

Neuronové sítě

Doc. RNDr. Iveta Mrázová, CSc.

Katedra teoretické informatiky

Matematicko-fyzikální fakulta

Univerzity Karlovy v Praze

Neuronové sítě

– Asociativní paměti –

Doc. RNDr. Iveta Mrázová, CSc.

Katedra teoretické informatiky

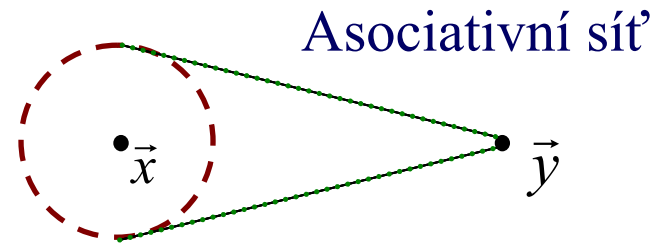
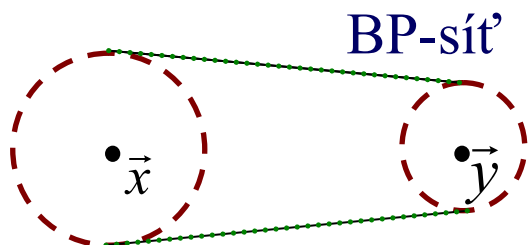
Matematicko-fyzikální fakulta

Univerzity Karlovy v Praze

Asociativní sítě a asociativní paměti (1)

Cíl učení: asociace známého vstupního vzoru
s daným výstupním vzorem

- Okolí známého vstupního vzoru \vec{x} by se mělo také zobrazit na výstup \vec{y} odpovídající \vec{x}
→ správný výstup pak lze přiřadit i „zašuměným“
vzorům



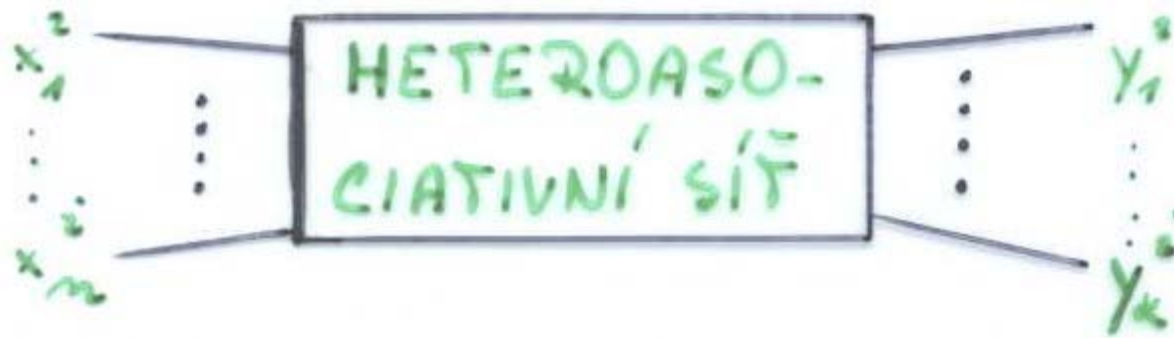
Asociativní sítě a asociativní paměti (2)

- ◆ Asociativní paměti lze implementovat pomocí sítí se zpětnou vazbou (ale i bez ní)
 - nejjednodušší **zpětná vazba**:
 - ◆ výstup sítě se používá opakovaně jako její nový vstup, dokud síť nezkonverguje do stabilního stavu
 - × **ne všechny sítě zkonvergují po předložení nového vzoru do stabilního stavu**
 - **nutná dodatečná omezení na architekturu sítě**

Funkce asociativní paměti

- ◆ Rozpoznat předem naučené vstupní vzory i v případě, že jsou „mírně zašuměné“
- ◆ Odezva každého neuronu je dána výhradně informacemi procházejícími jeho vahami (Hebbovské učení)
- ◆ Tři typy asociativních sítí:
 - heteroasociativní, autoasociativní a sítě pro rozpoznávání vzorů

