ĐẠI HỌC QUỐC GIA THÀNH PHỐ HỒ CHÍ MINH
TRƯỜNG ĐẠI HỌC KHOA HỌC TỰ NHIÊN

TRẦN TRUNG KIÊN

HỌC ĐẶC TRƯNG KHÔNG GIÁM SÁT BẰNG AUTO-ENCODERS

Chuyên ngành: Khoa Học Máy Tính

Mã số chuyên ngành: 60 48 01

LUẬN VĂN THẠC SỸ: KHOA HỌC MÁY TÍNH

NGƯỜI HƯỚNG DẪN KHOA HỌC:

PGS.TS LÊ HOÀI BẮC

Tp. Hồ Chí Minh, Năm 2014

LỜI CẢM ƠN

Trước tiên, em xin gửi lời tri ân sâu sắc đến Thầy Lê Hoài Bắc. Thầy đã rất tận tâm, nhiệt tình hướng dẫn và chỉ bảo em trong suốt quá trình thực hiện luận văn. Không có sự quan tâm, theo dõi chặt chẽ của Thầy chắc chắn em không thể hoàn thành luận văn này.

Em xin chân thành cảm ơn quý Thầy Cô khoa Công Nghệ Thông Tin - trường đại học Khoa Học Tự Nhiên, những người đã ân cần giảng dạy, xây dựng cho em một nền tảng kiến thức vững chắc.

Con xin cảm ơn ba mẹ đã sinh thành, nuôi dưỡng, và dạy dỗ để con có được thành quả như ngày hôm nay. Ba mẹ luôn là nguồn động viên, nguồn sức mạnh hết sức lớn lao mỗi khi con gặp khó khăn trong cuộc sống.

TP. Hồ Chí Minh, 3/2014

Trần Trung Kiên

MỤC LỤC

DANH MỤC HÌNH ẢNH

DANH MỤC BẢNG

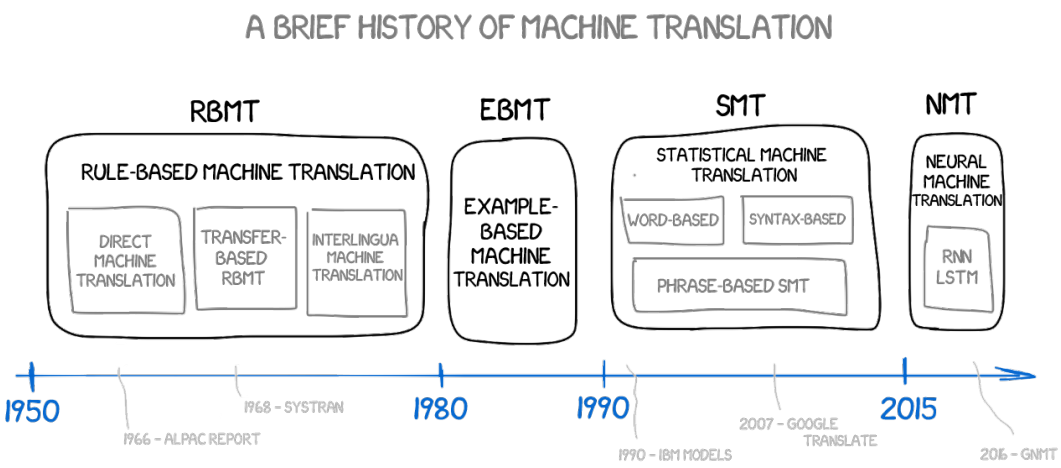
Chương 1

Giới Thiệu

Nhờ vào những cải cách trong giao thông và cơ sở hạ tầng viễn thông mà giờ đây toàn cầu hóa đang trở nên gần với chúng ta hơn bao giờ hết. Trong xu hướng đó nhu cầu giao tiếp và thông hiểu giữa những nền văn hóa là không thể thiếu. Tuy nhiên, những nền văn hóa khác nhau thường kèm theo đó là sự khác biệt về ngôn ngữ, là một trong những trở ngại lớn nhất của sự giao tiếp. Một người phải mất rất nhiều thời gian để thành thạo một ngôn ngữ không phải là tiếng mẹ đẻ và không thể nào học được nhiều ngôn ngữ cùng lúc. Cho nên, việc phát triển một công cụ để giải quyết vấn đề này là tất yếu. Một trong những công cụ như vậy là Dịch máy.

Dịch máy là quá trình chuyển đổi văn bản/tiếng nói từ ngôn ngữ này sang dạng tương ứng của nó trong một ngôn ngữ khác được thực hiện bởi một chương trình máy tính nhằm mục đích cung cấp bản dịch tốt nhất mà không cần sự trợ giúp của con người. Dịch máy có một quá trình lịch sử lâu dài, từ thế kỷ 17, đã có những ý tưởng về một loại ngôn ngữ mang ý nghĩa phổ quát nhưng mãi đến những năm 1950 những nghiên cứu về dịch máy mới thật sự bắt đầu. Trong thời kì Chiến tranh Lạnh, vào ngày 7 tháng 1 năm 1954, tại trụ sở chính của IBM ở New York, thử nghiệm Georgetown-IBM được tiến hành. Máy tính IBM 701 đã tự động dịch 49 câu tiếng Nga sang tiếng Anh lần đầu tiên trong lịch sử chỉ sử dụng 250 từ vựng và sáu luật ngữ pháp. Thí nghiệm này được xem như là một thành công và mở ra kỉ nguyên cho những nghiên cứu với kinh phí lớn về dịch máy ở Hoa Kỳ. Ở Liên Xô những thí nghiệm tương tự cũng được thực hiện không lâu sau đó.

Trong một thập kỷ tiếp theo, nhiều nhóm nghiên cứu về dịch máy được thành lập. Một số nhóm chấp nhận phương pháp thử và sai, thường dựa trên thống kê với mục



Hình 1.1: Lịch sử tóm tắt của Dịch máy, nguồn ảnh: Ilya Pestov trong blog A history of machine translation from the Cold War to deep learning

tiêu là một hệ thống dịch máy có thể hoạt động ngay lập tức, tiêu biểu như: nhóm nghiên cứu tại đại học Washington (và sau này là IBM) với hệ thống dịch Nga-Anh cho Không quân Hoa Kỳ, những nghiên cứu tại viện Cơ học Chính xác ở Liên Xô và Phòng thí nghiệm Vật lý Quốc gia ở Anh. Trong khi một số khác hướng đến giải pháp lâu dài với hướng tiếp cận lý thuyết bao gồm cả những vấn đề liên quan đến ngôn ngữ cơ bản như nhóm nghiên cứu tại Trung tâm nghiên cứu lý thuyết tại MIT, Đại học Havard và Đơn vị nghiên cứu ngôn ngữ Đại học Cambridge. Những nghiên cứu trong giai đoạn này có tầm quan trọng và ảnh hưởng lâu dài không chỉ cho Dịch máy mà còn cho nhiều ngành khác như Ngôn ngữ học tính toán, Trí tuệ nhân tạo - cụ thể là việc phát triển các từ điển tự động và kỹ thuật phân tích cú pháp. Nhiều nhóm nghiên cứu đã đóng góp đáng kể cho việc phát triển lý thuyết ngôn ngữ. Tuy nhiên, mục tiêu cơ bản của Dịch máy là xây dựng hệ thống có khả năng tạo ra bản dịch tốt lại không đạt được dẫn đến một kết quả là vào năm 1966 bản báo cáo từ Ủy ban tư vấn xử lý ngôn ngữ tự động (Automatic Language Processing Advisory) của Hoa Kỳ, tuyên bố rằng Dịch máy là đắt tiền, không chính xác và không mang lại kết quả hứa hẹn. Thay vào đó, họ đề nghị tập trung vào phát triển các từ điển, điều này đã loại bỏ các nhà nghiên cứu Mỹ ra khỏi cuộc đua trong gần một thập kỷ.

Các phương pháp Dịch máy

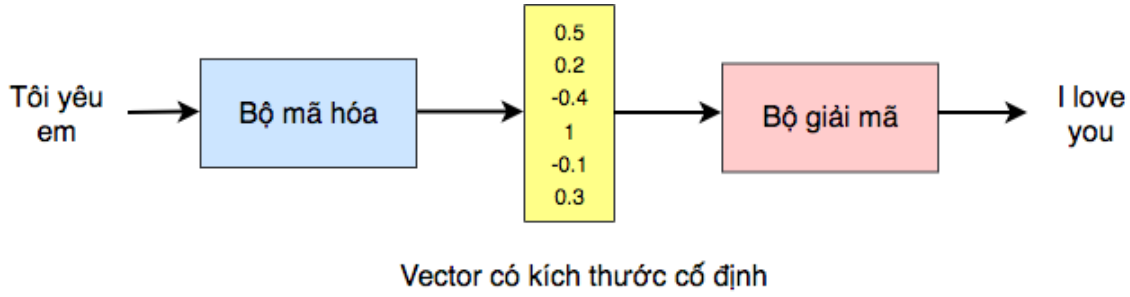
Từ đó đến nay, đã có nhiều hướng tiếp cập đã được sử dụng trong dịch máy với mục tiêu tạo ra bản dịch có độ chính xác cao và giảm thiểu công sức của con người có thể chia làm hai nhóm. Nhóm đầu tiên là những hướng tiếp cận dựa trên *Từ điển* (Dictionary based). Đây là hướng tiếp cận chính cho những nghiên cứu về Dịch máy trong những năm 1950-1960. Những phương pháp dựa trên hướng tiếp cập Từ điển có thể kể đến như *Dịch trực tiếp* (Direct machine translation), *Dịch máy chuyển dịch* (Transfer-based machine translation) hay *Dịch máy ngôn ngữ đại diện* (Interlingual machine translation). Điểm chung của những phương pháp này là dùng một từ điển để dịch các từ từ ngôn ngữ nguồn sang ngôn ngữ đích và sau đó cố gắng chỉnh sửa bản dịch để tạo ra một câu có nghĩa. Nhóm phương pháp này thường yêu cầu một bộ từ điển giữa hai ngôn ngữ cần dịch và một tập các quy tắc ngữ pháp cho mỗi ngôn ngữ. Bản dịch của hướng tiếp cận Từ điển thường có chất lượng kém và không sử dụng được trừ một số trường hợp đặc biệt. Ngoài ra chúng còn đòi hỏi một lượng nhân lực lớn với hiểu biết sâu sắc cho việc xây dựng những bộ từ điển và các quy tắc ngôn ngữ.

Nhóm thứ hai là những hướng tiếp cận dựa trên *Ngữ liệu* (Corpus based). Nhóm này hoạt động dựa trên một tập dữ liệu song song của các cặp câu là bản dịch của nhau trong hai ngôn ngữ gọi là Ngữ liệu và chỉ yêu cầu những tri thức tối thiểu về ngôn ngữ học.

Dịch máy Nơ-ron

Mặc dù trên thực tế đã có nhiều hệ thống Dịch máy được phát triển dựa trên Dịch máy Thống kê thời bấy giờ, tuy nhiên nó không hoạt động thực sự tốt bởi một số nguyên nhân. Một trong số đó là việc những từ hay đoạn được dịch cục bộ và quan hệ của chúng với những từ cách xa chúng trong câu nguồn thường bị bỏ qua. Bên cạnh đó, mô hình ngôn ngữ N-gram hoạt động không thực sự tốt đối với những bản dịch dài và ta phải tốn nhiều bộ nhớ để lưu trữ chúng. Ngoài ra việc sử dụng nhiều thành phần nhỏ được điều chỉnh riêng biệt như mô hình dịch, mô hình ngôn ngữ, gióng hàng,.. cũng gây khó khăn cho việc vận hành và phát triển mô hình này.

Dịch máy Nơ-ron (Neural machine translation) là một hướng tiếp cận mới trong

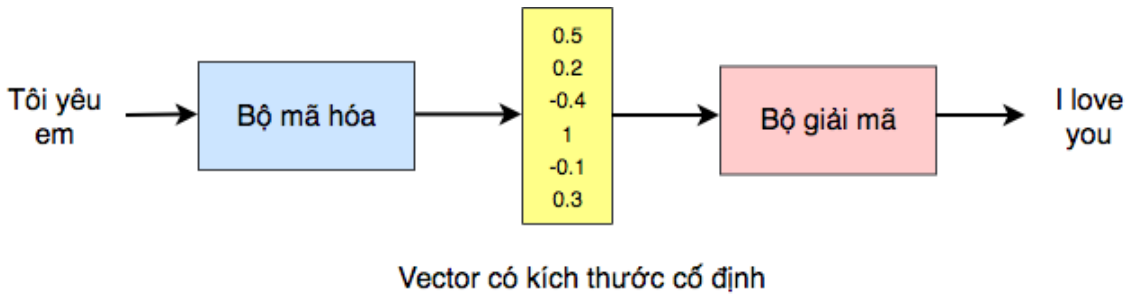


Hình 1.2: Ví dụ về Kiến trúc Bộ mã hóa - bộ giải mã trong dịch máy Nơ-ron

dịch máy trong những năm gần đây được đề xuất đầu tiên bởi Kalchbrenner and Blunsom (2013), Sutskever et al. (2014) and Cho et al. (2014b). Giống như Dịch máy thống kê, Dịch máy Nơ-ron cũng là một phương pháp thuộc hướng tiếp cận dựa trên Ngữ liệu, trong khi Dịch máy Thống kê bao gồm nhiều mô-đun nhỏ được điều chỉnh riêng biệt, Dịch máy Nơ-ron cố gắng dùng một mạng Nơ-ron như là thành phần duy nhất của hệ thống, mọi thiết lập sẽ được thực hiện trên mạng này.

Hầu hết những mô hình Dịch máy Nơ-ron đều dựa trên kiến trúc *Bộ mã hóa - bộ giải mã* (encoder-decoder) (Sutskever et al., 2014; Cho et al., 2014a). Bộ mã hóa thường là một mạng Nơ-ron có tác dụng *"nén"* tất cả thông tin của câu trong ngôn ngữ nguồn vào một vector có kích thước cố định. Bộ giải mã, cũng là một mạng Nơ-ron, sẽ tạo bản dịch trong ngôn ngữ đích từ vector có kích thước cố định kia. Toàn bộ hệ thống bao gồm bộ mã hóa và bộ giải mã sẽ được huấn luyện *"end-to-end"* để tạo ra bản dịch, quá trình này được mô tả như hình 1.2.

Trong thực tế cả Bộ mã hóa và giải mã thường dựa trên một mô hình mạng nơ-ron tên là *Mạng nơ-ron hồi quy* là một thiết kế mạng đặc trưng cho việc xử lý dữ liệu chuỗi. Mạng nơ-ron hồi quy cho phép chúng ta mô hình hóa những dữ liệu có độ dài không xác định, rất thích hợp cho bài toán dịch máy. Hình 1.3 mô tả chi tiết hơn về kiến trúc Bộ mã hóa - giải mã sử dụng Mạng nơ-ron hồi quy. Đầu tiên Bộ mã hóa đọc qua toàn bộ câu nguồn và tạo ra một vector đại diện gọi là *vector trạng thái*. Điều này giúp cho toàn bộ những thông tin cần thiết hay quan hệ giữa những từ cách xa nhau đều được tập hợp vào một nơi duy nhất. Bộ giải mã, lúc này đóng vai trò như một Mô hình ngôn ngữ để tạo ra từng từ trong ngôn ngữ đích và sẽ dừng lại đến khi một ký tự đặc biệt xuất hiện.



Hình 1.3: Ví dụ về Kiến trúc Bộ mã hóa - bộ giải mã trong dịch máy Nơ-ron

Chương 2

Kiến Thức Nền Tảng

Trong chương này, chúng tôi sẽ trình bày những kiến thức nền tảng trên ba chủ đề chính bao gồm cơ bản về *Mạng nơ-ron hồi quy (Recurrent neural network)* là thành phần xướng sống trong Dịch máy Nơ-ron và thiết kế cụ thể của nó trong Bộ mã hóa và Bộ giải mã. Tiếp theo chúng tôi nói về những vấn đề của mà Mạng nơ-ron hồi quy và *Long short-term memory* bản nâng cấp của của nó với khả năng giải quyết những vấn đề đó. Chúng tôi cũng trình bày về Mô hình dịch máy nơ-ron đã được đề cập đến trong chương giới thiệu. Những kiến thức được trình bày trong chương này cung cấp những nền tảng cũng như các vấn đề mà Mô hình dịch máy nơ-ron gặp phải để đi đến chương tiếp theo về cơ chế *Attention* trong dịch máy Nơ-ron.

"Mô hình ngôn ngữ (Language modeling)"

Mô hình ngôn ngữ ban đầu được sử dụng trong các hệ thống nhận dạng tiếng nói, ngày nay nói được sử dụng rộng rãi trong nhiều tác vụ khác của xử lý ngôn ngữ tự nhiên. Một mô hình ngôn ngữ được định nghĩa là một phân bố xác suất trên tập các chuỗi từ (câu). Cụ thể hơn, cho trước một từ từ vựng V là tập tất cả các từ khác nhau trong một ngôn ngữ, ví dụ, trong tiếng Việt ta có

$$V = \{\text{tôi, ăn, xe, đẹp, gà, vịt, qua,...}\}$$

Giả sử tập V là hữu hạn, một *câu* S được định nghĩa là chuỗi các từ

$$S = w_1 w_2 ... w_n$$

Trong đó $n \geq 1$ và $w_i \in V$ với $i \in 1...n$. Gọi D là tập bao gồm N câu trong sao cho

$$D = \{S^1, S^2, ..., S^N\}$$

Với mỗi câu S^n mang chiều dài n có dạng:

$$S^n = w_1^n, w_2^n, ..., w_{T^n}^n$$

Một cách cụ thể, với một véc-tơ đầu vào x có kích thước $D_x \times 1$, "Sparse Coding" tối thiểu hóa hàm chi phí sau sau:

$$C(W,h) = ||Wh - x||_2^2 + \lambda ||h||_1 \tag{2.1}$$

với ràng buộc là các véc-tơ cơ sở (ứng với các cột của W) được chuẩn hóa (có độ dài bằng 1).

Ở đây:

- Các biến tối ưu hóa là W và h. Trong đó, W là ma trận chứa các véc-tơ cơ sở (mỗi cột của W ứng với một véc-tơ cơ sở); W có kích thước $D_x \times D_h$ (D_x là số chiều của không gian ban đầu, D_h là số chiều của không gian đặc trưng). h là véc-tơ đặc trưng (véc-tơ hệ số) tương ứng với véc-tơ đầu vào x; h có kích thước $D_h \times 1$. Ma trận các véc-tơ cơ sở W dùng chung cho tất cả các mẫu huấn luyện, còn véc-tơ hệ số h thay đổi theo từng mẫu huấn luyện. Lưu ý là $C(W,h)$ là hàm chi phí cho một mẫu huấn luyện; chúng tôi chỉ viết hàm chi phí cho một mẫu huấn luyện để đơn giản về mặt ký hiệu. Trong thực tế, mục tiêu là tối thiểu hóa chi phí trên toàn bộ tập huấn luyện (bằng trung bình của chi phí của các mẫu huấn luyện) và sự cập nhật các tham số có thể được tiến hành với một mẫu huấn luyện, hoặc với một số mẫu huấn luyện, hoặc với toàn bộ mẫu trong tập huấn luyện.

- $||\cdot||_p$ là ký hiệu của chuẩn p (p-norm) với $||x||_p = (\sum_{i=1}^n |x_i|^p)^{\frac{1}{p}}$, trong đó x_i là

phần tử thứ i của véc-tơ x.

