

University of Groningen

Statistical physics of learning vector quantization

Witoelar, Aree Widya

IMPORTANT NOTE: You are advised to consult the publisher's version (publisher's PDF) if you wish to cite from it. Please check the document version below.

Document Version

Publisher's PDF, also known as Version of record

Publication date:

2010

[Link to publication in University of Groningen/UMCG research database](#)

Citation for published version (APA):

Witoelar, A. W. (2010). *Statistical physics of learning vector quantization*. s.n.

Copyright

Other than for strictly personal use, it is not permitted to download or to forward/distribute the text or part of it without the consent of the author(s) and/or copyright holder(s), unless the work is under an open content license (like Creative Commons).

The publication may also be distributed here under the terms of Article 25fa of the Dutch Copyright Act, indicated by the "Taverne" license. More information can be found on the University of Groningen website: <https://www.rug.nl/library/open-access/self-archiving-pure/taverne-amendment>.

Take-down policy

If you believe that this document breaches copyright please contact us providing details, and we will remove access to the work immediately and investigate your claim.

Downloaded from the University of Groningen/UMCG research database (Pure): <http://www.rug.nl/research/portal>. For technical reasons the number of authors shown on this cover page is limited to 10 maximum.

Samenvatting

In dit proefschrift presenteren we een theoretisch raamwerk voor het onderzoeken van op prototypen-gebaseerde trainvoorschriften. De analyse is uitgevoerd gebruikmakend van concepten uit de statistische fysica, welke een exact wiskundig voorschrift van het systeem mogelijk maken. Hiermee kan het systeem uitgedrukt worden in zijn karakteristieke eigenschappen, de zogenaamde ordeparameters. De trairndynamica en equilibrische leertoestanden worden volledig beschreven door de set van ordeparameters. Het proefscenario dat we gebruiken om de lerende-vectorkwantisatie (learning vector quantisation, LVQ)-algoritmen is beschreven in Hoofdstuk 2.

In Hoofdstuk 3 en Hoofdstuk 4 bekijken we het online-trainer en beschouwen we de leerdynamica van (niet-gesuperviseerde) vectorkwantisatie en (gesuperviseerde) lerende-vectorkwantisatie. Het leergedrag wordt bestudeerd in termen van de evolutie van de ordeparameters, voorgeschreven door gewone differentiaalvergelijkingen. In de niet-gesuperviseerde dataclusteranalyse tonen we de voordelen van neurale-gasalgoritmen (*en.*: "Neural Gas" of "NG"-algoritmen) op algoritmen waarin de winnaar alles krijgt (*en.*: "Winner-Takes-All" of "WTA"-algoritmen). Ten eerste kan NG, ten opzichte van WTA, de convergentiesnelheid verbeteren wanneer de prototypen slecht zijn geïnitieerd. Verder bereikt NG robuustheid ten opzichte van de begincondities. Desondanks zou NG alsnog kunnen convergeren naar lokale minima en bereikt het niet altijd de best mogelijke kwantisatie nauwkeurigheid.

Onder de gesuperviseerde LVQ-schema's vergelijken we de voordelen en nadelen van verscheidene venstergebaseerde voorbeeldselectieschema's in detail, waaronder LVQ 2.1, het "leren van fouten" (textiten.: learning from mistakes, LFM), gegeneraliseerde LVQ (GLVQ) en robuuste zachte LVQ (textiten.: robust soft LVQ, RSLVQ). De gevoeligheid van de leercurven wordt bestudeerd voor ieder van deze algoritmen. Verrassend genoeg produceert LVQ 2.1 de optimale lineaire besliss-

ingsscheiding, wat leidt tot een optimale generalisatiemogelijkheid. We vinden ook leerplateaus in het leerstadium van systemen met meerdere prototypen.

In Hoofdstuk 5 en Hoofdstuk 6 gebruiken we de statistische fysica van het offline leren voor het analyseren van de LVQ-algoritmen. Het trainen wordt geïnterpreteerd als een stochastische minimalisatie van de kostenfunctie op de dataset \mathcal{D} , waarin de formele temperatuur T het aantal vrijheidsgraden bepaalt. We onderzoeken de evenwichtige eigenschappen van WTA en rang-gebaseerde vectorkwantisatiesystemen, gebruikmakend van de hoge temperatuurslimiet en de zogenaamde afkoelbenadering. We ontdekken dat, gelet op de initialisatie, neurale gas meer robuust is dan WTA. Dit komt goed overeen met de resultaten die verkregen zijn bij de analyse van online-leren. We vinden faseovergangen in het leerstadium: een kritisch aantal voorbeelden moet aan het systeem worden gepresenteerd voordat de onderliggende structuur van de data kan geïdentificeerd worden. De aard van de overgang is continu in systemen met twee prototypen en discreet in systemen met drie prototypen. Dit is zeer relevant vanuit een praktisch perspectief: optimalisatiestrategieën zullen mislukken wanneer te weinig voorbeelddata beschikbaar zijn en metastabiele toestanden voor systemen met drie prototypen zouden een grote vertraging tijdens het leren kunnen veroorzaken.

Ten slotte analyseren we de kostenfunctie van LFM, LVQ 2.1 en RSVQ in de hoge-temperatuurlimiet. LFM werkt onverwacht slecht op dit leerprobleem, in vergelijking met de optimaal bereikbare fout. Met een goed gekozen gewichtsverval toont LVQ 2.1 een beter generalisatievermogen dan LFM en RSLVQ voor systemen met zowel twee als drie prototypen. In systemen met drie prototypen vinden we continue faseovergangen tussen prototypeconfiguraties. We observeren een kritisch benodigde grootte van de trainset om effectief gebruik te maken van alle beschikbare prototypen en om onderliggende structuren binnen de data te vinden.

