comporte la fonction de transfert e^x et calcule $\sigma^2(x, W)$ qui estime $\sigma^2(x)$.

La fonction d'erreur s'exprime :

$$E(W) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \frac{(y_i - f(x_i, W))^2}{\sigma^2(x_i, W)} + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \ln \sigma^2(x_i, W) + \frac{N}{2} \ln(2\Pi)$$

Qu'il faut minimiser par rapport à W .

On pose :

$$E_i(W) = \frac{(y_i - f(x_i, W))^2}{\sigma^2(x_i, W)} + \ln \sigma^2(x_i, W)$$

L'initialisation de la rétro-propagation du gradient :

• pour le neurone **1** : $\frac{\partial E_i}{\partial \hat{y}} = -\frac{(y_i - f(x_i, w))}{\sigma^2(x_i, w)}$ (*)

• pour le neurone **2** : $\frac{\partial E_i}{\partial e} = -\frac{(y_i - f(x_i, w))^2}{\sigma^2(x_i, w)} + 1$ (**)

L'algorithme se présente alors en 3 phases

Phase 1 : (Initialisation de la moyenne conditionnelle).

On suppose que $\sigma^2(\mathbf{x})$ est constante et on apprend l'erreur quadratique classique. On rétropropage alors uniquement à partir du neurone **1**.

$$(*) \quad \frac{\partial E_i}{\partial \hat{y}} = -(y_i - f(x_i, w)) \quad \text{dans ce cas.}$$

Soit W_1 les poids déterminés à la fin de cette phase.

Phase 2 : On gèle la sortie du neurone **1** à :

$$\hat{y}_i = f(x_i, W_1) \quad \text{pour tout } x_i.$$

On rétropropage alors uniquement à partir du neurone **2** en prenant :

$$(**) \quad \frac{\partial E_i}{\partial \hat{y}} = -\frac{(y_i - f(x_i, w))^2}{\sigma^2(x, w)} + 1$$

Soit W_2 les poids déterminés à la fin de cette phase.

Phase 3 : Minimiser la fonction d'erreur complète en rétropropageant à partir de deux neurones **1** et **2**, en appliquant les formules (*) et (**).

Exemple :