Với hàm mục tiêu trên, "Sparse Coding" muốn tìm ra véc-tơ biểu diễn đặc trưng h thỏa hai tính chất sau:

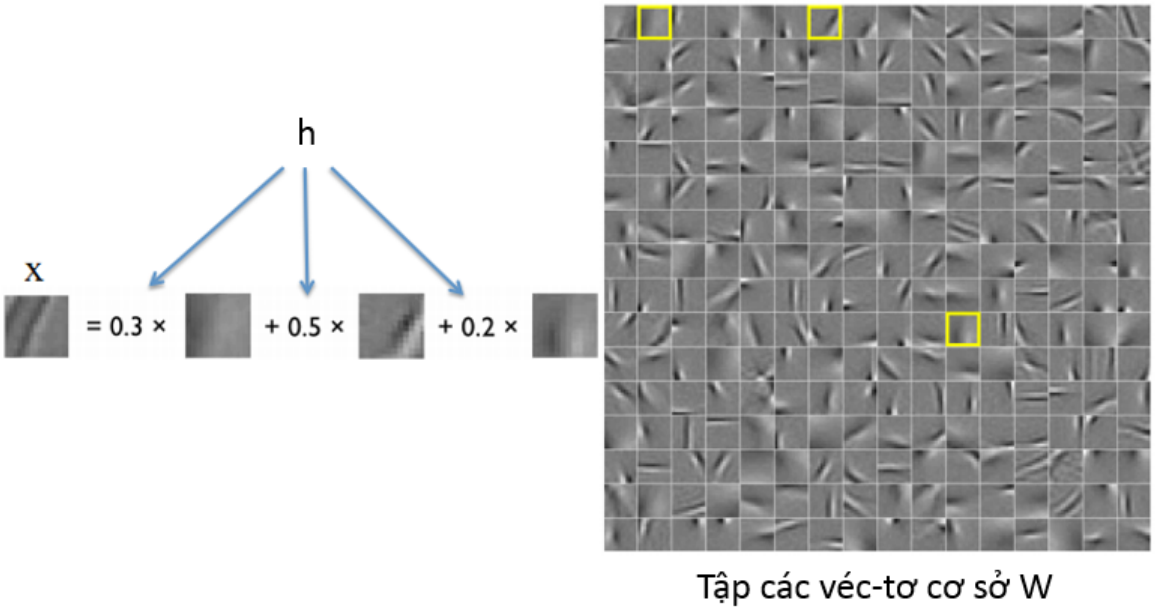
- Có thể tái tạo lại được tốt véc-tơ đầu vào x (bằng cách tối thiểu hóa độ lỗi tái tạo $||Wh - x||_2^2$).
- Thưa (bằng cách tối thiểu hóa chuẩn L1 $||h||_1$).

λ là siêu tham số (hyper-parameter, là tham số phải chọn trước khi huấn luyện) điều khiển "sự thỏa hiệp" giữa khả năng tái tạo và độ thưa. Nếu véc-tơ đặc trưng h càng thưa thì khả năng tái tạo lại véc-tơ đầu vào ban đầu càng thấp và ngược lại. Do đó, để học được các đặc trưng tốt, ta cần phải chọn giá trị λ trung dung sao cho véc-tơ đặc trưng vừa thưa và vừa có thể tái tạo tốt véc-tơ đầu vào ban đầu.

Hàm chi phí (2.1) có thể được tối thiểu hóa bằng cách lặp cho đến khi hội tụ, trong đó ở mỗi vòng lặp, các biến W và h sẽ được tối ưu một cách luân phiên nhau: đầu tiên, cố định h và tối thiểu hóa hàm mục tiêu theo W; sau đó, lại cố định W và tối thiểu hóa hàm mục tiêu theo h [9]. Tuy nhiên, quá trình tối ưu hóa này của "Sparse Coding" thường tốn nhiều thời gian để có thể hội tụ.

Một điểm hạn chế nữa của "Sparse Coding" là sau khi huấn luyện xong, với một véc-tơ đầu vào mới, để tìm ra véc-tơ đặc trưng tương ứng, ta vẫn phải tiến hành tối thiểu hóa hàm chi phí (2.1) với W cố định.

Một kết quả được biết đến phổ biến của "Sparse Coding" là nếu huấn luyện "Sparse Coding" trên ảnh tự nhiên thì các đặc trưng học được (các véc-tơ cơ sở) sẽ có dạng các cạnh ở các vị trí khác nhau và với các hướng khác nhau (minh họa ở hình 2.1); các đặc trưng này tương tự với các đặc trưng quan sát được ở vùng vỏ não thị giác V1.



Hình 2.1: Minh họa các đặc trưng (các véc-tơ cơ sở) học được của "Sparse Coding" khi huấn luyện trên ảnh tự nhiên [15]. Các đặc trưng học được có dạng các cạnh ở các vị trí khác nhau và với các hướng khác nhau. Véc-tơ đầu vào x có thể được tái tạo từ một số ít các đặc trưng trong tập các đặc trưng; nghĩa là, đa số các phần tử của véc-tơ đặc trưng (véc-tơ hệ số) h bằng 0 (trong hình vẽ chỉ thể hiện các phần tử khác 0 của h).

"Sparse Auto-Encoders"

"Auto-Encoder" đơn giản là một mạng nơ-ron truyền thẳng gồm có hai phần:

- Phần thứ nhất, được gọi là *bộ mã hóa* (encoder), ánh xạ véc-tơ đầu vào $x \in \mathbb{R}^{D_x \times 1}$ sang véc-tơ biểu diễn ẩn $h \in \mathbb{R}^{D_h \times 1}$ theo công thức:

$$h = f(W^{(e)}x + b^{(e)}) \tag{2.2}$$

  Trong đó, $W^{(e)} \in \mathbb{R}^{D_h \times D_x}$ và $b^{(e)} \in \mathbb{R}^{D_h \times 1}$ là các tham số của bộ mã hóa. $f(\cdot)$ là một hàm kích hoạt nào đó; nói rõ hơn là, $f(\cdot)$ nhận đầu vào là một véc-tơ và trả về véc-tơ kết quả có cùng kích thước với véc-tơ đầu vào của $f(\cdot)$, trong đó mỗi phần tử của véc-tơ kết quả có được bằng cách áp dụng hàm kích hoạt (ví dụ, hàm sigmoid) lên phần tử tương ứng của véc-tơ đầu vào của $f(\cdot)$.

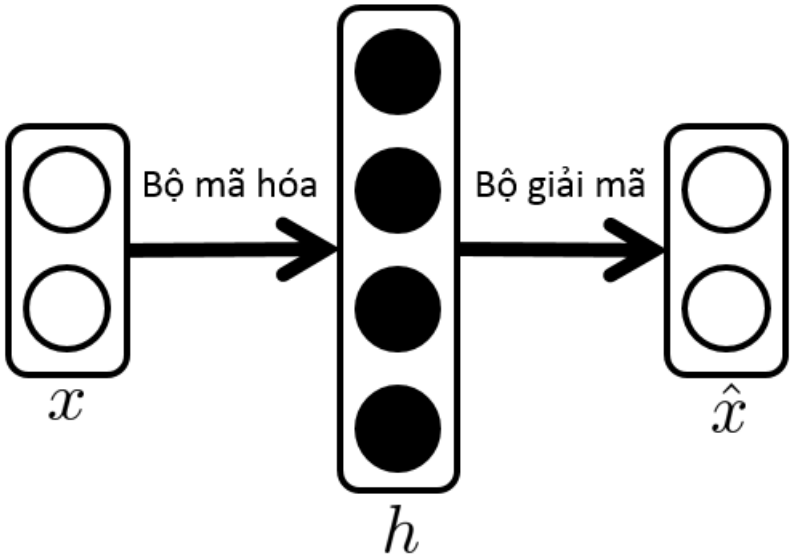
- Phần thứ hai, được gọi là *bộ giải mã* (decoder), cố gắng tái tạo lại véc-tơ đầu vào x ban đầu từ véc-tơ biểu diễn ẩn h:

$$\hat{x} = W^{(d)}h + b^{(d)} \tag{2.3}$$

  Trong đó, $\hat{x} \in \mathbb{R}^{D_x \times 1}$ là véc-tơ tái tạo, $W^{(d)} \in \mathbb{R}^{D_x \times D_h}$ và $b^{(d)} \in \mathbb{R}^{D_x \times 1}$ là các tham số của bộ giải mã.

Như vậy, từ véc-tơ đầu vào, "Auto-Encoder" ánh xạ sang véc-tơ biểu diễn ẩn; rồi từ véc-tơ biểu diễn ẩn này, "Auto-Encoder" cố gắng tái tạo lại véc-tơ đầu vào ban đầu (minh họa ở hình 2.2). Bằng cách này, ta hy vọng có thể thu được ở véc-tơ biểu diễn ẩn những thông tin có ích, giải thích dữ liệu quan sát được (véc-tơ đầu vào).

"Sparse Auto-Encoder" (SAE) là một "Auto-Encoder" trong đó véc-tơ biểu diễn ẩn được ràng buộc thưa (nghĩa là, với một véc-tơ đầu vào, chỉ có một số nơ-ron ẩn kích hoạt). Một cách cụ thể, với một mẫu huấn luyện $x \in \mathbb{R}^{D_x}$, SAEs tối thiểu hóa hàm chi phí sau (tương tự như "Sparse Coding", để đơn giản về mặt ký hiệu, ở đây chúng tôi chỉ ghi hàm chi phí cho một mẫu huấn luyện; trong thực tế, mục tiêu là tối thiểu hóa chi phí trên toàn bộ tập huấn luyện và sự cập nhật các tham số có thể được tiến hành với một mẫu huấn luyện, hoặc với một số mẫu huấn luyện, hoặc với toàn bộ mẫu



Hình 2.2: Minh họa "Auto-Encoders"

trong tập huấn luyện):

$$C(W^{(e)}, b^{(e)}, W^{(d)}, b^{(d)}) = ||x - \hat{x}||_2^2 + \lambda s(h) \tag{2.4}$$

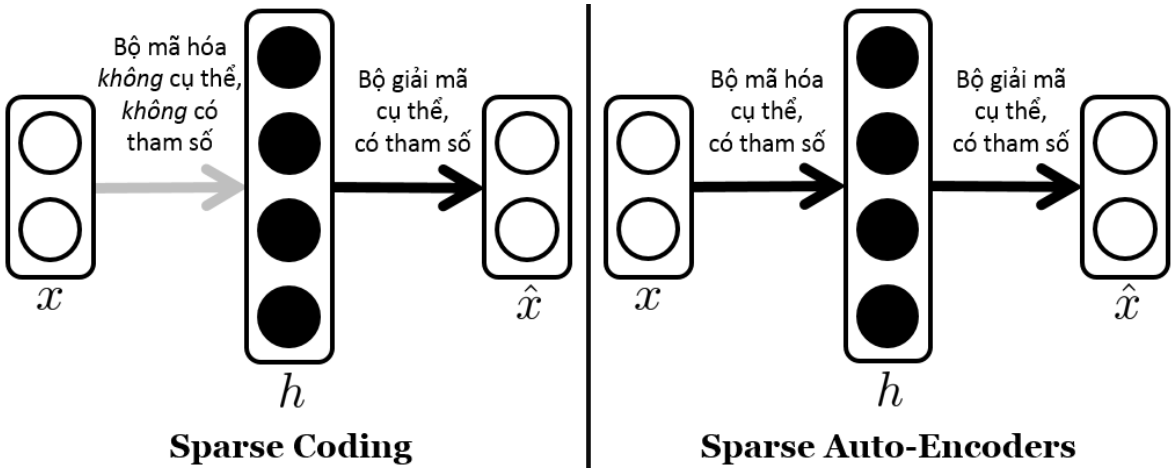
Trong đó, $\hat{x}$ là véc-tơ tái tạo (với $\hat{x} = W^{(d)}h + b^{(d)}$ và $h = f(W^{(e)}x + b^{(e)})$); $s(\cdot)$ là một hàm nào đó mà làm cho véc-tơ biểu diễn ẩn h thưa (ví dụ, $s(\cdot)$ có thể là chuẩn L1 như ở "Sparse Coding"); và λ là siêu tham số điều khiển "sự thỏa hiệp" giữa độ lỗi tái tạo và độ thưa.

Như vậy, ta thấy rằng, mục tiêu của SAEs giống với "Sparse Coding", đó là tìm ra véc-tơ biểu diễn đặc trưng (véc-tơ biểu diễn ẩn) thỏa hai tính chất:

- Có thể tái tạo tốt véc-tơ đầu vào.
- Thưa.

Tuy nhiên, điểm khác biệt giữa chúng là (minh họa ở hình 2.3): SAEs có bộ mã hóa *cụ thể, có tham số* (nghĩa là, có hàm cụ thể ánh xạ từ véc-tơ đầu vào sang véc-tơ đặc trưng); trong khi đó, bộ mã hóa của "Sparse Coding" *không cụ thể, không có tham số* (nghĩa là, không có hàm cụ thể ánh xạ từ véc-tơ đầu vào sang véc-tơ đặc trưng). Điểm khác biệt này giúp cho SAEs có một số lợi thế so với "Sparse Coding":

- Việc huấn luyện SAEs có thể được thực hiện hiệu quả hơn "Sparse Coding" thông qua thuật toán lan truyền ngược.



Hình 2.3: So sánh giữa "Sparse Coding" và SAEs. SAEs có bộ mã hóa *cụ thể, có tham số* ($h = f(W^{(e)}x + b^{(e)})$); trong khi đó, bộ mã hóa của "Sparse Coding" *không cụ thể, không có tham số*.

- Sau khi huấn luyện, với một véc-tơ đầu vào mới, SAEs có thể tính ra được véc-tơ đặc trưng rất nhanh bằng cách lan truyền tiến qua bộ mã hóa; trong khi đó, "Sparse Coding" vẫn phải tiến hành quá trình tối ưu hóa.

"Softmax Regression"

"Softmax Regression" là mô hình phân K lớp. Trong ngữ cảnh của bài toán học đặc trưng, "Softmax Regression" thường được dùng để đánh giá các đặc trưng học được (bởi mô hình này đơn giản, không có nhiều siêu tham số).

Hàm dự đoán của "Softmax Regression"

Với một véc-tơ đầu vào $x \in \mathbb{R}^{D\times 1}$, hàm dự đoán $h(x)$ của "Softmax Regression" sẽ trả về một véc-tơ gồm có K phần tử (ứng với K lớp), trong đó phần tử thứ k của véc-tơ này cho biết xác suất $p(y = k|x)$ với $y \in \{1,\ldots,K\}$ là nhãn lớp của véc-tơ đầu vào x. Như vậy, ta có thể quyết định x sẽ thuộc về lớp mà có xác suất lớn nhất.

Cụ thể, hàm dự đoán $h(x)$ của "Softmax Regression" như sau:

$$
\begin{aligned}
h(x) &= \begin{bmatrix} p(y=1|x) \\ p(y=2|x) \\ \vdots \\ p(y=K|x) \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} \frac{\exp(W_1^T x+b_1)}{\sum_{k=1}^K \exp(W_k^T x+b_k)} \\ \frac{\exp(W_2^T x+b_2)}{\sum_{k=1}^K \exp(W_k^T x+b_k)} \\ \vdots \\ \frac{\exp(W_K^T x+b_K)}{\sum_{k=1}^K \exp(W_k^T x+b_k)} \end{bmatrix}
\end{aligned}
\tag{2.5}
$$

với $W = \{W_1, \ldots, W_K\}$ ($W_k \in \mathbb{R}^{D\times 1}$) và $b = \{b_1, \ldots, b_K\}$ ($b_k \in \mathbb{R}$) là các tham số của hàm dự đoán. Để ý tổng các phần tử của véc-tơ $h(x)$ bằng 1.

Tìm các tham số của hàm dự đoán của "Softmax Regression"

Cho tập huấn luyện $\{(x^{(1)}, y^{(1)}), \ldots, (x^{(N)}, y^{(N)})\}$. Để tìm ra được các tham số W và b của hàm dự đoán của "Softmax Regression" ở công thức (2.5), ta sẽ dùng phương pháp "maximum likelihood". Giả sử các mẫu dữ liệu trong tập huấn luyện được phát sinh một cách độc lập với nhau, ta có hàm "likelihood":

$$
\begin{aligned}
L(W,b) &= p(Y|X) \\
&= \prod_{i=1}^{N} p(y^{(i)}|x^{(i)}) \\
&= \prod_{i=1}^{N}\prod_{j=1}^{K} \left(\frac{\exp(W_j^T x + b_j)}{\sum_{k=1}^K \exp(W_k^T x + b_k)} \right)^{1\{y^{(i)}=j\}}
\end{aligned}
\tag{2.6}
$$

Trong đó:

- $X = \{x^{(1)}, \ldots, x^{(N)}\}$ và $Y = \{y^{(1)}, \ldots, y^{(N)}\}$.
- Hàm $1\{y^{(i)} = j\}$ sẽ trả về 1 nếu $y^{(i)} = j$ và trả về 0 nếu ngược lại.

Ta tìm W và b sao cho hàm "likelihood" $L(W,b)$ đạt cực đại. Cực đại $L(W,b)$ tương

đương với cực tiểu $-\log L(W,b)$ (hàm này được gọi là hàm "negative log-likelihood").

Như vậy, ta sẽ tìm các tham số W và b của hàm dự đoán của "Softmax Regression" sao cho hàm chi phí sau đạt cực tiểu:

$$\begin{aligned} C(W,b) &= -\log L(W,b) \\ &= -\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{K} 1\{y^{(i)}=j\}\log\frac{\exp(W_j^T x+b_j)}{\sum_{k=1}^{K}\exp(W_k^T x+b_k)} \end{aligned} \tag{2.7}$$

Để cực tiểu hóa hàm này, ta có thể sử dụng thuật toán "Gradient Descent" (sẽ được trình bày ở dưới).

"Gradient Descent"

"Batch Gradient Descent"

Thuật toán "Batch Gradient Descent" (BGD) dùng để cực tiểu hóa hàm chi phí $C(W)$ *trên toàn bộ tập huấn luyện* theo tham số W (ví dụ, $C(W)$ có thể là hàm chi phí trên toàn bộ tập huấn luyện của "Auto-Encoders" hay của "Softmax Regression"). Một cách cụ thể, xét hàm chi phí trên toàn bộ tập huấn luyện của một mô hình học nào đó (ví dụ, "Auto-Encoders" hay "Softmax Regression"):

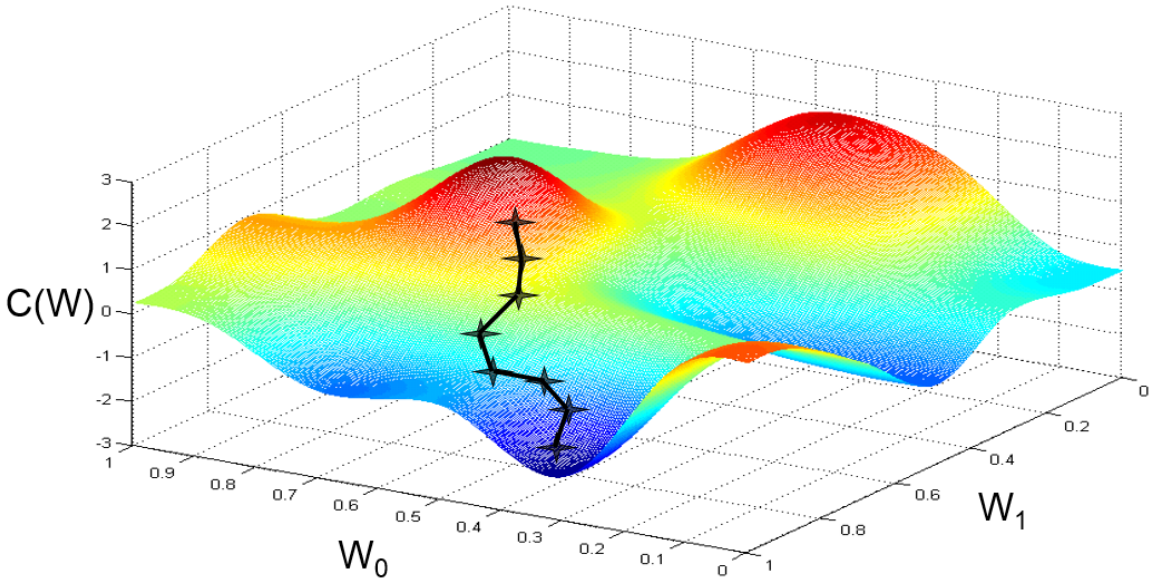
$$C(W) = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} C^{(i)}(W) \tag{2.8}$$

Trong đó:

- W là các tham số của mô hình học.
- $C^{(i)}(W)$ là chi phí của mẫu huấn luyện thứ i trong tập huấn luyện.
- N là tổng số mẫu huấn luyện.

Mục tiêu của ta là tìm W để $C(W)$ đạt cực tiểu.

Ý tưởng của BGD là đầu tiên khởi tạo ngẫu nhiên W, rồi nhìn vùng cục bộ xung quanh W và đi (cập nhật W) theo hướng mà làm cho $C(W)$ giảm nhiều nhất; tại W mới, ta lại lặp lại qui trình này: nhìn vùng cục bộ xung quanh W và đi theo hướng mà



Hình 2.4: Minh họa quá trình chạy của thuật toán BGD (hình vẽ được điều chỉnh từ hình vẽ lấy từ slide bài giảng của GS. Andrew Ng trong lớp máy học trực tuyến ở trang coursera.org).

làm cho $C(W)$ giảm nhiều nhất; cứ thế..., ta lặp cho đến khi hội tụ. Hình 2.4 minh họa cho quá trình chạy này của BGD với trường hợp đơn giản là W chỉ gồm có 2 thành phần là W_0 và W_1.