De relatie tussen online- en offline-analyses

Terwijl de generieke aanpak van online- en offline-analyses technisch verschillend zijn, complementeren beide technieken elkaar sterk. Online analyse geeft de mogelijkheid tot het onderzoeken van de convergentiesnelheid en haar afhankelijkheid van leerparameters en begincondities, welke essentieel afwezig zijn in offline analyse. Ook geeft het de mogelijkheid tot het studeren van de heuristische praktische LVQ-voorschriften die niet gebaseerd zijn op kostenfuncties. Bovendien kunnen ongelimiteerde kostenfuncties zoals in LVQ 2.1 leiden tot sterk divergerend gedrag, wat niet behandeld kan worden met offline analyse. Met behulp van online-analyse kunnen we het niet-triviale asymptotische leergedrag schatten. Aan de andere kant

worden in offline analyse de karakteristieken van het landschap van een kostenfunctie rigoureus geëvalueerd, om alle mogelijke equilibrische toestanden te vinden, zonder de convergentietijd expliciet te beschouwen. De stabiele en metastabiele toestanden onthullen de presentie van vaste punten die online-analyse zou kunnen aantreffen. De kwalitatieve overeenkomst tussen de vondsten van de twee methodes is reeds zichtbaar. Onze online-analyse van niet-gesuperviseerd leren in Hoofdstuk 3 toont een significante vertraging van het leerproces voor WTA met een slechte begintoestand en het voordeel van rang-gebaseerde NG-algoritmen.

In het offline leren correspondeert dit met suboptimaal equilibrische toestanden, bediscussieerd in Sectie 5.4.1, waarbij triviale minima bestaan bij grote prototype-lengten. Bij offline NG demonstreren we ook hoe de rangparameter λ het energielandschap verandert, wat de typische ontsnappingstijd van de suboptimale configuratie beïnvloedt. In beide analyses demonstreren we dat NG meer robuust is dan WTA. In online-leren zijn de asymptotische configuratie van NG onafhankelijk van de begincondities. Dit is weerspiegeld in offline leren door het verdwijnen van de metastabiele toestanden in het vloeiende energielandschap, gegeven een voldoende grote λ .

In het algemeen worden de resultaten van de twee analyses identiek bij lange leertijden $\tilde{\alpha} \rightarrow \infty$ voor online- en bij grote trainingsets $\hat{\alpha} \rightarrow \infty$ voor offline-trainen. We vergelijken gesuperviseerde problemen in Hoofdstuk 4 en Hoofdstuk 6 en bevestigen identieke resultaten voor RSLVQ algoritmen. De afhankelijkheid van asymptotische configuraties op de begincondities wordt uitgelegd door de degeneratie van de kostenfunctiemina. De vergelijking van LFM is meer beperkt, doordat de prototypen samenvallen in de eerder genoemde limieten. We observeren dat het gedrag bij een grote $\tilde{\alpha}$ dat van een grote $\hat{\alpha}$ benadert.

Teneinde beide aanpakken volledig te vergelijken, moeten verschillende geforceerde limieten opgelost worden. We nemen bijvoorbeeld kleine leersnelheden aan in de online-analyse. Dit zou echter corresponderen met een lage-temperatuur, offline analyse, wat een volledige behandeling van de replicemethode vereist. In dit werk kan dit alleen benaderd worden met de afkoelbenadering. Omgekeerd staat offline analyse het toe om het leren van beperkte datasets te onderzoeken, en we observeren een verschillende train- en generalisatiefout bij eindige temperaturen: zie de resultaten van de afkoelvoorbeelden in Sectie 5.4.3. Dit correspondeert in de online-analyse met het hergebruiken van voorbeelden uit een eindige dataset, wat correlaties veroorzaakt tussen trainvoorbeelden en het systeem. Het onderwerp van online-leren met eindige trainsets in neurale netwerken wordt onderzocht in bijvoorbeeld (Barber and Sollich 1998, Rae et al. 1999).

De aanwezigheid van symmetrie produceert een bepaald leergedrag dat zich uitzet in zowel online- als offline-analyse. Dit uit zich gedurende de specialisatiefase

van prototypen in niet-gesuperviseerd leren. Permutatiesymmetrie tussen twee of meer prototypen, dat is, gelijke configuratie door uitwisseling van prototypen, beperkt het leerproces binnen de thermodynamische limiet sterk.

In online-leren vereisen prototypen lange leertijden om te ontsnappen van de door-symmetrie veroorzaakte vaste punten, welke plateaus veroorzaken in de leercurve van VQ. Symmetrie in offline-leren veroorzaakt competitie in toestanden met een variërende entropie, waarbij de niet-gespecialiseerde toestand de voorkeur heeft bij kleine trainsets. Dit resulteert op zijn beurt in vertraagd leren, waarbij specialisatie alleen voor komt bij trainsets groter dan een kritieke omvang. In gesuperviseerde leerproblemen worden gepermuteerde symmetrieën gebroken door verschillende toewijzing van klassen aan de prototypen, maar zij blijven bestaan tussen prototypen van dezelfde klasse. Derhalve worden leerplateaus en vertraagd leren alleen geobserveerd in LVQ systemen met meerdere prototypen.