Cụ thể, ở mỗi vòng lặp, ta sẽ cập nhật W theo công thức:

$$W = W + \eta \hat{v} \tag{2.9}$$

Trong đó:

- $\hat{v}$ là véc-tơ đơn vị có cùng kích thước với W cho biết hướng đi (hướng cập nhật W) mà sẽ làm cho $C(W)$ giảm nhiều nhất xét trong vùng cục bộ xung quanh W hiện tại.
- η là hằng số dương điều khiển độ dài của một bước đi.

Ta nên đi theo hướng $\hat{v}$ nào để làm cho $C(W)$ giảm nhiều nhất xét trong vùng cục bộ xung quanh W hiện tại? Xét hiệu sau:

$$\Delta C = C(W + \eta \hat{v}) - C(W) \tag{2.10}$$

Ta cần tìm $\hat{v}$ để làm cho ΔC có giá trị âm nhỏ nhất. BGD xấp xỉ $C(W+\eta\hat{v})$ bằng cách sử dụng khai triển Taylor *đến số hạng ứng với đạo hàm bậc nhất* (để ý $W+\eta\hat{v}$ là điểm lân cận xung quanh W):

$$C(W+\eta\hat{v}) \approx C(W) + \eta\nabla C(W)^T\hat{v} \tag{2.11}$$

với $\nabla C(W)$ là véc-tơ chứa các đạo hàm riêng của C theo W (ở đây, khi nói đến véc-tơ, ta ngầm hiểu là véc-tơ cột). Thế công thức (2.11) vào công thức (2.10) ta được:

$$\begin{aligned}\Delta C &= \eta\nabla C(W)^T\hat{v} \\ &= \eta\|\nabla C(W)\|\|\hat{v}\|\cos(\nabla C(W);\hat{v}) \\ &= \eta\|\nabla C(W)\|\cos(\nabla C(W);\hat{v}) \\ &\geq -\eta\|\nabla C(W)\|\end{aligned} \tag{2.12}$$

Ta thấy ΔC sẽ có giá trị âm nhỏ nhất khi cos của góc tạo bởi hai véc-tơ $\nabla C(W)$ và $\hat{v}$ có giá trị bằng -1; nghĩa là, $\hat{v}$ sẽ có chiều ngược với chiều của $C(W)$. Và vì $\hat{v}$ là véc-tơ đơn vị nên cuối cùng ta có:

$$\hat{v} = -\frac{\nabla C(W)}{\|\nabla C(W)\|} \tag{2.13}$$

Như vậy, ta có công thức cập nhật tham số ở mỗi vòng lặp của BGD như sau:

$$W = W - \eta\frac{\nabla C(W)}{\|\nabla C(W)\|} \tag{2.14}$$

Với công thức cập nhật tham số trên, ở mỗi vòng lặp, BGD sẽ luôn đi một bước có độ dài cố định là η. Tuy nhiên, ta thấy rằng khi $\|\nabla C(W)\|$ lớn (độ dốc lớn), ta muốn đi một bước dài; và khi $\|\nabla C(W)\|$ nhỏ (độ dốc nhỏ, nhiều khả năng gần cực trị), ta muốn đi một bước ngắn. Nghĩa là, thay vì dùng độ dài bước đi η cố định, ta muốn dùng η thay đổi và tỉ lệ thuận với $\|\nabla C(W)\|$:

$$\eta = \alpha\|\nabla C(W)\| \tag{2.15}$$

với α là hằng số dương cho biết mức độ tỉ lệ thuận giữa $\|\nabla C(W)\|$ và η; α được gọi là hệ số học (learning rate). Thế (2.15) vào (2.14) ta được công thức cập nhật tham số

của BGD:

$$W = W - \alpha \nabla C(W) \tag{2.16}$$

Nếu α lớn thì ta sẽ đi được một bước dài nhưng có nguy cơ ra khỏi vùng xấp xỉ cục bộ của khai triển Taylor (nghĩa là không đảm bảo sau khi cập nhật W sẽ làm cho giá trị của hàm chi phí C giảm). Nếu α nhỏ thì sẽ đảm bảo nằm trong vùng xấp xỉ cục bộ của khai triển Taylor nhưng thời gian học sẽ rất lâu (vì mỗi lần cập nhật chỉ đi được một bước ngắn). Do đó, cần chọn giá trị α trung dung.

Tổng thể thuật toán BGD được trình bày ở thuật toán 2.1. Cách xác định điều kiện dừng của thuật toán sẽ được trình bày ở mục 2.4.3.

Thuật toán 2.1 Batch Gradient Descent (BGD)

Đầu vào: Tập huấn luyện, hệ số học $\alpha > 0$
Đầu ra: Bộ tham số W của mô hình học để cho hàm chi phí $C(W)$ đạt cực tiểu
Thao tác:

1: Khởi tạo ngẫu nhiên cho W
2: **while** chưa thỏa điều kiện dừng **do**
3: $\quad W = W - \alpha \nabla C(W)$ %% C là hàm chi phí trên toàn bộ tập huấn luyện
4: **end while**

"Stochastic Gradient Descent"

Thuật toán "Stochastic Gradient Descent" (SGD) là cải tiến của "Batch Gradient Descent" (BGD) để tăng tốc quá trình tối ưu hóa khi phải làm việc với tập dữ liệu lớn. Một cách cụ thể, xét công thức cập nhật tham số (2.16) của BGD, ta thấy để đi một bước (thực hiện một lần cập nhật W), ta cần phải tính véc-tơ đạo hàm riêng $\nabla C(W)$. Từ công thức (2.8) của hàm chi phí $C(W)$ ta có:

$$\nabla C(W) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \nabla C^{(i)}(W) \tag{2.17}$$

Nghĩa là với BGD, để đi được một bước, ta cần phải duyệt hết toàn bộ tập huấn luyện để tính các véc-tơ đạo hàm riêng $\nabla C^{(i)}(W)$ của hàm chi phí của mỗi mẫu huấn luyện, rồi sau đó lấy trung bình các véc-tơ đạo hàm riêng này để ra được $\nabla C(W)$. Khi mà tập huấn luyện lớn, quá trình này sẽ tốn thời gian và làm cho BGD chạy rất chậm.

SGD khắc phục nhược điểm trên của BGD bằng cách: thay vì phải duyệt tất cả các mẫu trong tập huấn luyện và tính véc-tơ đạo hàm riêng trung bình rồi mới đi được một bước như ở BGD, SGD chỉ duyệt qua *một số mẫu* trong tập huấn luyện, tính véc-tơ đạo hàm riêng trung bình *trên tập con này*, rồi đã đi ngay một bước. Ví dụ, với tập huấn luyện có 1000 mẫu, BGD sẽ duyệt qua hết 1000 mẫu này rồi mới đi được một bước; trong khi đó, với 10 mẫu đầu tiên, SGD đi được một bước, với 10 mẫu kế tiếp, SGD đi được một bước nữa... (ở đây, giả sử số lượng mẫu mà SGD cần duyệt qua để đi được một bước là 10). Như vậy, với một lần quét qua toàn bộ tập huấn luyện, BGD chỉ đi được 1 bước, trong khi đó SGD đi được tới 100 bước. Nguyên 1000 mẫu được gọi là một "batch", còn tập gồm 10 mẫu để SGD đi được một bước gọi là một "mini-batch"; ở đây, ta nói kích thước của "mini-batch" bằng 10. Một lần duyệt qua toàn bộ tập huấn luyện được gọi là một "epoch"; như vậy, SGD sẽ thực hiện nhiều "epoch", trong mỗi "epoch" lại thực hiện nhiều lần cập nhật tham số ứng với các "mini-batch".

Tại sao SGD hoạt động? Ta thấy hướng đi của BGD được tính bằng cách lấy trung bình trên *toàn bộ tập huấn luyện* các véc-tơ đạo hàm riêng $\nabla C^{(i)}(W)$, còn hướng đi của SGD được tính bằng cách lấy trung bình trên *một tập con (một "mini-batch") của tập huấn luyện* các véc-tơ đạo hàm riêng $\nabla C^{(i)}(W)$. Như vậy, tuy hướng đi của SGD không chính xác hoàn toàn với hướng đi của BGD nhưng nó sẽ giao động xung quanh hướng đi của BGD; hay nói một cách khác, hướng đi của SGD xấp xỉ hướng đi của BGD. Nếu ta chọn kích thước của "mini-batch" nhỏ (tối thiểu là bằng 1) thì SGD sẽ chạy nhanh nhưng độ "nhiễu loạn" (độ giao động xung quanh hướng đi của BGD) sẽ tăng; còn nếu ta chọn kích thước của "mini-batch" lớn (tối đa là bằng số lượng mẫu của tập huấn luyện, lúc này SGD trở thành BGD) thì độ "nhiễu loạn" sẽ giảm nhưng SGD sẽ chạy chậm. Do đó, cần chọn kích thước "mini-batch" có giá trị trung dung. Lưu ý là tính "nhiễu loạn" của SGD cũng sẽ thể có lợi khi hàm chi phí có "bề mặt" phức tạp (ví dụ như hàm chi phí của mạng nơ-ron); chẳng hạn, tính "nhiễu loạn" có thể giúp SGD "nhảy" ra khỏi những vùng cực trị cục bộ, hay không bị mắc kẹt ở những vùng "đồng bằng". Ngoài ra, khi chọn kích thước của "mini-batch" > 1, ta sẽ có thể tận dụng được sức mạnh tính toán song song.

Tổng thể thuật toán SGD được trình bày ở thuật toán 2.2. Cách xác định điều kiện dừng của thuật toán sẽ được trình bày ở mục 2.4.3.

Thuật toán 2.2 Stochastic Gradient Descent (SGD)

Đầu vào: Tập huấn luyện gồm N mẫu, hệ số học $\alpha > 0$, kích thước "mini-batch" B
Đầu ra: Bộ tham số W của mô hình học để cho hàm chi phí $C(W)$ đạt cực tiểu
Thao tác:

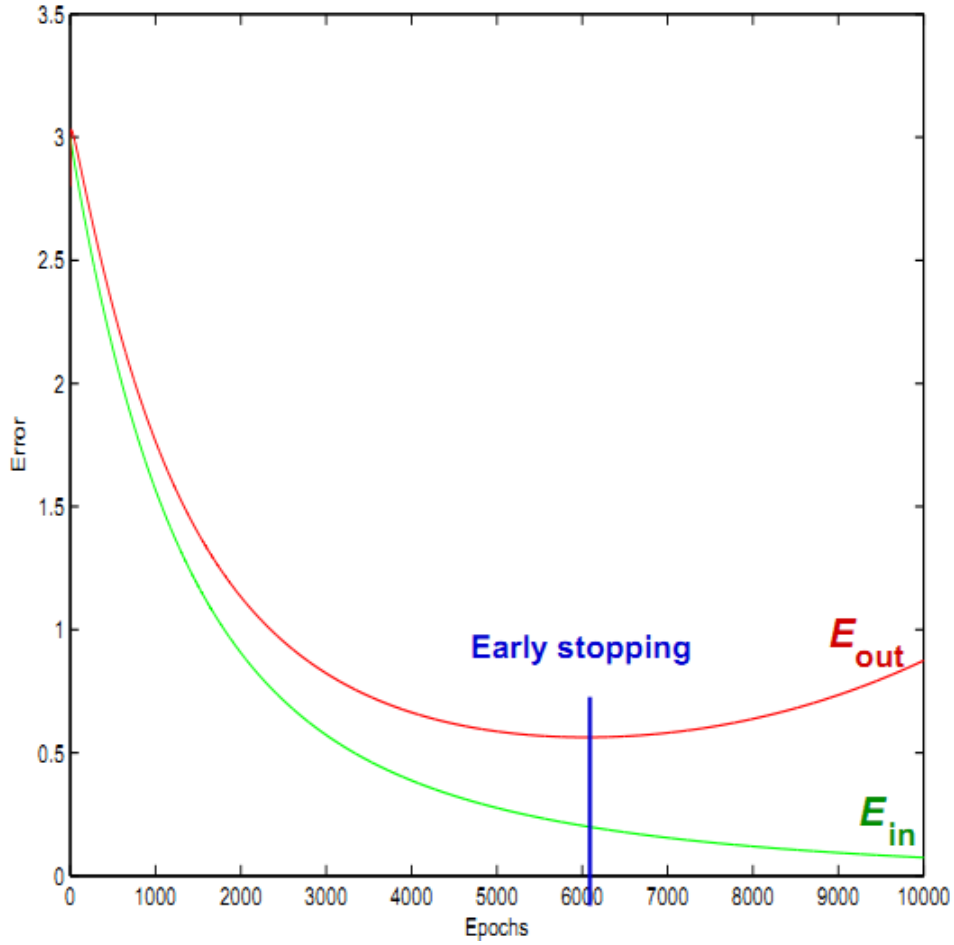
Khởi tạo ngẫu nhiên cho W
while chưa thỏa điều kiện dừng **do** %% Với mỗi "epoch"
    Xáo trộn ngẫu nhiên thứ tự của các mẫu trong tập huấn luyện (thường sẽ giúp SGD hội tụ nhanh hơn)
    for b = 1 : N/B **do** %% Với mỗi "mini-batch"
        $W = W - \alpha \frac{1}{B} \sum_{i=(b-1)B+1}^{bB} \nabla C^{(i)}(W)$
    end for
end while

Chiến lược "dừng sớm"

"Dừng sớm" (early stopping) là một cách "miễn phí" để quyết định số vòng lặp của SGD (hay BGD). Sở dĩ nói "miễn phí" là vì để chọn một siêu tham số, thông thường ta cần phải tiến hành huấn luyện nhiều lần với các giá trị khác nhau của siêu tham số này, và chọn ra giá trị mà cho kết quả tốt nhất trên tập "validation" (tập ngoài tập huấn luyện); ở đây, với chiến lược "dừng sớm", số lượng vòng lặp sẽ được xác định ngay trong quá trình huấn luyện (nghĩa là, chỉ tốn một lần huấn luyện). Ngoài ra, chiến lược "dừng sớm" cũng giúp chống vấn đề quá khớp (overfitting).

Ý tưởng của chiến lược "dừng sớm" đơn giản là trong khi thực hiện các vòng lặp của quá trình tối ưu hóa với SGD (hay BGD), ta sẽ theo dõi "độ lỗi" trên tập "validation" (ở đây, "độ lỗi" được định nghĩa tùy theo ngữ cảnh; ví dụ, nếu dùng SGD để cực tiểu hóa hàm chi phí của "Softmax Regression" thì "độ lỗi" có thể là tỉ lệ phân lớp sai, còn nếu dùng SGD để cực tiểu hóa hàm chi phí của SAEs thì "độ lỗi" có thể là giá trị của hàm chi phí). Khi SGD (hay BGD) càng thực hiện nhiều vòng lặp thì nhìn chung "độ lỗi" trên tập huấn luyện sẽ càng giảm xuống, còn "độ lỗi" trên tập "validation" (ngoài tập huấn luyện) ban đầu sẽ giảm xuống nhưng đến một lúc nào đó sẽ tăng lên, báo hiệu bắt đầu xảy ra sự quá khớp. Do đó, trong quá trình tối ưu hóa với SGD (hay BGD), nếu thấy "độ lỗi" trên tập "validation" tăng lên thì ta sẽ dừng quá trình tối ưu hóa. Ý tưởng này của chiến lược "dừng sớm" được minh họa ở hình 2.5.

Trong thực tế cài đặt, khi thấy "độ lỗi" trên tập "validation" tăng lên, ta không nên dừng ngay quá trình tối ưu hóa mà nên thực hiện thêm một số vòng lặp nữa rồi mới



Hình 2.5: Minh họa chiến lược "dừng sớm" (early stopping). E_{in} là độ lỗi trên tập huấn luyện, còn E_{out} là độ lỗi trên tập "validation" (ngoài tập huấn luyện).

quyết định dừng hay không (bởi vì có thể "độ lỗi" trên tập "validation" chỉ tăng lên một tí rồi sau đó lại giảm xuống).

Chương 3

Sparse Rectified Auto-Encoders

Chương này trình bày về những đóng góp của luận văn. Ở đây, chúng tôi tập trung nghiên cứu "Sparse Auto-Encoders" với hàm kích hoạt "rectified linear" ($f(x) = max(0,x)$) ở tầng ẩn vì hàm này tính nhanh và có thể cho tính thưa thật sự (đúng bằng 0). Chúng tôi gọi "Sparse Auto-Encoders" với hàm kích hoạt như vậy là "Sparse Rectified Auto-Encoders" (SRAEs). Đóng góp của chúng tôi là làm rõ SRAEs ở hai điểm:

- *Ràng buộc thưa: chúng tôi cố gắng hiểu khó khăn của việc huấn luyện SRAEs khi dùng chuẩn L1 để ràng buộc thưa; từ đó, chúng tôi đề xuất một phiên bản hiệu chỉnh của thuật toán "Stochastic Gradient Descent" (SGD), gọi là "Sleep-Wake Stochastic Gradient Descent" (SW-SGD), để giải quyết khó khăn này.*
- *Ràng buộc trọng số: chúng tôi cũng đưa ra một cách ràng buộc trọng số hợp lý cho SRAEs.*

"Sparse Rectified Auto-Encoders" (SRAEs)

Các hàm kích hoạt thường được sử dụng trong mạng nơ-ron là:

- hàm sigmoid: $f(x) = \frac{1}{1+e^{-x}}$
- và hàm tanh: $f(x) = \frac{e^{x}-e^{-x}}{e^{x}+e^{-x}}$

Gần đây, cộng đồng nghiên cứu mạng nơ-ron phát hiện ra một hàm kích hoạt mới hoạt động rất tốt là hàm "rectified linear" [10][5][16]: $f(x) = max(0,x)$.

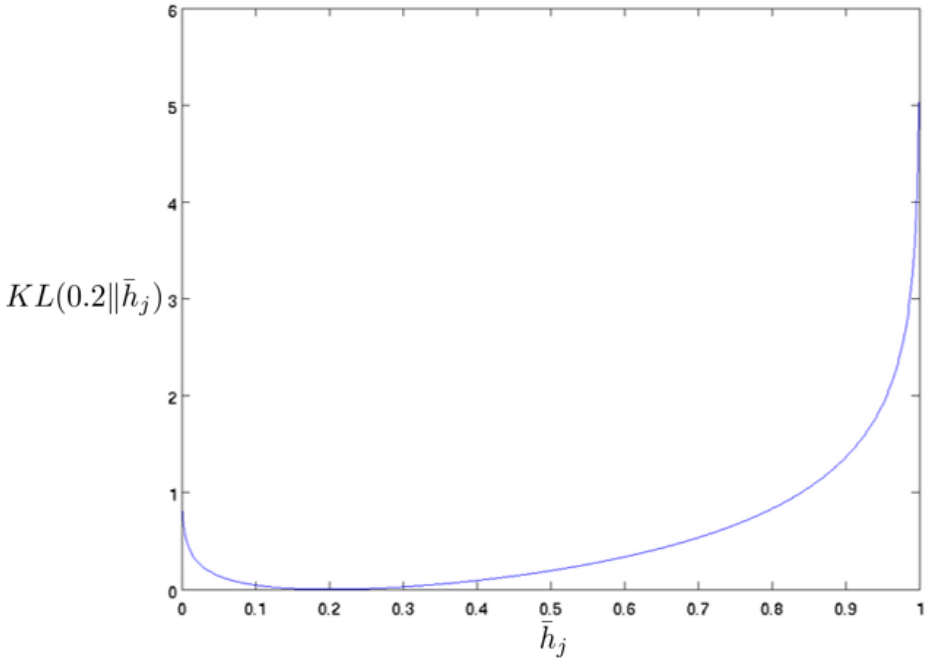
Hàm kích hoạt "rectified linear" rất phù hợp với "Sparse Auto-Encoders" (SAEs) bởi vì hàm này vốn dĩ đã tạo ra véc-tơ đặc trưng thưa (với một véc-tơ đầu vào, hàm "rectified linear" vốn dĩ đã tạo ra một véc-tơ đặc trưng với khoảng 50% số phần tử bằng 0). Khác với hàm sigmoid là khi véc-tơ đầu vào không chứa đặc trưng tương tự với đặc trưng của bộ lọc (ở đây bộ lọc ám chỉ véc-tơ gồm các trọng số đi vào một nơ-ron ẩn), hàm "rectified linear" thường sẽ cho giá trị đúng bằng 0; trong khi đó, hàm sigmoid thường vẫn cho một giá trị dương nhỏ. Ngoài ra, hàm "rectified linear" tính nhanh hơn hàm sigmoid và hàm tanh bởi vì hàm này chỉ phải thực hiện phép max chứ không phải thực hiện phép lũy thừa và phép chia như ở hai hàm kia. Cuối cùng, hàm "rectified linear" có tiềm năng để có thể huấn luyện đồng thời nhiều tầng biểu diễn đặc trưng một cách không giám sát (thay vì phải huấn luyện từng tầng biểu diễn đặc trưng một) bởi vì hàm này đã được dùng để huấn luyện thành công nhiều tầng biểu diễn đặc trưng trong ngữ cảnh có giám sát [5][16]. Với những điểm trên, trong luận văn này, chúng tôi sẽ tập trung nghiên cứu SAEs với hàm kích hoạt ở tầng ẩn là hàm "rectified linear". Chúng tôi gọi SAEs với hàm kích hoạt như vậy là "Sparse Rectified Auto-Encoders" (SRAEs).

Ràng buộc thưa trong SRAEs

Cách thường được dùng để ràng buộc thưa trong "Sparse Auto-Encoders" (SAEs) là ép giá trị đầu ra trung bình $\bar{h}_j$ của nơ-ron ẩn thứ j về một giá trị cố định gần không ρ [6][4][3] (giá trị đầu ra trung bình này được tính với toàn bộ các mẫu huấn luyện, hoặc nếu dùng "mini-batch" thì sẽ được tính với các mẫu huấn luyện trong một "mini-batch" nhưng kích thước của "mini-batch" cần phải tương đối lớn). Trong trường hợp giá trị đầu ra của nơ-ron ẩn thuộc $[0,1]$ (ví dụ, dùng hàm kích hoạt sigmoid), việc ép thưa có thể được thực hiện bằng cách cực tiểu hóa sự sai biệt Kullback-Leibler (KL):

$$\sum_j KL(\rho||\bar{h}_j) = \sum_j \left(\rho \log \frac{\rho}{\bar{h}_j} + (1-\rho) \log \frac{(1-\rho)}{(1-\bar{h}_j)} \right) \tag{3.1}$$

Khi $\bar{h}_j$ càng gần với ρ thì hàm $KL(\rho||\bar{h}_j)$ sẽ có giá trị càng nhỏ và sẽ đạt cực tiểu (bằng 0) khi $\bar{h}_j = \rho$; khi $\bar{h}_j$ càng xa với ρ ($\bar{h}_j$ tiến về phía 0 hoặc phía 1) thì hàm $KL(\rho||\bar{h}_j)$ sẽ có giá trị càng lớn và tiến tới ∞ khi $\bar{h}_j$ tiến tới 0 hoặc tiến tới 1 (minh



Hình 3.1: Minh họa hàm $KL(\rho\|\bar{h}_j)$ với $\rho = 0.2$. Khi giá trị đầu ra trung bình $\bar{h}_j$ của nơ-ron ẩn j càng gần ρ thì $KL(\rho\|\bar{h}_j)$ sẽ có giá trị càng nhỏ và $KL(\rho\|\bar{h}_j)$ sẽ đạt cực tiểu (bằng 0) khi $\bar{h}_j = \rho$; khi $\bar{h}_j$ càng xa với ρ ($\bar{h}_j$ tiến về phía 0 hoặc phía 1) thì hàm $KL(\rho||\bar{h}_j)$ sẽ có giá trị càng lớn và tiến tới ∞ khi $\bar{h}_j$ tiến tới 0 hoặc tiến tới 1.

họa ở hình 3.1). Trong trường hợp dùng hàm kích hoạt "rectified linear", ta có thể dùng độ lỗi bình phương để ép $\bar{h}_j$ về ρ:

$$\sum_j (\bar{h}_j - \rho)^2 \tag{3.2}$$

Lưu ý là cách ràng buộc thưa này (ép các giá trị đầu ra trung bình của các nơ-ron ẩn về một giá trị cố định gần không) không trực tiếp làm thưa véc-tơ đặc trưng (véc-tơ gồm các giá trị đầu ra ở tầng ẩn khi đưa vào SAEs một véc-tơ đầu vào), mà làm thưa véc-tơ chứa các giá trị của một đặc trưng (véc-tơ gồm các giá trị đầu ra của một nơ-ron ẩn khi đưa vào SAEs các véc-tơ đầu vào khác nhau). Tuy nhiên, cách ràng buộc này làm thưa véc-tơ đặc trưng một cách gián tiếp. Để hình dung rõ hơn về điểm này, ta xét một ví dụ đơn giản sau. Giả sử tập huấn luyện của ta gồm có 5 mẫu huấn luyện và SAEs của ta gồm có 3 nơ-ron ẩn (ứng với 3 đặc trưng). Như vậy ta sẽ có ma trận đặc trưng có kích thước 3×5, trong đó mỗi cột là một véc-tơ đặc trưng ứng với một mẫu huấn luyện (một véc-tơ đầu vào), mỗi dòng là một véc-tơ gồm 5 giá trị của một đặc

trưng ứng với 5 mẫu huấn luyện. Cách ràng buộc thưa ở trên sẽ làm thưa các véc-tơ dòng của ma trận này; giả sử mỗi véc-tơ dòng này chỉ có một phần tử khác không và bốn phần tử còn lại bằng không. Bởi vì từ mỗi véc-tơ cột ta cần phải tái tạo lại véc-tơ đầu vào tương ứng, nên ta cần phân bố các phân tử khác 0 trải đều trên toàn các véc-tơ cột, cố gắng sao cho mỗi véc-tơ cột đều có phần tử khác 0 (nếu ta tập trung các phần tử khác 0 trên cùng một véc-tơ cột thì chỉ có một véc-tơ đầu vào tương ứng được tái tạo tốt, các véc-tơ đầu vào còn lại sẽ không được tái tạo tốt). Và điều này dẫn đến các véc-tơ cột cũng sẽ thưa.

Tuy nhiên, cách ràng buộc thưa như trên đưa thêm một siêu tham số (giá trị đầu ra trung bình mong muốn ρ) vào danh sách các siêu tham số vốn đã có rất nhiều của SAEs (hệ số "thỏa hiệp" giữa độ lỗi tái tạo và độ thưa, số lượng node ẩn, hệ số học, kích thước "mini-batch", ...). Điều này sẽ làm cho quá trình chọn lựa các siêu tham số trở nên "phiền phức" hơn và tốn thời gian hơn.

Tại sao lại không dùng chuẩn L1 để ràng buộc thưa trong SAEs? Đây là một cách tự nhiên vì chuẩn L1 đã được dùng để ràng buộc thưa trong Sparse Coding. Hơn nữa, chuẩn L1 không đưa thêm siêu tham số nào. Ngoài ra, cách tính chuẩn L1 cũng rất đơn giản; trong trường hợp dùng hàm kích hoạt "rectified linear", chuẩn L1 của véc-tơ đặc trưng h đơn giản là bằng tổng giá trị các phần tử của h. Trong phần dưới đây, chúng tôi sẽ giải thích về khó khăn gặp phải khi huấn luyện SAEs, cụ thể là SRAEs, với chuẩn L1.

Khó khăn của việc huấn luyện SRAEs với chuẩn L1

Vấn đề gặp phải khi huấn luyện SRAEs với chuẩn L1 là trong quá trình tối ưu hóa hàm chi phí, chuẩn L1 có thể đẩy véc-tơ gồm các trọng số đi vào một nơ-ron ẩn vào trạng thái mà ở đó nơ-ron ẩn luôn luôn không kích hoạt (có giá trị đầu ra bằng 0 với tất cả các mẫu trong tập huấn luyện). Và một khi véc-tơ trọng số đi vào này đã rơi vào trạng thái nói trên, nó sẽ bị mắc kẹt ở đó mãi mãi và không bao giờ được cập nhật nữa; véc-tơ trọng số đi ra của nơ-ron ẩn này cũng không bao giờ được cập nhật nữa. Một cách cụ thể, xét một nơ-ron ẩn j: có trọng số $W_{ji}^{(e)}$ nối với nơ-ron đầu vào i, và có trọng số $W_{kj}^{(d)}$ nối với nơ-ron đầu ra k. Các đạo hàm riêng của hàm chi phí C (hàm chi phí của một mẫu huấn luyện) ở công thức (2.4) (với hàm ép thưa $s(\cdot) = ||\cdot||_1$) theo

$W_{ji}^{(e)}$ và $W_{kj}^{(d)}$ có thể được tính bằng thuật toán lan truyền ngược như sau:

$$\frac{\partial C}{\partial W_{kj}^{(d)}} = 2(\hat{x}_k - x_k)h_j \tag{3.3}$$

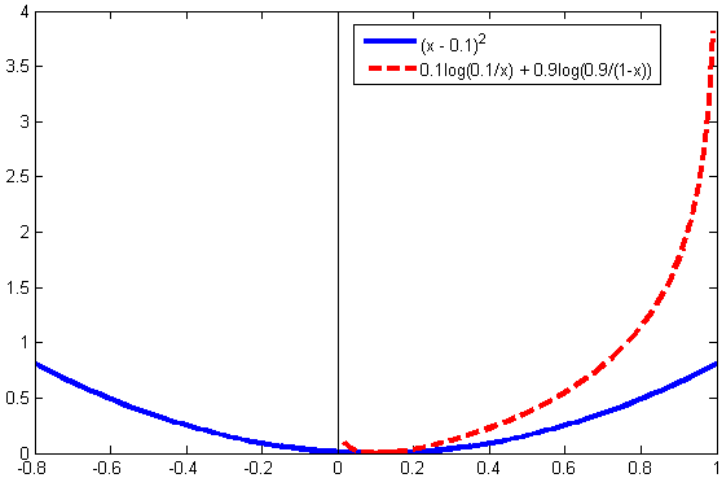
$$\frac{\partial C}{\partial W_{ji}^{(e)}} = (\lambda + \sum_{k'} W_{k'j}^{(d)} \frac{\partial C}{\partial \hat{x}_{k'}}) f'(a_j) x_i \tag{3.4}$$

Trong đó:

- x_k và $\hat{x}_k$ lần lượt là phần tử thứ k của véc-tơ đầu vào x và của véc-tơ tái tạo $\hat{x}$.
- h_j là phần tử thứ j của véc-tơ đặc trưng h (véc-tơ đầu ra ở tầng ẩn).
- f' là đạo hàm của hàm kích hoạt tại nơ-ron ẩn và a_j là giá trị trước khi áp dụng hàm kích hoạt ở nơ-ron ẩn j ($a_j = W_{j\cdot}^{(e)} x + b^{(e)}$ với $W_{j\cdot}^{(e)}$ là véc-tơ dòng thứ j của ma trận $W^{(e)}$).
- k là chỉ số của nơ-ron đầu ra đang xét, còn k' là chỉ số chạy dùng để duyệt hết tất cả các nơ-ron đầu ra.

Từ công thức (3.3) và (3.4), ta có thể dễ thấy rằng, trong quá trình tối ưu hóa hàm chi phí, nếu một khi nơ-ron ẩn j đã rơi vào trạng thái có giá trị đầu ra h_j bằng 0 đối với tất cả các mẫu huấn luyện thì các đạo hàm riêng $\frac{\partial C}{\partial W_{kj}^{(d)}}$ và $\frac{\partial C}{\partial W_{ji}^{(e)}}$ sẽ có giá trị bằng 0 đối với tất cả các mẫu huấn luyện ($\frac{\partial C}{\partial W_{kj}^{(d)}} = 0$ vì $h_j = 0$, và $\frac{\partial C}{\partial W_{ji}^{(e)}} = 0$ vì khi $h_j = f(a_j) = 0$ thì $f'(a_j) = 0$ trong trường hợp $f(\cdot)$ là hàm "rectified linear"); và do đó, các trọng số của nơ-ron ẩn này sẽ không bao giờ được cập nhật nữa (trong trường hợp sử dụng hàm kích hoạt sigmoid, h_j thường không đúng bằng 0 mà là một giá trị dương rất nhỏ gần 0 và đạo hàm tương ứng $f'(a_j)$ cũng không đúng bằng 0 mà là một giá trị dương rất nhỏ gần 0; do đó, sự cập nhật trọng số vẫn có thể xảy ra nhưng sẽ rất chậm). Chúng tôi gọi những nơ-ron ẩn như vậy là những *nơ-ron "ngủ"*. Đặc biệt, tính chất "dễ cho giá trị 0" của hàm "rectified linear" làm cho vấn đề này dễ xảy ra hơn (so với hàm sigmoid) trong quá trình tối ưu hóa.

Vấn đề nơ-ron "ngủ" nêu trên có thể giúp lý giải cho việc tại sao các nghiên cứu lại thường không dùng chuẩn L1 trong SAEs mà thay vào đó là ép giá trị đầu ra trung bình của một nơ-ron ẩn về một giá trị cố định gần 0 (nhưng không bằng 0!); cách



Hình 3.2: So sánh giữa hàm sai biệt KL và hàm lỗi bình phương với giá trị đầu ra trung bình mong muốn $\rho = 0.1$. Khi giá trị đầu ra trung bình của một nơ-ron ẩn bằng 0, hàm sai biệt KL cho giá trị phạt bằng ∞, trong khi đó hàm lỗi bình phương chỉ cho một giá trị phạt rất nhỏ.

làm này có thể giúp ngăn nơ-ron ẩn rơi vào tình trạng "không kích hoạt" với tất cả các mẫu huyện và sau đó các trọng số của nó không thể được cập nhật nữa. Với hàm kích hoạt sigmoid, việc ép giá trị đầu ra trung bình của một nơ-ron ẩn về một giá trị cố định gần 0 có thể được thực hiện bằng cách sử dụng hàm sai biệt KL như ở công thức (3.1), và nơ-ron ẩn này sẽ không thể "ngủ" bởi vì nếu như vậy thì giá trị đầu ra trung bình sẽ bằng 0 và hàm sai biệt KL sẽ cho giá trị phạt là ∞. Với hàm kích hoạt "rectified linear", ta không thể sử dụng hàm sai biệt KL bởi vì miền giá trị đầu ra của hàm kích hoạt này không thuộc $[0, 1]$. Hàm lỗi bình phương như ở công thức (3.2) có thể được dùng thay thế, nhưng thí nghiệm của chúng tôi cho thấy rằng vấn đề nơ-ron "ngủ" vẫn xảy ra. Đó là vì khi giá trị đầu ra trung bình bằng 0, khác với hàm sai biệt KL, hàm lỗi bình phương chỉ cho một giá trị phạt rất nhỏ. Hình 3.2 so sánh hai hàm này với giá trị đầu ra trung bình mong muốn $\rho = 0.1$.

Mặc dù "Sparse Coding"sử dụng chuẩn L1 để ràng buộc thưa, nhưng ta thấy rõ ràng là "Sparse Coding" sẽ không mắc phải vấn đề nơ-ron ngủ ở trên vì "Sparse Coding" không có bộ mã hóa cụ thể như SAEs.

Thuật toán "Sleep-Wake Stochastic Gradient Descent"

Để khắc phục khó khăn của việc huấn luyện SRAEs với chuẩn L1, chúng tôi đề xuất một phiên bản điều chỉnh của thuật toán "Stochastic Gradient Descent" (SGD), gọi là "Sleep-Wake Stochastic Gradient Descent" (SW-SGD). Ý tưởng là trong mỗi "epoch" của SGD (một "epoch" ứng một lần duyệt qua tất cả các mẫu trong tập huấn luyện), ta tính tổng giá trị đầu ra của mỗi nơ-ron ẩn; và sau mỗi "epoch", ta kiểm xem có nơ-ron nào "ngủ" không (có tổng giá trị đầu ra bằng không) và "đánh thức" chúng bằng cách khởi tạo lại véc-tơ trọng số đi vào. Mặc dù cách làm này rất đơn giản, nhưng thí nghiệm của chúng tôi cho thấy nó có thể giúp SRAEs học được thành công các đặc trưng mà không có đặc trưng nào "ngủ".

Một cách cụ thể, cho tập huấn luyện không có nhãn $\{x^{(1)}, x^{(2)}, \ldots, x^{(N)}\}$, thuật toán SW-SGD dùng để cực tiểu hóa hàm chi phí sau của SRAEs:

$$\begin{aligned} C(W) &= \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} C^{(i)}(W) \\ &= \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\left(\|x^{(i)} - \hat{x}^{(i)}\|_2^2 + \lambda\|h^{(i)}\|_1\right) \end{aligned} \tag{3.5}$$

Trong đó:

- $h^{(i)}$ là véc-tơ đầu ra ở tầng ẩn tương ứng với véc-tơ đầu vào $x^{(i)}$:

$$h^{(i)} = \max\left(0, W^{(e)}x^{(i)} + b^{(e)}\right)$$

- $\hat{x}^{(i)}$ là véc-tơ tái tạo của véc-tơ đầu vào $x^{(i)}$:

$$\hat{x}^{(i)} = W^{(d)}h^{(i)} + b^{(d)}$$

- $W = \{W^{(e)}, b^{(e)}, W^{(d)}, b^{(d)}\}$ là các tham số của SRAEs.

Từng bước của thuật toán SW-SGD được trình bày ở thuật toán 3.1 (những chỗ thay đổi so với thuật toán SGD ban đầu được *in nghiêng*).

Thuật toán 3.1 Sleep-Wake Stochastic Gradient Descent (SW-SGD)

Đầu vào: Tập huấn luyện không có nhãn $\{x^{(1)}, \ldots, x^{(N)}\}$, hệ số học $\alpha > 0$, kích thước "mini-batch" B

Đầu ra: Bộ tham số W của SRAEs để cho hàm chi phí $C(W)$ đạt cực tiểu

Thao tác:

Khởi tạo ngẫu nhiên cho W
while chưa thỏa điều kiện dừng **do** %% Với mỗi "epoch"
    Khởi tạo véc-tơ s gồm có D_h phần tử (với D_h là số lượng nơ-ron ẩn của SRAEs), trong đó mỗi phần tử có giá trị bằng 0 *(phần tử s_j của véc-tơ s dùng để lưu tổng giá trị đầu ra của nơ-ron ẩn j với tất cả các mẫu trong tập huấn luyện sau một "epoch")*
    Xáo trộn ngẫu nhiên thứ tự của các mẫu trong tập huấn luyện (thường sẽ giúp hội tụ nhanh hơn)
    for b = 1 : N/B **do** %% Với mỗi "mini-batch"
        for i = (b-1)B+1 : bB **do** %% Với mỗi mẫu huấn luyện trong "mini-batch"
            Lan truyền tiến với véc-tơ đầu vào $x^{(i)}$
            Cập nhật véc-tơ s: $s = s + h^{(i)}$
            (với $h^{(i)}$ là véc-tơ đầu ra ở tầng ẩn tương ứng với véc-tơ đầu vào $x^{(i)}$)
            Lan truyền ngược và tính véc-tơ đạo hàm riêng $\nabla C^{(i)}(W)$
        end for
        Cập nhật W: $W = W - \alpha \frac{1}{B} \sum_{i=(b-1)B+1}^{bB} \nabla C^{(i)}(W)$
    end for
    Kiểm xem có nơ-ron ẩn nào "ngủ" (có tổng đầu ra $s_j = 0$) và "đánh thức" bằng cách khởi tạo lại véc-tơ trọng số đi vào nơ-ron ẩn này
end while

Ràng buộc trọng số trong SRAEs

Bên cạnh ràng buộc thưa, ràng buộc trọng số cũng là một thành phần quan trọng để làm cho SAEs "hoạt động". Tại sao cần phải ràng buộc trọng số? Ví dụ, trong Sparse Coding, ta cần phải ràng buộc các véc-tơ cơ sở được chuẩn hóa (có chiều dài bằng 1); nếu không thì sẽ xảy ra trường hợp là giá trị của hàm chi phí ở công thức (2.1) có thể được làm giảm xuống một cách "tầm thường" bằng cách chia hệ số cho một số lớn tùy ý và nhân véc-tơ cơ sở tương ứng với cùng số lớn đó (làm như vậy sẽ làm độ thưa giảm xuống tùy ý, còn độ lỗi tái tạo thì giữ nguyên). Các véc-tơ cơ cở trong "Sparse Coding" tương ứng với các cột của ma trận trọng số $W^{(d)}$ của bộ giải mã của SAEs (mỗi cột của $W^{(d)}$ ứng với véc-tơ trọng số đi ra tại mỗi nơ-ron ẩn). Như vậy, trong SAEs, ta cũng có thể ràng buộc mỗi cột của $W^{(d)}$ được chuẩn hóa (có chiều dài bằng 1) giống như ở Sparse Coding. Nhưng còn ma trận trọng số $W^{(e)}$ của bộ mã hóa của SAEs? Ta nên ràng buộc $W^{(e)}$ như thế nào cho hợp lý?

Dưới đây là một số cách đã được đề xuất để ràng buộc trọng số của SAEs:

- **Ràng buộc** $W^{(d)} = (W^{(e)})^T$: bộ trọng số được dùng chung cho cả bộ mã hóa và bộ giải mã (cụ thể là $W^{(d)}$ và $W^{(e)}$ là chuyển vị của nhau) [3]. Cách ràng buộc trọng số này cũng được dùng trong các loại "Auto-Encoders" khác như "Denoising Auto-Encoders" và "Contractive Auto-Encoders" [14][13][12]. Lưu ý là tất cả [3][14][13][12] đều dùng hàm kích hoạt sigmoid ở tầng ẩn. Trong trường hợp dùng hàm kích hoạt tuyến tính ($f(x) = x$) ở tầng ẩn, ràng buộc $W^{(d)} = (W^{(e)})^T$ sẽ có xu hướng làm cho các véc-tơ cơ sở (các dòng của $W^{(e)}$ hay các cột của $W^{(d)}$) trực giao với nhau và được chuẩn hóa [7]; nhưng trong trường hợp dùng hàm kích hoạt sigmoid ở tầng ẩn, ta không rõ chuyện gì đang xảy ra. Một điểm lợi của việc dùng chung bộ trọng số là tiết kiệm bộ nhớ lưu trữ; điều này sẽ có ích khi cài đặt song song trên GPU (Graphical Processing Units).

- **Ràng buộc** $W^{(d)}$ **được chuẩn hóa**: các cột của $W^{(d)}$ được ràng buộc là có độ dài bằng 1 [16]. Ràng buộc này tương tự như ở "Sparse Coding" và giúp ngăn chặn việc hàm chi phí có thể bị làm giảm xuống một cách "tầm thường" như đã nói ở trên. Nhưng còn bộ trọng số $W^{(e)}$ của bộ mã hóa? Chẳng hạn, để công

bằng giữa các đặc trưng, ta cũng nên ràng buộc các véc-tơ dòng của $W^{(e)}$ (ứng với các véc-tơ trọng số đi vào các nơ-ron ẩn; các véc-tơ này đóng vai trò như các bộ lọc đặc trưng) có cùng độ dài.

- **Ràng buộc các trọng số có giá trị bình phương nhỏ (weight decay)**: các trọng số của cả bộ mã hóa và bộ giải mã đều được ràng buộc là có độ lớn nhỏ bằng cách phạt tổng bình phương của chúng [6][4]. Cách ràng buộc này vốn ban đầu được dùng trong mạng nơ-ron học có giám sát để tránh vấn đề quá khớp. Khi áp dụng cho SAEs, ta có hiểu nó là một phiên bản "mềm" của cách ràng buộc $W^{(d)}$ được chuẩn hóa ở trên và nhờ đó cũng sẽ giúp cho SAEs tránh khỏi tình trạng hàm chi phí bị giảm xuống một cách "tầm thường"; ngoài ra, nó còn ràng buộc thêm là các véc-tơ dòng của $W^{(e)}$ (ứng với các bộ lọc đặc trưng) có độ dài xấp xỉ bằng nhau (đều nhỏ). Tuy nhiên, cách ràng buộc này lại làm xuất hiện thêm một siêu tham số; ta không muốn điều này.

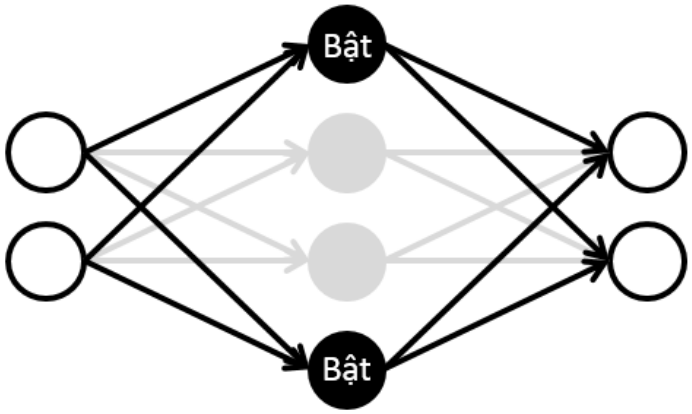
Cách ràng buộc trọng số đề xuất cho SRAEs

Với SRAEs (SAEs sử dụng hàm kích hoạt "rectified linear" ở tầng ẩn), không rõ là ta nên sử dụng cách ràng buộc trọng số nào trong những cách ở trên. Trong phần này, chúng tôi đề xuất một cách ràng buộc trọng số mới và hợp lý cho SRAEs. Cách ràng buộc này không đưa thêm siêu tham số nào. Cụ thể là, cách ràng buộc trọng số của chúng tôi bao gồm đồng thời hai ràng buộc:

- Thứ nhất, chúng tôi ràng buộc ma trận trọng số $W^{(e)}$ của bộ mã hóa và ma trận trọng số $W^{(d)}$ của bộ giải mã là chuyển vị của nhau: $W^{(d)} = (W^{(e)})^T$.

- Thứ hai, chúng tôi đồng thời cũng ràng buộc là các véc-tơ dòng của $W^{(e)}$ và các véc-tơ cột của $W^{(d)}$ được chuẩn hóa (có độ dài bằng 1). Ở đây, mỗi véc-tơ dòng của $W^{(e)}$ ứng với véc-tơ trọng số đi vào ở mỗi nơ-ron ẩn, và mỗi véc-tơ cột của $W^{(d)}$ ứng với véc-tơ trọng số đi ra ở mỗi nơ-ron ẩn.

Với một véc-tơ đầu vào x, nếu ta chỉ chú ý đến các nơ-ron được "bật" (có giá trị đầu ra khác không) ở tầng ẩn thì đây là một hệ thống tuyến tính (minh họa ở hình 3.3). Do đó, với hai ràng buộc ở trên, SRAEs sẽ chiếu véc-tơ đầu vào x xuống một hệ trục tọa độ cục bộ sao cho từ hệ trục tọa độ này có thể tái tạo được tốt véc-tơ x ban đầu; hệ



Hình 3.3: Minh họa SRAEs. Với một véc-tơ đầu vào, nếu ta chỉ chú ý đến các nơ-ron được "bật" (có giá trị đầu ra khác không) ở tầng ẩn thì đây là một hệ thống tuyến tính.

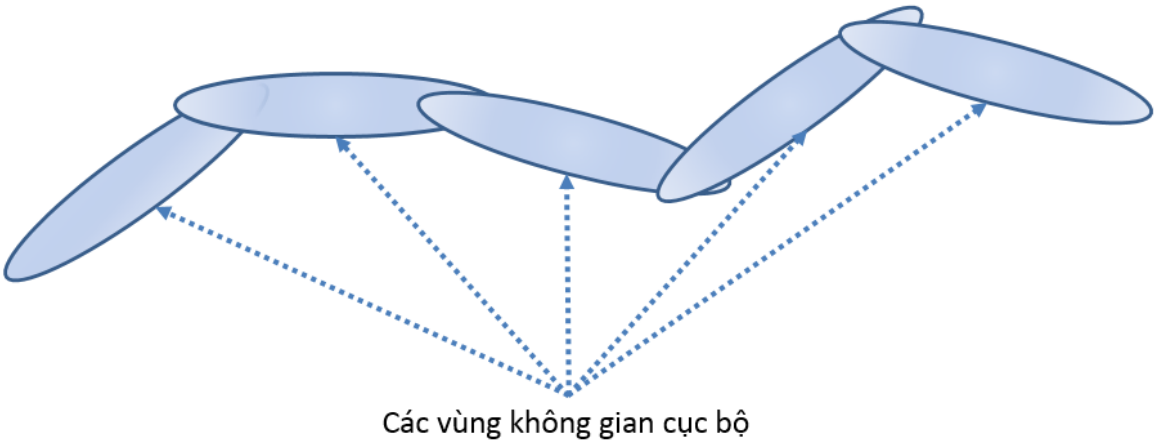
trục tọa độ cục bộ này bao gồm một số ít các véc-tơ cơ sở (đã được chuẩn hóa) được chọn lựa bởi hàm "rectified linear" từ tập lớn các véc-tơ cơ sở. Ta có thể hiểu tập con các véc-tơ cơ sở này biểu diễn vùng không gian PCA cục bộ xung quanh x. Như vậy, SRAEs (với ràng buộc trọng số đề xuất của chúng tôi) có thể học được mặt phi tuyến mà ở đó dữ liệu tập trung bằng cách ghép nhiều mặt tuyến tính cục bộ lại với nhau (minh họa ở hình 3.4). Mỗi mặt tuyến tính cục bộ được phụ trách bởi một tập con các véc-tơ cơ sở. Điểm lợi ở đây là các véc-tơ cơ sở có thể được dùng chung giữa các mặt tuyến tính cục bộ láng giềng nhau.

Như vậy, ta cần phải tối thiểu hóa hàm chi phí của SRAEs với hai ràng buộc trọng số ở trên. Trong khi ràng buộc thứ nhất ($W^{(d)} = (W^{(e)})^T$) có thể được tích hợp dễ dàng vào thuật toán tối ưu hóa "Stochastic Gradient Descent" (SGD), ràng buộc thứ hai (các dòng của $W^{(e)}$ và các cột của $W^{(d)}$ được chuẩn hóa) thoạt nhìn khó có thể tích hợp vào thuật toán SGD và có thể ta cần phải sử dụng đến các phương pháp tối ưu hóa phức tạp hơn. Để giải quyết vấn đề này, chúng tôi thay đổi công thức lan truyền tiến của SRAEs như sau:

$$h = \max(0, \hat{W}^{(e)} x + b^{(e)}) \tag{3.6}$$

$$\hat{x} = (\hat{W}^{(e)})^T h + b^{(d)} \tag{3.7}$$

Trong đó, ma trận $\hat{W}^{(e)}$ là ma trận $W^{(e)}$ với các dòng đã được chuẩn hóa (bằng cách lấy mỗi phần tử trên một dòng của $W^{(e)}$ chia cho căn bậc hai của tổng bình phương của tất cả các phần tử trên dòng đó). Ở đây, các tham số được học vẫn là $W^{(e)}$, $b^{(e)}$,



Hình 3.4: Với một véc-tơ đầu vào x, chỉ có một tập con các nơ-ron ẩn được bật. Tập con các véc-tơ cơ sở tương ứng với tập con các nơ-ron ẩn này biểu diễn một vùng không gian cục bộ xung quanh x (giống như vùng không gian PCA cục bộ). Như vậy, SRAEs (với ràng buộc trọng số đề xuất của chúng tôi) có thể học được mặt phi tuyến mà ở đó dữ liệu tập trung bằng cách ghép nhiều mặt tuyến tính cục bộ lại với nhau. Mỗi mặt tuyến tính cục bộ được phụ trách bởi một tập con các véc-tơ cơ sở. Điểm lợi ở đây là các véc-tơ cơ sở có thể được dùng chung giữa các mặt tuyến tính cục bộ láng giềng nhau.

và $b^{(d)}$. Bằng cách này, ta vẫn có thể sử dụng thuật toán SGD như bình thường. Khi đưa thêm bước chuẩn hóa vào công thức lan truyền tiến như vậy, ta cũng cần phải tính lại các đạo hàm riêng của hàm chi phí theo các tham số (sẽ phức tạp hơn so với công thức lan truyền tiến ban đầu). Chúng tôi sử dụng ngôn ngữ lập trình là Theano [2]; nhờ tính năng tính đạo hàm một cách tự động của Theano, ở đây ta sẽ không cần phải tính toán cụ thể công thức của các đạo hàm riêng này.

Chương 4

Các Kết Quả Thí Nghiệm

Trong chương này, chúng tôi trình bày các kết quả thí nghiệm để đánh giá các đề xuất đã được nói ở chương trước. Bộ dữ liệu được dùng để tiến hành các thí nghiệm là bộ MNIST (bộ ảnh chữ số viết tay gồm các chữ số từ 0 đến 9). Các kết quả thí nghiệm cho thấy khi huấn luyện "Sparse Rectified Auto-Encoders" (SRAEs) với chuẩn L1 sẽ gặp phải vấn đề nơ-ron "ngủ", và chiến lược "ngủ - đánh thức" trong thuật toán "Sleep-Wake Stochastic Gradient Descent" (SW-SGD) của chúng tôi có thể giúp khắc phục vấn đề này. Các kết quả thí nghiệm cũng cho thấy cách ràng buộc trọng số đề xuất của chúng tôi cho kết quả tốt nhất trong số các cách ràng buộc trọng số có thể áp dụng cho SRAEs. Cuối cùng, thí nghiệm cũng cho thấy SRAEs với hai đề xuất trên của chúng tôi (SW-SGD và cách ràng buộc trọng số) có thể học được những đặc trưng cho kết quả phân lớp tốt khi so sánh với các loại "Auto-Encoders" khác.

Các thiết lập thí nghiệm

Chúng tôi tiến hành các thí nghiệm trên bộ dữ liệu MNIST [8]; bộ dữ liệu này gồm các ảnh xám (có kích thước 28×28) của mười chữ số viết tay từ 0 đến 9. Ở hình 4.1 là một số ảnh mẫu của bộ dữ liệu này. Dữ liệu được tiến hành tiền xử lý bằng cách lấy mỗi giá trị điểm ảnh chia cho 255 để đưa về đoạn $[0, 1]$. Chúng tôi sử dụng cách phân chia thường được sử dụng cho bộ dữ liệu này: 50000 ảnh dùng để huấn luyện, 10000 ảnh dùng để chọn các siêu tham số (validation), và 10000 ảnh dùng để kiểm tra (test).

Hình 4.1: Một số ảnh mẫu của bộ dữ liệu MNIST

Chúng tôi sử dụng ngôn ngữ lập trình Theano [2] bởi vì ngôn ngữ này cho phép dễ dàng cài đặt các thuật toán và dễ dàng sử dụng GPU (Graphical Processing Units) để tính toán song song. Loại GPU mà chúng tôi sử dụng là NVIDIA GTX 560.

Sau khi tiến hành xong bước học đặc trưng không giám sát, chúng tôi đánh giá các đặc trưng học được bằng cách sử dụng chúng để huấn luyện mô hình phân lớp "Softmax Regression" và đo độ lỗi phân lớp. Một cách cụ thể, cho tập huấn luyện $\{(x^{(1)}, y^{(1)}), \ldots, (x^{(N)}, y^{(N)})\}$ với $x^{(i)} \in \mathbb{R}^{D_x}$ là véc-tơ điểm ảnh và $y^{(i)} \in \{0, \ldots, 9\}$ là nhãn lớp. Sau khi "Auto-Encoder" đã được huấn luyện trên tập không có nhãn $\{x^{(1)}, \ldots, x^{(N)}\}$, ta lần lượt đưa từng véc-tơ $x^{(i)}$ vào "Auto-Encoder" và thu được ở tầng ẩn véc-tơ đặc trưng tương ứng $h^{(i)}$; bằng cách này, ta có được tập huấn luyện mới $\{(h^{(1)}, y^{(1)}), \ldots, (h^{(N)}, y^{(N)})\}$. Kế đến, tập huấn luyện mới này được sử dụng để huấn luyện "Softmax Regression". Để dự đoán nhãn lớp cho một véc-tơ đầu vào mới x_{test}, đầu tiên ta sử dụng "Auto-Encoder" đã được huấn luyện để tính véc-tơ đặc trưng tương ứng h_{test}; sau đó đưa h_{test} này vào "Softmax Regression" đã được huấn luyện để tính giá trị nhãn lớp dự đoán.

Trong cả hai giai đoạn học không giám sát và có giám sát, chúng tôi sử dụng

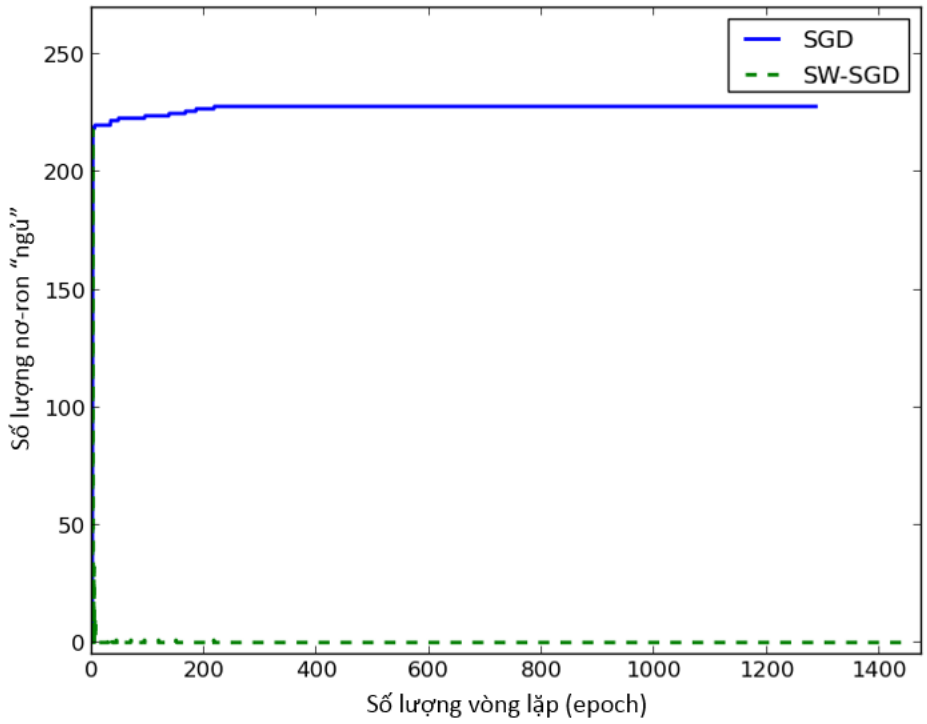
thuật toán để để cực tiểu hóa hàm chi phí là Stochastic Gradient Descent (SGD) với kích thước của "mini-batch" là 100 mẫu huấn luyện. Chiến lược "dừng sớm" (early stopping) được sử dụng để quyết định số vòng lặp (epoch) của SGD cũng như là để chống vấn đề quá khớp (trong giai đoạn học không giám sát, chúng tôi dừng quá trình tối ưu hóa dựa vào giá trị của hàm chi phí trên tập "validation"; còn trong giai đoạn học có giám sát, chúng tôi dựa vào độ lỗi phân lớp trên tập "validation"). Trong tất cả các thí nghiệm dưới đây, chúng tôi dùng SRAEs với 1000 nơ-ron ẩn, tham số "thỏa hiệp" giữa độ lỗi tái tạo và độ thưa λ bằng 0.25, hệ số học khi học không giám sát bằng 0.05, và hệ số học khi học có giám sát bằng 1 (số lượng nơ-ron ẩn được chọn theo [12], các siêu tham số còn lại được chọn dựa vào thực nghiệm).

SGD và SW-SGD

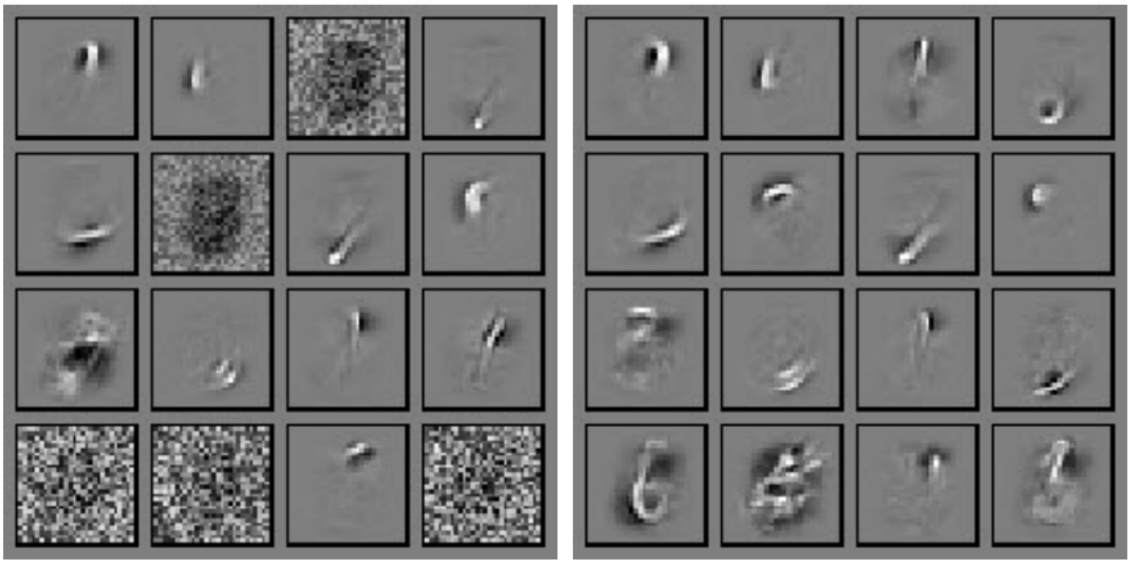
Để thấy được vấn đề gặp phải khi huấn luyện SRAEs với ràng buộc thưa bằng chuẩn L1 cũng như là tác dụng của chiến lược "ngủ - đánh thức" của chúng tôi, trong phần này chúng tôi so sánh việc huấn luyện SRAEs bằng thuật toán "Stochastic Gradient Descent" (SGD) và phiên bản điều chỉnh của chúng tôi, "Sleep-Wake Stochastic Gradient Descent" (SW-SGD). Trong thí nghiệm này, cách ràng buộc trọng số đề xuất của chúng tôi được sử dụng ($W^{(d)} = (W^{(e)})^T$, và các dòng của $W^{(e)}$ và các cột của $W^{(d)}$ được chuẩn hóa).

Hình 4.2 thể hiện số lượng nơ-ron "ngủ" của SRAEs trong khi thực hiện quá trình tối ưu hóa hàm chi phí với SGD và SW-SGD. Vấn đề gặp phải khi huấn luyện SRAEs với chuẩn L1 là trong quá trình tối ưu hóa, chuẩn L1 có thể đẩy các véc-tơ trọng số đi vào các nơ-ron ẩn vào trạng thái "ngủ" (nghĩa là, nơ-ron ẩn tương ứng luôn cho giá trị đầu ra bằng 0 với tất cả các mẫu huấn luyện) và sau đó, chúng sẽ không bao giờ còn được cập nhật nữa. Như có thể thấy từ hình 4.2, khi sử dụng SGD, số lượng nơ-ron "ngủ" tăng dần trong quá trình tối ưu hóa, đặc biệt là trong những vòng lặp đầu tiên, khi mà quá trình tối ưu hóa vẫn còn chưa ổn định. Vấn đề nơ-ron "ngủ" này của chuẩn L1 có thể được khắc phục một cách đơn giản bằng chiến lược "ngủ - đánh thức" của chúng tôi; quá trình tối ưu hóa của SW-SGD kết thúc mà không có nơ-ron "ngủ" nào cả.

Ở hình 4.3 là một số bộ lọc (một bộ lọc tương ứng với véc-tơ trọng số đi vào một



Hình 4.2: Số lượng nơ-ron "ngủ" của SRAEs trong khi thực hiện quá trình tối ưu hóa với SGD và với SW-SGD. Quá trình tối ưu hóa của SGD kết thúc với 228 nơ-ron "ngủ" trong tổng số 1000 nơ-ron; trong khi đó, SW-SGD kết thúc mà không có nơ-ron nào "ngủ". (Hai quá trình tối ưu hóa của SGD và SW-SGD kết thúc sau các số lượng vòng lặp khác nhau là do chiến lược "dừng sớm".)



(a) SGD (b) SW-SGD

Hình 4.3: Ở hình (a) là một số bộ lọc (một bộ lọc tương ứng với véc-tơ trọng số đi vào một nơ-ron ẩn) học được bởi SGD; ta có thể thấy có 5 bộ lọc nhìn vô nghĩa tương ứng với 5 nơ-ron "ngủ". Còn ở hình (b) là các bộ lọc học được bởi SW-SGD; tất cả các bộ lọc đều nhìn có nghĩa, mỗi bộ lọc dò tìm một đường nét nào đó của chữ số.

Bảng 4.1: Giá trị hàm chi phí của SRAEs trên tập huấn luyện và độ lỗi phân lớp (với "Softmax Regression") trên tập kiểm tra khi huấn luyện SRAEs với SGD và với SW-SGD.

	SGD	SW-SGD
Giá trị hàm chi phí của SRAEs trên tập huấn luyện	9.84	**9.48**
Độ lỗi phân lớp trên tập kiểm tra (%)	1.70	**1.62**

nơ-ron ẩn) học được bởi SGD và SW-SGD. Như ta có thể thấy, với SGD, có 5 nơ-ron "ngủ"; các bộ lọc của chúng nhìn vô nghĩa. Với SW-SGD, không có nơ-ron nào "ngủ"; tất cả các bộ lọc đều nhìn có nghĩa, mỗi bộ lọc dò tìm một đường nét nào đó của chữ số.

Nhờ sử dụng hết tất cả các nơ-ron ẩn, SW-SGD tìm được giá trị cực tiểu của hàm chi phí của SRAEs trên tập huấn luyện tốt hơn so với SGD; và các đặc trưng học được của SW-SGD cũng cho kết quả phân lớp (với "Softmax Regression") trên tập kiểm tra tốt hơn so với SGD (bảng 4.1).

Cách ràng buộc trọng số đề xuất của chúng tôi và các cách ràng buộc trọng số khác

Trong thí nghiệm thứ hai này, cách ràng buộc trọng số đề xuất cho SRAEs của chúng tôi được so sánh với các cách ràng buộc trọng số khác mà có thể áp dụng cho SRAEs. Cụ thể ở đây, chúng tôi so sánh với các cách ràng buộc trọng số sau:

- $W^{(d)}$ **được chuẩn hóa:** các véc-tơ cột của $W^{(d)}$ được ràng buộc là chuẩn hóa (có độ dài bằng 1); mỗi véc-tơ cột của $W^{(d)}$ tương ứng với véc-tơ trọng số đi ra ở mỗi nơ-ron ẩn.

- $W^{(e)}$ **và** $W^{(d)}$ **được chuẩn hóa:** các véc-tơ dòng của $W^{(e)}$ và các véc-tơ cột của $W^{(d)}$ được ràng buộc là chuẩn hóa (có độ dài bằng 1); mỗi véc-tơ dòng của $W^{(e)}$ và mỗi véc-tơ cột của $W^{(d)}$ lần lượt tương ứng với véc-tơ trọng số đi vào và véc-tơ trọng số đi ra ở mỗi nơ-ron ẩn.

- $W^{(d)} = (W^{(e)})^T$**:** $W^{(e)}$ và $W^{(d)}$ được ràng buộc là chuyển vị của nhau.

Cách ràng buộc trọng số của chúng tôi là kết hợp của hai ràng buộc: $W^{(e)}$ và $W^{(d)}$ được chuẩn hóa, và $W^{(d)} = (W^{(e)})^T$. Trong thí nghiệm này, chúng tôi dùng SW-SGD để huấn luyện SRAEs.

Như có thể thấy ở bảng 4.2, trong số các cách ràng buộc trọng số, cách ràng buộc của chúng tôi giúp SRAEs học được những đặc trưng cho kết quả phân lớp (với "Softmax Regression") tốt nhất trên tập kiểm tra. Ngoài ra, bảng 4.2 cũng so sánh thời gian huấn luyện SRAEs trên một vòng lặp (ứng với một lần duyệt qua toàn bộ các mẫu huấn luyện) với các cách ràng buộc trọng số khác nhau này (do chiến lược "dừng sớm", quá trình huấn luyện SRAEs với các cách ràng buộc khác nhau có thể kết thúc sau các số lượng vòng lặp khác nhau; do đó, để chính xác, ta nên so sánh theo thời gian huấn luyện xét trên một vòng lặp hơn là tổng thời gian huấn luyện). Các cách ràng buộc trọng số được sắp xếp theo thứ tự thời gian huấn luyện (trên một vòng lặp) tăng dần là: $W^{(d)} = (W^{(e)})^T$ (2 giây), $W^{(d)}$ được chuẩn hóa (3 giây), cách ràng buộc trọng số của chúng tôi (4 giây), $W^{(e)}$ và $W^{(d)}$ được chuẩn hóa (5 giây). Thứ tự này là hợp lý:

- Ràng buộc $W^{(d)} = (W^{(e)})^T$ có thời gian huấn luyện nhanh nhất vì SRAEs không phải thực hiện bước chuẩn hóa.

- Ràng buộc $W^{(d)}$ được chuẩn hóa có thời gian huấn luyện lâu hơn vì bộ giải mã của SRAEs phải thực hiện bước chuẩn hóa khi lan truyền tiến; và do đó, khi lan truyền ngược, việc tính toán các đạo hàm riêng theo các tham số của bộ giải mã cũng sẽ tốn thời gian hơn bình thường.

- Ở cách ràng buộc trọng số của chúng tôi, khi lan truyền tiến, mặc dù cần phải thực hiện bước chuẩn hóa ở cả bộ mã hóa và bộ giải mã, nhưng nhờ vào ràng buộc $W^{(d)} = (W^{(e)})^T$, ta chỉ cần phải thực hiện bước chuẩn hóa cho bộ trọng số của bộ mã hóa, rồi sau đó dùng lại bộ trọng số đã được chuẩn hóa này cho bộ giải mã. Thời gian huấn luyện của cách ràng buộc này lâu hơn cách ràng buộc $W^{(d)}$ được chuẩn hóa ở trên vì khi lan truyền ngược, ngoài việc tính toán các đạo hàm riêng theo các tham số của bộ giải mã đã được chuẩn hóa, ta cũng cần phải tính toán các đạo hàm riêng theo các tham số của bộ mã hóa đã được chuẩn hóa (khi bộ mã hóa hay bộ giải mã phải thực hiện bước chuẩn hóa khi lan truyền tiến thì việc tính toán các đạo hàm riêng theo các tham số của chúng khi lan truyền ngược sẽ lâu hơn so với khi không thực hiện bước chuẩn hóa).

- Ràng buộc $W^{(e)}$ và $W^{(d)}$ được chuẩn hóa có thời gian huấn luyện lâu nhất vì khi lan truyền tiến, ta phải thực hiện bước chuẩn hóa riêng cho bộ mã hóa và bộ giải mã; và khi lan truyền ngược, ta phải tính toán các đạo hàm riêng theo các tham số của bộ giải mã và bộ mã hóa đã được chuẩn hóa.

Mặc dù thời gian huấn luyện (trên một vòng lặp) của cách ràng buộc trọng số của chúng tôi là khá cao khi so sánh với cách ràng buộc trọng số khác, nhưng nhìn chung nó vẫn nhanh (nhờ vào việc sử dụng GPU để tính toán song song). Tổng thời gian huấn luyện là khoảng 2.5 giờ.

Bảng 4.2: So sánh giữa cách ràng buộc trọng số cho SRAEs của chúng tôi với các cách ràng buộc trọng số khác mà có thể áp dụng cho SRAEs. Cách ràng buộc trọng số của chúng tôi giúp SRAEs học được những đặc trưng mà cho kết quả phân lớp (với "Softmax Regression") tốt nhất trên tập kiểm tra. Ngoài ra, thời gian huấn luyện trên một vòng lặp của SRAEs với các cách ràng buộc trọng số khác nhau cũng được trình bày ở cột cuối cùng của bảng.

Cách ràng buộc trọng số	**Độ lỗi phân lớp trên tập kiểm tra (%)**	**Thời gian huấn luyện của một vòng lặp (giây)**
$W^{(d)}$ được chuẩn hóa	3.28	3
$W^{(e)}$ & $W^{(d)}$ được chuẩn hóa	2.51	5
$W^{(d)} = (W^{(e)})^T$	2.04	2
Cách ràng buộc của chúng tôi	**1.62**	4

SRAEs và các loại "Auto-Encoders" khác

Cuối cùng, chúng tôi cũng so sánh SRAEs (sử dụng cách ràng buộc trọng số của chúng tôi và dùng SW-SGD để huấn luyện) với các loại "Auto-Encoders" khác, bao gồm:

- **"Denoising Auto-Encoders" (DAEs)** [14]: DAEs muốn học được các đặc trưng "bền vững" bằng cách làm nhiễu véc-tơ đầu vào rồi sau đó cố gắng tái tạo lại véc-tơ đầu vào ban đầu từ véc-tơ đã bị làm nhiễu này (véc-tơ đầu vào đã bị làm nhiễu $\rightarrow$ véc-tơ đặc trưng $\rightarrow$ cố gắng tái tạo lại véc-tơ đầu vào không bị nhiễu).

- **"Contractive Auto-Encoders" (CAEs)** [13]: DAEs muốn học được các đặc trưng thỏa hai tính chất: (i) có thể tái tạo tốt véc-tơ đầu vào ban đầu, và (ii) bất biến đối với sự thay đổi nhỏ của véc-tơ đầu vào (bằng cách phạt chuẩn Frobenius của ma trận Jacobian của véc-tơ đặc trưng đối với véc-tơ đầu vào).

- **"Higher Order Contractive Auto-Encoders" (HCAEs)** [12]: HCAEs là mở rộng của CAEs; bên cạnh độ lỗi tái tạo và chuẩn Frobenius của ma trận Jacobian, HCAEs còn phạt thêm chuẩn Frobenius của ma trận Hessian.

Bảng 4.3 so sánh các đặc trưng học được (theo độ lỗi phân lớp trên tập kiểm tra) của SRAEs với các loại "Auto-Encoders" trên. Với DAEs, CAEs, HCAEs, [12] dùng 1000 nơ-ron ẩn, hàm kích hoạt sigmoid ở cả tầng ẩn và tầng đầu ra, độ lỗi tái tạo

Bảng 4.3: So sánh giữa SRAEs (sử dụng cách ràng buộc trọng số của chúng tôi và dùng SW-SGD để huấn luyện) với các loại "Auto-Encoders" khác, bao gồm: "Denoising Auto-Encoders" (DAEs), "Contractive Auto-Encoders" (CAEs), "Higher Order Contractive Auto-Encoders" (HCAEs).

Thuật toán học đặc trưng	**Độ lỗi phân lớp trên tập kiểm tra (%)**
DAEs [12]	2.05
CAEs [12]	1.82
SRAEs	1.62
HCAEs [12]	**1.20**

"cross-entropy", và ràng buộc $W^{(e)}$ và $W^{(d)}$ là chuyển vị của nhau. Như có thể thấy, các đặc trưng học được bởi SRAEs cho kết quả phân lớp (với "Softmax Regression") trên tập kiểm tra tốt hơn DAEs và CAEs, nhưng không tốt bằng HCAEs. Tuy nhiên, để ý là HCAEs phức tạp hơn nhiều so với SRAEs của chúng tôi với rất nhiều siêu tham số cần phải lựa chọn.

Chương 5

Kết Luận và Hướng Phát Triển

Kết luận

Trong luận văn này, chúng tôi nghiên cứu về bài toán học đặc trưng không giám sát bằng "Sparse Auto-Encoders" (SAEs). SAEs có thể học được những đặc trưng tương tự như "Sparse Coding", nhưng điểm lợi là quá trình huấn luyện SAEs có thể được thực hiện một cách hiệu quả thông qua thuật toán lan truyền ngược, và với một véc-tơ đầu vào mới, SAEs có thể tính được véc-tơ đặc trưng tương ứng rất nhanh. Tuy nhiên, trong thực tế, không dễ để có thể làm SAEs "hoạt động"; có hai điểm ta cần phải làm rõ: (i) ràng buộc thưa, và (ii) ràng buộc trọng số. Đóng góp của luận văn là làm rõ SAEs ở hai điểm này. Cụ thể như sau:

- Về ràng buộc thưa, mặc dù chuẩn L1 là cách tự nhiên (vì L1 được dùng trong Sparse Coding) và đơn giản để ràng buộc tính thưa của véc-tơ đặc trưng, nhưng L1 lại thường không được dùng trong SAEs với lý do vẫn còn chưa rõ ràng. Thay vì dùng L1, các bài báo về SAEs thường ràng buộc thưa bằng cách ép giá trị đầu ra trung bình của mỗi nơ-ron ẩn về một giá trị cố định gần 0. Nhưng giá trị cố định này lại thêm một siêu tham số vào danh sách các siêu tham số vốn đã có rất nhiều của SAEs; điều này sẽ làm cho quá trình chọn lựa các siêu tham số trở nên "phiền phức" hơn và tốn thời gian hơn. *Trong luận văn, chúng tôi cố gắng hiểu khó khăn gặp phải khi huấn luyện SAEs với chuẩn L1; từ đó, đề xuất một phiên bản hiệu chỉnh của thuật toán "Stochastic Gradient Descent" (SGD), gọi là "Sleep-Wake Stochastic Gradient Descent" (SW-SGD), để khắc phục khó khăn gặp phải này. Ở đây, chúng tôi tập trung nghiên cứu SAEs với*

hàm kích hoạt "rectified linear" ở tầng ẩn vì hàm này tính nhanh và có thể cho tính thưa thật sự (đúng bằng 0); chúng tôi gọi SAEs với hàm kích hoạt này là "Sparse Rectified Auto-Encoders" (SRAEs).

- Về ràng buộc trọng số, có một số cách đã được đề xuất để ràng buộc trọng số của SAEs, nhưng không rõ là tại sao ta lại nên ràng buộc trọng số như vậy. Liệu có cách ràng buộc trọng số nào tốt hơn? *Trong luận văn, chúng tôi đề xuất một cách ràng buộc trọng số mới và hợp lý cho SRAEs.*

Các kết quả thí nghiệm trên bộ dữ liệu MNIST (bộ ảnh chữ số viết tay từ 0 đến 9) cho thấy:

- Khi huấn luyện SRAEs với chuẩn L1 sẽ gặp phải vấn đề nơ-ron "ngủ" và chiến lược "ngủ - đánh thức" đề xuất của chúng tôi trong thuật toán SW-SGD có thể giúp khắc phục vấn đề này.

- Cách ràng buộc trọng số đề xuất của chúng tôi giúp SRAEs học được những đặc trưng cho kết quả phân lớp tốt nhất so với các cách ràng buộc trọng số khác mà có thể áp dụng cho SRAEs.

- SRAEs với SW-SGD và cách ràng buộc trọng số của chúng tôi có thể học được những đặc trưng cho kết quả phân lớp tốt so với các loại "Auto-Encoders" khác.

Hướng phát triển

Thật ra, luận văn mới chỉ giải quyết được một phần nhỏ và mang tính kỹ thuật (làm cho SAEs hoạt động) của bài toán học đặc trưng không giám sát. Câu hỏi lớn và mang tính định hướng dài hạn là: *Thế nào là một biểu diễn đặc trưng tốt?* Theo GS. Yoshua Bengio, một trong những nhà nghiên cứu tiên phong trong lĩnh vực học biểu diễn đặc trưng, thì: *Một biểu diễn đặc trưng tốt cần* ***phân tách (disentangle)*** *được các yếu tố giải thích ẩn bên dưới*. Để phân tách được các yếu tố giải thích ẩn, ta cần có sự hiểu biết trước (prior) về các yếu tố ẩn. Ở đây, ta quan tâm đến các sự hiểu biết trước mang tính tổng quát, có thể áp dụng để học đặc trưng trong nhiều bài toán liên quan đến trí tuệ nhân tạo (thị giác máy tính, xử lý ngôn ngữ tự nhiên, ...). Định hướng phát triển

của luận văn là tích hợp thêm các hiểu biết trước khác vào SAEs nhằm phân tách tốt hơn các yếu tố giải thích ẩn. Dưới đây là một số hiểu biết trước mà có thể tích hợp vào SAEs:

- **Học sâu**: thế giới xung quanh ta có thể được mô tả bằng một kiến trúc phân cấp; cụ thể là, các yếu tố hay các khái niệm (concept) trừu tượng (ví dụ như con mèo, cái cây, ...) bao gồm các khái niệm ít trừu tượng hơn; các khái niệm ít trừu tượng hơn này lại bao gồm các khái niệm ít trừu tượng hơn nữa ... Do đó, ta muốn học nhiều tầng biểu diễn đặc trưng với độ trừu tượng tăng dần. Mặc dù, SRAEs có thể được dùng để học từng tầng đặc trưng một, nhưng mục tiêu mà chúng tôi hướng đến là: học *đồng thời* nhiều tầng biểu diễn đặc trưng một cách không giám sát.

- **Gom cụm tự nhiên**: các mẫu thuộc các lớp khác nhau nằm trên các đa tạp (manifold) khác nhau và các đa tạp này được phân tách tốt với nhau bởi các vùng có mật độ thấp; hơn nữa, số chiều của các đa tạp này nhỏ hơn rất nhiều so với số chiều của không gian ban đầu. Ta thấy rằng sự gom cụm tự nhiên này sẽ dẫn đến tính thưa. Cụ thể là, các đa tạp khác nhau (ứng với các lớp khác nhau) sẽ được mô tả bởi các hệ trục tọa độ khác nhau. Với một véc-tơ đầu vào x thì chỉ có hệ trục tọa độ của đa tạp ứng với lớp mà x thuộc về được kích hoạt. Nếu ta hiểu véc-tơ đặc trưng h của x chứa các hệ số của các hệ trục tọa độ này thì h sẽ thưa bởi vì chỉ có các hệ số của hệ trục tọa độ được kích hoạt là có giá trị khác 0. Do đó, thay vì ràng buộc tính thưa một cách đơn thuần bằng chuẩn L1, ta có thể tìm cách để ràng buộc tính thưa từ góc nhìn gom cụm tự nhiên nói trên.

Phụ Lục: Các Công Trình Đã Công Bố

Hội nghị quốc tế:

- **K. Tran** and B. Le, "Demystifying Sparse Rectified Auto-Encoders," in *Proceedings of the Fourth Symposium on Information and Communication Technology*, ser. SoICT'13. New York, NY, USA: ACM, 2013, pp. 101–107. [Online]. Available: http://doi.acm.org/10.1145/2542050.2542065

PROCEEDINGS OF

THE FOURTH SYMPOSIUM ON INFORMATION AND COMMUNICATION TECHNOLOGY

SoICT 2013

Da Nang, Vietnam
December 5-6, 2013

ISBN: 978-1-4503-2454-0

Symposium on Information and Communication Technology 2013

SoICT 2013

Table of Contents

Demystifying Sparse Rectified Auto-Encoders

Kien Tran
Department of Computer Science
Faculty of Information Technology
Vietnam University of Science - HCM
ttkien@fit.hcmus.edu.vn

Bac Le
Department of Computer Science
Faculty of Information Technology
Vietnam University of Science - HCM
lhbac@fit.hcmus.edu.vn

ABSTRACT

Sparse Auto-Encoders can learn features similar to Sparse Coding, but the training can be done efficiently via the back-propagation algorithm as well as the features can be computed quickly for a new input. However, in practice, it is not easy to get Sparse Auto-Encoders working; there are two things that need investigating: sparsity constraint and weight constraint. In this paper, we try to understand the problem of training Sparse Auto-Encoders with L1-norm sparsity penalty, and propose a modified version of Stochastic Gradient Descent algorithm, called Sleep-Wake Stochastic Gradient Descent (SW-SGD), to solve this problem. Here, we focus on Sparse Auto-Encoders with rectified linear units in the hidden layer, called Sparse Rectified Auto-Encoders (SRAEs), because such units compute fast and can produce true sparsity (exact zeros). In addition, we propose a new reasonable way to constrain SRAEs' weights. Experiments on MNIST dataset show that the proposed weight constraint and SW-SGD help SRAEs successfully learn meaningful features that give excellent performance on classification task compared to other Auto-Encoder variants.

Categories and Subject Descriptors

I.2.6 [**Artificial Intelligence**]: Learning—*connectionism and neural nets, concept learning, parameter learning*; I.2.10 [**Artificial Intelligence**]: Vision and Scene Understanding—*representation, data structures, and transforms*; I.4.7 [**Image Processing and Computer Vision**]: Feature Measurement—*feature representation*

General Terms

Algorithms, Design, Experimentation

Keywords

unsupervised feature learning, deep learning, sparse coding, sparse auto-encoders, rectified linear units

SoICT'13, December 05 - 06 2013, Danang, Viet Nam

http://dx.doi.org/10.1145/2542050.2542065.

1. INTRODUCTION

Recently, unsupervised feature learning and deep learning have attracted a lot of interest from various fields such as computer vision, audio processing, text processing, and so on. The idea is that instead of designing features manually, one lets the learning algorithms automatically learn features from unlabeled data; and deep learning means learning multiple levels of features with increasing abstraction. Auto-Encoders (AEs) and Restricted Boltzmann Machines (RBMs) are two main groups of algorithms that have been used in unsupervised feature learning and deep learning [1]. AEs belong to the non-probabilistic group while RBMs belong to the probabilistic group. One big disadvantage of RBMs compared to AEs is that the objective function of RBMs is intractable. For this reason, here we will focus on the study of AEs.

Several criteria have been proposed to guide AEs to learn useful representation. They include: sparsity criterion [6], denoising criterion [14], and contraction criterion [13, 12]. Among them, sparsity is an interesting and promising one (here sparsity means forcing the majority of elements of the feature vector to be zeros). The first reason is that it has the inspiration from biology. In the brain, there is a very small fraction of neurons active simultaneously. Sparsity was first introduced in Sparse Coding and interestingly, it helped learn features similar to the primary visual cortex [11]. AEs with sparsity criterion, called Sparse Auto-Encoders (SAEs), can learn features much like Sparse Coding, but unlike Sparse Coding, the training can be done efficiently via the back-propagation algorithm, and with a new input, the features can be computed quickly. Secondly, sparsity can help learn high-level features - concepts. The intuitive justification is that there are only a few concepts per example; therefore, sparsity can help learn a dictionary of concepts and each example will be explained just by a small number of concepts. Thirdly, sparsity can potentially help speed up the training of SAEs. With each example, in the forward propagation phase, there is only a small fraction of neurons active; and hence, in the backward propagation phase, there is only a small fraction of parameters (corresponding to active neurons) updated. This point can be made use of to speed up the training process. It is important because if the training is fast, the model can be scaled up (i.e. increase the number of features); in unsupervised feature learning and deep learning, large-scale is a key factor to get good performance [4, 7].

Despite above advantages, it is not easy to get SAEs working in practice. To make SAEs work, there are two things

that need investigating: sparsity constraint and weight constraint. Although L1-norm is a natural (because it is used in Sparse Coding) and simple (in case the feature vector has positive values, it is just simply sum of them) way to constrain sparsity, it is not often used in SAEs for reasons that remain to be understood [1]. Instead of L1-norm, people often constrain sparsity in SAEs by pushing the average output of a hidden neuron (e.g. over a minibatch) to a fixed target (close to zero) [6, 4, 3]. But this fixed target adds one more hyper-parameter to the list of SAEs' hyper-parameters which already has many ones. As a result, the process of tuning hyper-parameters will become more tedious and more time-consuming. Regarding weight constraint, many different ways were used in the literature. [3, 14, 13, 12] tied the weights of encoder and decoder together. [6, 4] used weight decay; this way even adds one more hyper-parameter. [15] constrained the weights of decoder to have unit norm. However, it is not clear which way should be used as well as why weights should be constrained like those.

Two questions remain to be answered: (i) why is L1-norm sparsity penalty not often used in SAEs?; (ii) is there a better and more reasonable way to constrain SAEs' weights? In this paper, we try to understand the problem of training SAEs with L1-norm sparsity penalty. Then, we propose a modified version of Stochastic Gradient Descent algorithm (SGD), called Sleep-Wake Stochastic Gradient Descent (SW-SGD), to remedy this problem. Here we focus on SAEs with rectified linear units (ReLUs) in the hidden layer because such units compute fast and can produce true sparsity (exact zeros) [10, 5, 15]. We call these Sparse Rectified Auto-Encoders (SRAEs). Furthermore, we propose a new reasonable way to constrain SRAEs' weights. With these two ingredients, our proposed weight constraint and SW-SGD, our experiments show that SRAEs can successfully learn meaningful features that give excellent classification performance on MNIST dataset compared to other Auto-Encoder variants.

The rest of the paper is organized as follows. We start by reviewing Sparse Coding and Sparse Auto-Encoders (SAEs) to see advantages of SAEs compared to Sparse Coding. Then, Section 3 presents Sparse Rectified Auto-Encoders (SRAEs): Subsection 3.1 explains the problem of training SRAEs with L1-norm sparsity penalty and describes our remedy for this problem; Subsection 3.2 presents our proposed weight constraint for SRAEs. Experiment and analysis are shown in Section 4 followed by the conclusion in Section 5.

2. REVIEW OF SPARSE CODING AND SPARSE AUTO-ENCODERS

2.1 Sparse Coding

Sparse Coding was first introduced in neuroscience to model the primary visual cortex [11]. The goal is to find an over-complete set of basic vectors so that each input can be explained just by a small number of basis vectors (i.e. the feature vector is sparse). Specifically, given the unlabeled data $\{x^{(1)}, \dots, x^{(N)}\}$ with $x^{(n)} \in \mathbb{R}^D$, Sparse Coding solves the following optimization problem:

$$\begin{aligned} \underset{\phi,a}{\text{minimize}} \quad & \sum_{n=1}^{N} \left(\|x^{(n)} - \sum_{k=1}^{K} a_k^{(n)} \phi^{(k)}\|_2^2 + \lambda \|a^{(n)}\|_1 \right) \\ \text{subject to} \quad & \|\phi^{(k)}\|_2^2 = 1, \forall k = 1, \dots, K \end{aligned} \quad (1)$$

Here, the optimization variables are *the basis vectors* $\phi = \{\phi^{(1)}, \dots, \phi^{(K)}\}$ with each $\phi^{(k)} \in \mathbb{R}^D$, and *the coefficient vectors* (the feature vectors) $a = \{a^{(1)}, \dots, a^{(N)}\}$ with each $a^{(n)} \in \mathbb{R}^K$; $a_k^{(n)}$ is the coefficient of basic $\phi^{(k)}$ for input $x^{(n)}$. With this optimization problem, we want to learn a representation having the following properties:

- Preserving information about the input (by minimizing the reconstruction error).
- Being sparse (by minimizing the L1-norm of the feature vector).

λ is the hyper-parameter controlling the trade-off between reconstruction error and sparsity penalty.

The problem (1) can be solved by iteratively optimizing over a and ϕ alternately while holding the other set of variables fixed [9]. However, this process often takes a long time to converge. Furthermore, after training, to find the feature vector for a new input, we still have to do optimization (with fixed ϕ).

2.2 Sparse Auto-Encoders

An Auto-Encoder (AE) is a feed-forward neural network with two layers. The first layer, called *encoder*, maps the input x to the hidden representation a: $a = f\left(W^{(e)}x + b^{(e)}\right)$ where $f(\cdot)$ is some activation function (e.g. sigmoid), $W^{(e)}$ and $b^{(e)}$ are parameters of the encoder. The second layer, called *decoder*, then tries to reconstruct the input from the hidden representation a: $\hat{x} = W^{(d)}a + b^{(d)}$ where $\hat{x}$ is the reconstructed input, $W^{(d)}$ and $b^{(d)}$ are parameters of the decoder. In this way, we hope that the hidden representation can capture the structure of the input.

In Sparse Auto-Encoders (SAEs), besides reconstruction error, we also constrain the representation to be sparse (i.e. with a input, there are only a few hidden neurons active). Specifically, given the unlabeled data $\{x^{(1)}, \dots, x^{(N)}\}$ with $x^{(n)} \in \mathbb{R}^D$, SAEs minimize the following objective function:

$$J(W^{(e)}, b^{(e)}, W^{(d)}, b^{(d)}) = \sum_{n=1}^{N} \|x^{(n)} - \hat{x}^{(n)}\|_2^2 + \lambda s(a^{(n)}) \quad (2)$$

where: $a^{(n)} = f\left(W^{(e)}x^{(n)} + b^{(e)}\right)$; $\hat{x}^{(n)} = W^{(d)}a^{(n)} + b^{(d)}$; $s(\cdot)$ is some function that encourages the feature vector $a^{(n)}$ to be sparse; and λ is the hyper-parameter controlling the trade-off between reconstruction error and sparsity penalty.

Similar to Sparse Coding, SAEs aim at learning a representation that both preserves information about the input and is sparse. The difference between them is that SAEs have an explicit parametric encoder, while Sparse Coding has an implicit non-parametric encoder. This point helps training SAEs be more efficient than Sparse Coding; it can be done via the back-propagation algorithm. In addition, with a new input, SAEs can compute the corresponding feature vector very quickly just by one step.

3. SPARSE RECTIFIED AUTO-ENCODERS

The typical activation functions have been used in neural networks are the sigmoid function and the tanh function. Recently, a new activation function which have been found to work very well is the rectified linear function [10, 5, 15]:

$f(x) = \max(0, x)$. Units with such activation function are called rectified linear units (ReLUs).

ReLUs fit well with SAEs because such units naturally produce a sparse feature vector. Unlike logistic units that give small positive values when the input is not aligned with the filters (the incoming weight vectors of hidden units), ReLUs often give exact zeros. Furthermore, ReLUs compute faster than logistic or tanh units because they do not involve exponentiation and division; they just have to compute the max operation. Finally, ReLUs can potentially help jointly train multi-layers of features (instead of training layer by layer in greedy fashion) because ReLUs have been used to train supervised deep networks successfully [5, 15]. Therefore, here we will focus on SAEs with ReLUs (in the hidden layer). We call them Sparse Rectified Auto-Encoders (SRAEs).

3.1 Sparsity Constraint in SRAEs

The typical way that have been used to constrain sparsity in Sparse Auto-Encoders (SAEs) is pushing the average output $\bar{a}_j$ of hidden neuron j (over a minibatch) to some fixed target ρ (a value close to zero) [6, 4, 3]. In case the hidden neuron's output $\in [0, 1]$ (e.g. sigmoid unit), this can be done through the Kullback-Leibler (KL) divergence: $\sum_j \mathrm{KL}(\rho \| \bar{a}_j) = \sum_j \rho \log \frac{\rho}{\bar{a}_j} + (1-\rho) \log \frac{(1-\rho)}{(1-\bar{a}_j)}$. In case using ReLUs, the squared error can be used: $\sum_j (\bar{a}_j - \rho)^2$. Note that this way does not directly encourage the feature vector (corresponding to a example) to be sparse, but encourage the values of a feature (the outputs of a hidden neuron) over examples to be sparse. It, however, indirectly leads to a sparse feature vector because the reconstruction error tends to make learned features differ from each other; therefore, with an example, if some feature is active (having a non-zero value), the majority of the rest will be inactive (having a zero value).

This way, however, adds one more hyper-parameter (the fixed target ρ) to the list of SAEs' hyper-parameters which already has many ones (the trade-off parameter λ, the number of features, learning rate, minibatch size, and so on). As a result, the process of tuning hyper-parameters will become more annoying and more time-consuming. Why do not use L1-norm? It is natural because L1-norm is used in Sparse Coding. In addition, it doesn't have any extra hyper-parameter. It is also very simple; in case using ReLUs, it is just the sum of elements of the feature vector a. In the following section, we will explain the problem of training SAEs, in particular SRAEs, with L1-norm.

3.1.1 The Difficulty of Training SRAEs with L1-norm

The problem of training SAEs with L1-norm is that during the optimization process, L1-norm can drive the incoming weight vector of a hidden neurons to the state in which the hidden neuron is always inactive (produce zero with all examples in the dataset). And once the incoming weight vector has been in such a state, it will be stuck there forever and never get updated; the outgoing weight vector of this hidden neuron will also never get updated. Formally, let's consider a hidden neuron j which have a weight $W^{(e)}_{ji}$ connecting to an input neuron i and a weight $W^{(d)}_{kj}$ connecting to an output neuron k. The gradients of the objective function J in equation (2) (with the sparsity function $s(\cdot) = \|\cdot\|_1$) with respect to $W^{(e)}_{ji}$ and $W^{(d)}_{kj}$ are:

$$\frac{\partial J}{\partial W^{(d)}_{kj}} = \sum_{n=1}^{N} 2(\hat{x}^{(n)}_k - x^{(n)}_k) a^{(n)}_j \tag{3}$$

$$\frac{\partial J}{\partial W^{(e)}_{ji}} = \sum_{n=1}^{N} (\epsilon^{(n)}_j + \lambda) f'(a^{(n)}_j) x^{(n)}_i \tag{4}$$

where:

- $x^{(n)}_k$ and $\hat{x}^{(n)}_k$ are respectively the k^{th} element of the input vector $x^{(n)}$ and the reconstructed input vector $\hat{x}^{(n)}$.
- $a^{(n)}_j$ is the j^{th} element of the feature vector $a^{(n)}$.
- $\epsilon^{(n)}_j$ is the "error" that the hidden neuron j receives from the output layer (corresponding to the input $x^{(n)}$).

From equations (3) and (4), one can easily see that, during the optimization, if once the hidden neuron j has been in the state having a_j equal zero with all examples, the gradients $\frac{\partial J}{\partial W^{(d)}_{kj}}$ and $\frac{\partial J}{\partial W^{(e)}_{ji}}$ will be zeros with all examples (in case $f(\cdot)$ is the rectified linear function, the derivative $f'(0)$ equals 0) and the weights of this neuron will never get updated anymore. We call such neurons *"sleep" neurons*. Especially, the "easy to get exact zeros" property of ReLUs can make this problem easier to happen during the optimization.

The above problem may explain why people often don't use L1-norm in SAEs but instead, push the average output of a hidden neuron to a fixed target close to zero (but not zero!); this way may prevent the hidden neuron from the situation in which it is inactive for all examples and then never get updated. With sigmoid units, the KL divergence can be used and the average output cannot be zero because if so, the KL divergence will give an infinite penalty. With ReLUs, the KL divergence cannot be used because the outputs of ReLUs are not in $[0, 1]$. The squared error can be used instead but we found experimentally that the "sleep" neuron problem still happens. It is because with a zero average output, unlike the KL divergence, the squared error still gives a very small penalty. See Figure 1 for a comparison of them with the fixed target ρ of 0.1.

Although using L1-norm, Sparse Coding clearly doesn't have this problem because the encoder of Sparse Coding is implicit.

3.1.2 Sleep-Wake Stochastic Gradient Descent

To remedy the problem of training SRAEs with L1-norm, we propose a modified version of Stochastic Gradient Descent algorithm (SGD), called Sleep-Wake Stochastic Gradient Descent (SW-SGD). The idea is that during each epoch of SGD, we track the average outputs of hidden neurons. Then, after each epoch, we check if there are any "sleep" neurons (having the average output equal zero), and we will "wake-up" them by simply re-initializing their incoming weight vectors (including the biases). Despite its simplicity, our experiments showed that this strategy can help SRAEs successfully learn meaningful features without any "sleep" features.

3.2 Weight Constraint in SRAEs

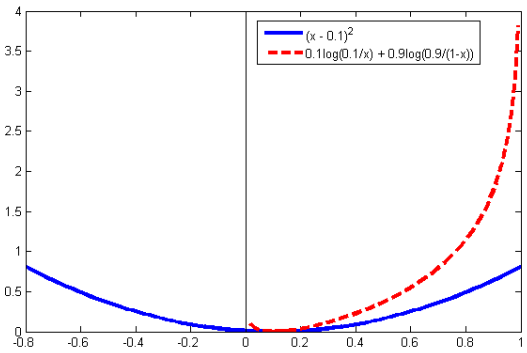


Figure 1: Comparison of KL divergence to squared error with the fixed target ρ of 0.1. When the average output of a hidden neuron is zero, KL divergence gives an infinite penalty while squared error still gives a very small penalty.

Besides sparsity constraint, weight constraint is also a key ingredient to get SAEs working. There are several ways have been used to constrain SAEs' weights:

- **Tied weights**: the weights of encoder and decoder are tied together ($W^{(d)} = (W^{(e)})^T$) [3]. This way was also used in other Auto-Encoder variants such as Denoising Auto-Encoders and Contractive Auto-Encoders [14, 13, 12]. Note that all [3, 14, 13, 12] used sigmoid units in the hidden layer. There is a trivial descent direction of SAEs' objective function in which the hidden neuron's output a_j is scaled down (by scaling down the incoming weight vector of this hidden neuron) and the outgoing weight vector of this hidden neuron is scaled up by some large constant; as a result, the sparsity penalty can decrease arbitrary while the reconstruction error is unchanged. Tied weights can help prevent from this trivial direction, but it is not clear what is going on when the encoder's weights and the decoder's weights are tied together, especially in case using sigmoid units.

- $W^{(d)}$ **norm constraint**: [15] constrained the basis vectors of the decoder (the outgoing weight vectors of hidden neurons) to have unit norm. This constraint is similar to Sparse Coding and also helps prevent from the scale problem. But how about the encoder's weights? For example, to be fair between features, the incoming weight vectors of hidden neurons should have the same norm.

- **Weight decay**: weights of the encoder and decoder are kept small by penalizing the sum of squares of them [6, 4]. As two previous ways, this way prevents SAEs from the scale problem too. It can be interpreted as a "soft" way to constrain the norms of the incoming weights vector of hidden units to be approximately equal to each other and the norms of the outgoing weight vectors of hidden units to be approximately equal to each other. However, this way introduces one more hyper-parameter; it's annoying.

3.2.1 *Our Proposed Weight Constraint for SRAEs*

In this section, we propose a reasonable way to constrain SRAEs' weights. It also doesn't introduce any extra hyper-parameter. Concretely, our way consists of two constraints:

- First, we tie the encoder's weights and the decoder's weights together: $W^{(d)} = \left(W^{(e)}\right)^T$

- Second, we also constrain the incoming weight vectors as well as the outgoing weight vectors of hidden units to have unit norm.

With an example x, if one just pays attention to non-zero rectified linear units, the whole system is a linear system. Therefore, with two above constraints, the encoder will project linearly the input vector x onto a few normalized basis vectors (in the whole set of normalized basis vectors) corresponding to non-zero hidden units; and then, the decoder will reconstruct the input vector from these basis vectors: $\hat{x} = W^T W x$ where x is a column vector and rows of W corresponds to normalized basis vectors selected by ReLUs (here, we just ignore the biases for simplicity). In other words, with above constraints, SRAEs will learn a set of normalized basis vectors such that different inputs can be explained by different small subsets of basis vectors (by projecting linearly the input onto the subset of basis vectors selected by ReLUs and then reconstructing the input from this subset).

The second constraint, however, cannot be enforced by gradient-based methods. To overcome this problem, we change the forward propagation formula of SRAEs as follows:

$$\hat{x} = (\hat{W}^{(e)})^T \max(0, \hat{W}^{(e)} x + b^{(e)}) + b^{(d)} \qquad (5)$$

where $\hat{W}^{(e)}$ is a row-normalized matrix of $W^{(e)}$ (each row of $W^{(e)}$ corresponds to an unnormalized basis vector). Here, the learned parameters are still $W^{(e)}$, $b^{(e)}$, and $b^{(d)}$. In this way, gradient-based methods can be used as usual.

Finally, the first constraint, tied weights, also helps save about haft of memory compared to untied weights. It will be beneficial when using GPU (for parallel computing).

4. EXPERIMENTS

4.1 Setup

We experimented on the MNIST dataset which composes of grayscale images (28×28 pixels) of 10 hand-written digits (from 0 to 9) [8]. Figure 2 shows some examples of this dataset. The images were preprocessed by scaling to $[0, 1]$. We used the usual split: $50,000$ examples for training, $10,000$ examples for validation, and $10,000$ examples for test.

We conducted all experiments using the Python Theano library [2], which allows for quick development and easy use of GPU (for parallel computing). We used a single NVIDIA GTX 560 GPU.

After the unsupervised feature learning phase, we evaluated the learned features by feeding them to a softmax regression and measuring the classification error. Concretely, given the training set $\{(x^{(1)}, y^{(1)}), \ldots, (x^{(N)}, y^{(N)})\}$ where $x^{(i)} \in \mathbb{R}^D$ is the image vector and $y^{(i)} \in \{0, \ldots, 9\}$ is the class label, we fed $x^{(i)}$ to the trained Auto-Encoder (the Auto-Encoder was trained on the unlabeled data $\{x^{(1)}, \ldots, x^{(N)}\}$)

Figure 2: Some examples of MNIST dataset

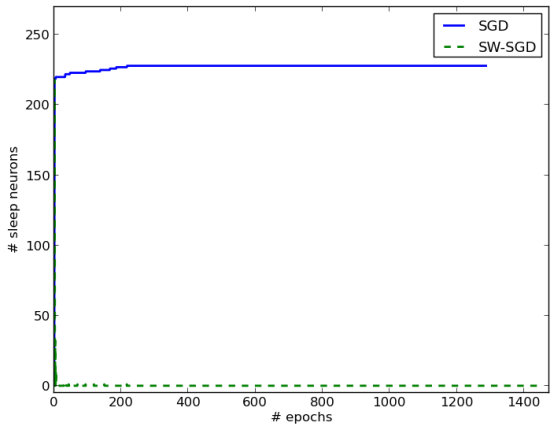


Figure 3: The number of "sleep" hidden neurons of SRAEs during the optimization process with SGD and SW-SGD. The optimization of SGD ended up with 228/1000 "sleep" neurons while SW-SGD ended up without any "sleep" neurons. (These two optimizations terminated after different number of epochs because of the early stopping strategy.)

to get the corresponding feature vector $f^{(i)}$; by this way, we got the new training set $\{(f^{(1)}, y^{(1)}), \ldots, (f^{(N)}, y^{(N)})\}$. Then, we used this new training set to train a softmax regression. With a test example x, we first used the trained Auto-Encoder to compute the feature vector f; then, we fed f to the trained softmax regression to get the class prediction.

In both unsupervised and supervised phase, we used Stochastic Gradient Descent as the optimization algorithm with mini-batch size 100 and early stopping (in the unsupervised phase, we stopped the optimization based on the objective value on the validation set; in the supervised phase, we based on the classification error on the validation set). In all experiments, we used SRAEs with 1000 hidden units, a trade-off parameter λ of 0.25, an unsupervised learning rate of 0.05, and a supervised learning rate of 1.

4.2 SGD versus SW-SGD

To see the problem of training SRAEs with L1-norm sparsity penalty and the effect of our "sleep-wake" strategy, we compared training SRAEs with ordinary Stochastic Gradient Descent (SGD) and our modified version, Sleep-Wake Stochastic Gradient Descent (SW-SGD). In this experiment, we used our proposed weight constraint (tied weights + $W^{(e)}$ norm constraint + $W^{(d)}$ norm constraint).

Figure 3 shows the number of "sleep" hidden neurons of SRAEs during the optimization process with SGD and with SW-SGD. The problem of training SRAEs with L1-norm sparsity penalty is that during the optimization, L1 penalty can push the incoming weight vectors of hidden neurons to "sleep" states (meaning that the corresponding hidden neurons always give zero outputs with all examples in the dataset) and then, they will never get updated anymore; as can be seen from the figure, with ordinary SGD, the number of "sleep" neurons increased during the optimization, especially during the first epochs when the optimization had not stable yet. The SGD optimization finally ended up with 228/1000 "sleep" neurons. This problem of L1 penalty can be remedied by our simple "sleep-wake" strategy; the SW-SGD optimization ended up without any "sleep" neurons.

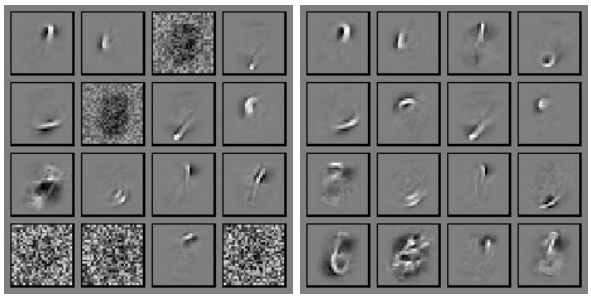
Figure 4 visualizes some example filters (the incoming weight vectors of hidden neurons) learned by SGD and SW-SGD. With SGD, there are five "sleep" filters; they look meaningless. With SW-SGD, there are not any "sleep" filters; all of them look meaningful, like "pen stroke" detectors.

Making use of all filters, SW-SGD achieved better training unsupervised objective value and better test classification performance (with softmax regression) than SGD (Table 1).

4.3 Our Proposed Weight Constraint versus Other Weight Constraints

In this second experiment, we compared our proposed weight constraint for SRAEs to other weight constraints that are possible to be applied to SRAEs. Concretely, we considered the following weight constraints:

- $W^{(d)}$ **norm constraint**: the outgoing weight vectors of hidden units (the columns of $W^{(d)}$) are constrained to have unit norm.



(a) SGD (b) SW-SGD

Figure 4: Figure (a) shows example filters learned by SGD; one can recognize there are five "sleep" filters looking meaningless. Figure (b) shows example filters learned by SW-SGD; all filters look meaningful, like "pen stroke" detectors.

Table 1: Unsupervised objective value on the training set and classification error (with softmax regression) on the test set when training SRAEs with SGD and with SW-SGD

	SGD	SW-SGD
Train Unsupervised Objective Value	9.84	**9.48**
Test Classification Error (%)	1.70	**1.62**

- $W^{(e)}$ **&** $W^{(d)}$ **norm constraint**: both the incoming and outgoing weight vectors of hidden units (the rows of $W^{(e)}$ and the columns of $W^{(d)}$ respectively) are constrained to have unit norm.
- **Tied weights**: the encoder's weights and the decoder's weights are tied together ($W^{(d)} = (W^{(e)})^T$).

Our weight constraint combines both $W^{(e)}$ **&** $W^{(d)}$ **norm constraint** and **tied weights**. In this experiment, we used SW-SGD to train SRAEs. As can be seen from Table 2, our weight constraint gave the best test classification performance (with softmax regression). In the last column, we also show the (approximate) training time per epoch of SRAEs with these different weight constraints (because of the early stopping strategy, the training processes of SAREs with different weight constraints can terminate after different number of epochs; therefore, it will be more accurate to compare them in term of the training time per epoch rather than the total training time). Weight constraints sorted from lowest to highest training time per epoch are: tied weights (2 seconds), $W^{(d)}$ norm constraint (3 seconds), our weight constraint (4 seconds), and $W^{(e)}$ & $W^{(d)}$ norm constraint (5 seconds). This order is reasonable because:

- In tied weights, SRAE doesn't have to do normalization in the forward propagation phase.
- In $W^{(d)}$ norm constraint, SRAE's decoder has to do normalization in the forward propagation phase; and because of this, in the back-propagation phase, the computation of derivatives with respect to the decoder's parameters will also become more expensive than usual.
- In our weight constraint, although we have to do normalization in both the encoder and decoder, we just have to compute the encoder's normalized weights and use them for the decoder thanks to the tied weights constraint. Its epoch time is higher than $W^{(d)}$ norm constraint above because in the back-propagation phase, the computation of derivatives with respect to both the encoder's parameters and the decoder's parameters is more expensive than usual.
- In $W^{(e)}$ & $W^{(d)}$ norm constraint, the training time per epoch is highest because SRAE has to do normalization in the encoder and decoder separately and the computation of derivatives with respect to both the encoder's parameters and the decoder's parameters is more expensive than usual.

Although the training time per epoch of our weight constraint is pretty high compared to other weigh constraints, it's still fast (thanks to the use of GPU). Its total training time is roughly 2.5 hours.

Table 2: Comparison of our weight constraint to other possible weight constraints. Our weight constraint gave the best classification performance (with softmax regression) on the test set. The last column shows the training time per epoch (roughly) of SRAEs with these different weight constraints.

Weight Constraint	Test Error (%)	Epoch Time (sec)
$W^{(d)}$ norm constraint	3.28	3
$W^{(e)}$ & $W^{(d)}$ norm constraint	2.51	5
Tied weights	2.04	2
Our weight constraint	**1.62**	4

Table 3: Comparison of SRAEs (with our weight constraint and SW-SGD) to other Auto-Encoder variants, including: Denoising Auto-Encoders (DAEs), Contractive Auto-Encoders (CAEs), and Higher Order Contractive Auto-Encoders (HCAEs), in term of classification error (with softmax regression) on the test set

Feature Learning Algorithm	Test Error (%)
DAEs [12]	2.05
CAEs [12]	1.82
SRAEs	1.62
HCAEs [12]	**1.20**

4.4 SRAEs versus Other Auto-Encoder Variants

Finally, we also compared SRAEs (with our weight constraint and SW-SGD) to other Auto-Encoder variants, including:

- **Denoising Auto-Encoders (DAEs)** [14]: want to learn robust features by making the input corrupted and trying to reconstruct the "clean" input from this corrupted version.
- **Contractive Auto-Encoders (CAEs)** [13]: want to learn features robust to small changes of the input by besides the reconstruction error, penalizing the Frobenius norm of the Jacobian of the feature vector with respect to the input vector.
- **Higher Order Auto-Encoders (HCAEs) [12]**: are the extension of CAEs; besides the reconstruction error and the Jacobian norm, HCAEs also penalize the approximated Hessian norm.

Table 3 compares the test classification performance of SRAEs to these Auto-Encoder variants. Note that with DAEs, CAEs, and HCAEs, [12] used 1000 hidden units, the sigmoid activation function in the hidden and output layer, the cross-entropy reconstruction error, and tied weights. Our SRAEs were better in term of test classification performance than DAEs and CAEs but worse than HCAEs. However, HCAEs are more complicated than our SRAEs with many hyper-parameters which need to be tuned.

5. CONCLUSION

In this paper, we have investigated SRAEs and in particular, two key ingredients to get SRAEs working: spar-

sity constraint and weight constraint. We have tried to understand the optimization problem when training SRAEs with L1-norm sparsity penalty and proposed a simple modified version of SGD, called SW-SGD, to remedy this problem. We have also proposed a reasonable weight constraint for SRAEs. Our experiments on the MNIST dataset have shown that our weight constraint and SW-SGD work well with SRAEs and can help SRAEs learn meaningful features that give excellent classification performance compared to other Auto-Encoder variants.

Our future work will include:

- Making use of sparsity to speed up the training.
- Unsupervised deep learning: SRAEs can be used to learn multiple layers of representation in greedy fashion but the interesting question is how to jointly learn multiple layers of representation?

6. REFERENCES

[1] Y. Bengio, A. C. Courville, and P. Vincent. Unsupervised feature learning and deep learning: A review and new perspectives. *CoRR*, abs/1206.5538, 2012.

[2] J. Bergstra, O. Breuleux, F. Bastien, P. Lamblin, R. Pascanu, G. Desjardins, J. Turian, D. Warde-Farley, and Y. Bengio. Theano: a CPU and GPU math expression compiler. In *Proceedings of the Python for Scientific Computing Conference (SciPy)*, June 2010. Oral Presentation.

[3] A. Coates. *Demystifying Unsupervised Feature Learning*. PhD thesis, Stanford University, 2012.

[4] A. Coates, A. Y. Ng, and H. Lee. An analysis of single-layer networks in unsupervised feature learning. In *International Conference on Artificial Intelligence and Statistics*, pages 215–223, 2011.

[5] X. Glorot, A. Bordes, and Y. Bengio. Deep sparse rectifier networks. In *Proceedings of the 14th International Conference on Artificial Intelligence and Statistics. JMLR W&CP Volume*, volume 15, pages 315–323, 2011.

[6] I. Goodfellow, H. Lee, Q. V. Le, A. Saxe, and A. Y. Ng. Measuring invariances in deep networks. In *Advances in neural information processing systems*, pages 646–654, 2009.

[7] Q. Le, M. Ranzato, R. Monga, M. Devin, K. Chen, G. Corrado, J. Dean, and A. Ng. Building high-level features using large scale unsupervised learning. In J. Langford and J. Pineau, editors, *Proceedings of the 29th International Conference on Machine Learning (ICML-12)*, ICML '12, pages 81–88, New York, NY, USA, July 2012. Omnipress.

[8] Y. LeCun. The MNIST database. `http://yann.lecun.com/exdb/mnist/`.

[9] H. Lee, A. Battle, R. Raina, and A. Ng. Efficient sparse coding algorithms. In *Advances in neural information processing systems*, pages 801–808, 2006.

[10] V. Nair and G. E. Hinton. Rectified linear units improve restricted boltzmann machines. In *Proceedings of the 27th International Conference on Machine Learning (ICML-10)*, pages 807–814, 2010.

[11] B. A. Olshausen et al. Emergence of simple-cell receptive field properties by learning a sparse code for natural images. *Nature*, 381(6583):607–609, 1996.

[12] S. Rifai, G. Mesnil, P. Vincent, X. Muller, Y. Bengio, Y. Dauphin, and X. Glorot. Higher order contractive auto-encoder. *Machine Learning and Knowledge Discovery in Databases*, pages 645–660, 2011.

[13] S. Rifai, P. Vincent, X. Muller, X. Glorot, and Y. Bengio. Contractive auto-encoders: Explicit invariance during feature extraction. In *Proceedings of the 28th International Conference on Machine Learning (ICML-11)*, pages 833–840, 2011.

[14] P. Vincent, H. Larochelle, Y. Bengio, and P.-A. Manzagol. Extracting and composing robust features with denoising autoencoders. In *Proceedings of the 25th international conference on Machine learning*, pages 1096–1103. ACM, 2008.

[15] M. Zeiler, M. Ranzato, R. Monga, M. Mao, K. Yang, Q. Le, P. Nguyen, A. Senior, V. Vanhoucke, J. Dean, et al. On rectified linear units for speech processing. ICASSP, 2013.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

[1] Y. Bengio, A. Courville, and P. Vincent, "Representation learning: A review and new perspectives," 2013. 6, 8

[2] J. Bergstra, O. Breuleux, F. Bastien, P. Lamblin, R. Pascanu, G. Desjardins, J. Turian, D. Warde-Farley, and Y. Bengio, "Theano: a CPU and GPU math expression compiler," in *Proceedings of the Python for Scientific Computing Conference (SciPy)*, Jun. 2010, oral Presentation. 37, 39

[3] A. Coates, "Demystifying unsupervised feature learning," Ph.D. dissertation, Stanford University, 2012. 8, 27, 34

[4] A. Coates, A. Y. Ng, and H. Lee, "An analysis of single-layer networks in unsupervised feature learning," in *International Conference on Artificial Intelligence and Statistics*, 2011, pp. 215–223. 8, 27, 35

[5] X. Glorot, A. Bordes, and Y. Bengio, "Deep sparse rectifier networks," in *Proceedings of the 14th International Conference on Artificial Intelligence and Statistics. JMLR W&CP Volume*, vol. 15, 2011, pp. 315–323. 26, 27

[6] I. Goodfellow, H. Lee, Q. V. Le, A. Saxe, and A. Y. Ng, "Measuring invariances in deep networks," in *Advances in neural information processing systems*, 2009, pp. 646–654. 8, 27, 35

[7] Q. V. Le, A. Karpenko, J. Ngiam, and A. Y. Ng, "Ica with reconstruction cost for efficient overcomplete feature learning," in *NIPS*, 2011, pp. 1017–1025. 34

[8] Y. LeCun, "The MNIST database," http://yann.lecun.com/exdb/mnist/. 38

[9] H. Lee, A. Battle, R. Raina, and A. Ng, "Efficient sparse coding algorithms," in *Advances in neural information processing systems*, 2006, pp. 801–808. 12

[10] V. Nair and G. E. Hinton, "Rectified linear units improve restricted boltzmann machines," in *Proceedings of the 27th International Conference on Machine Learning (ICML-10)*, 2010, pp. 807–814. 26

[11] B. A. Olshausen *et al.*, "Emergence of simple-cell receptive field properties by learning a sparse code for natural images," *Nature*, vol. 381, no. 6583, pp. 607–609, 1996. 7

[12] S. Rifai, G. Mesnil, P. Vincent, X. Muller, Y. Bengio, Y. Dauphin, and X. Glorot, "Higher order contractive auto-encoder," *Machine Learning and Knowledge Discovery in Databases*, pp. 645–660, 2011. 8, 34, 40, 45, 46

[13] S. Rifai, P. Vincent, X. Muller, X. Glorot, and Y. Bengio, "Contractive auto-encoders: Explicit invariance during feature extraction," in *Proceedings of the 28th International Conference on Machine Learning (ICML-11)*, 2011, pp. 833–840. 8, 34, 45

[14] P. Vincent, H. Larochelle, Y. Bengio, and P.-A. Manzagol, "Extracting and composing robust features with denoising autoencoders," in *Proceedings of the 25th international conference on Machine learning*. ACM, 2008, pp. 1096–1103. 8, 34, 45

[15] M. D. Zeiler, "Hierarchical convolutional deep learning in computer vision," Ph.D. dissertation, New York University, 2014. 13

[16] M. Zeiler, M. Ranzato, R. Monga, M. Mao, K. Yang, Q. Le, P. Nguyen, A. Senior, V. Vanhoucke, J. Dean *et al.*, "On rectified linear units for speech processing." ICASSP, 2013. 8, 26, 27, 34