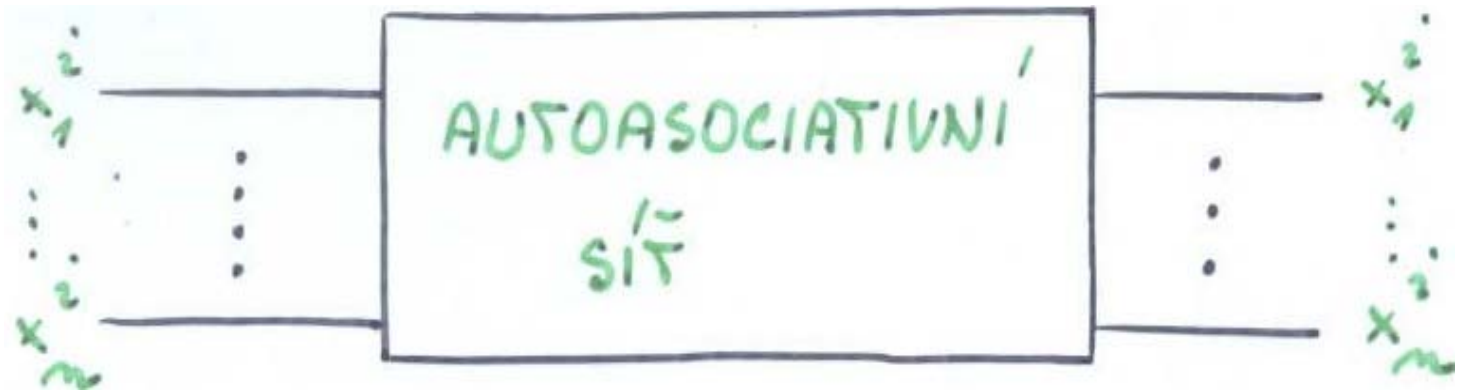
Heteroasociativní síť



Zobrazují m vstupních vzorů $\vec{x}^1, \dots, \vec{x}^m$ z n -rozměrného prostoru na m výstupních vektorů $\vec{y}^1, \dots, \vec{y}^m$ v k – rozměrném prostoru tak, že $\vec{x}^i \mapsto \vec{y}^i$

Jestliže $\|\tilde{\vec{x}} - \vec{x}^i\|^2 < \varepsilon$, potom $\tilde{\vec{x}} \mapsto \vec{y}^i$ ($\varepsilon > 0$).

Autoasociativní sítě



Podmnožina heteroasociativních sítí (každý vektor je zobrazen sám na sebe: $\vec{y}^i = \vec{x}^i$ pro $i = 1, \dots, m$)

funkcí autoasociativních sítí je „oprava zašuměných vzorů“

Sítě pro rozpoznávání vzorů



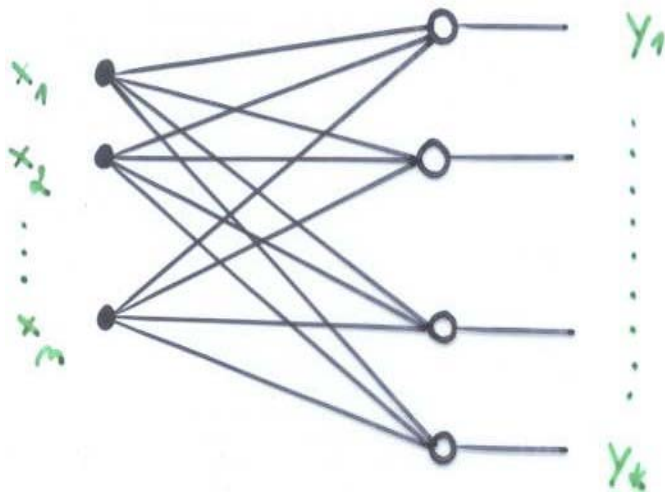
Speciální typ heteroasociativních sítí (každému vektoru \vec{x}^i je přiřazena skalární hodnota i)

Cílem je identifikace třídy vstupního vzoru

Struktura asociativní paměti

Asociativní paměť lze implementovat pomocí jedné vrstvy neuronů

**Heteroasociativní
sít' bez zpětné vazby**



- Nechť: w_{ij} ... váha mezi vstupem i a neuronem j
 W ... $n \times k$ matice vah
→ vektor $\vec{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ dává excitační vektor $\vec{e} = \vec{x} \cdot W$
→ Potom se pro každý neuron spočítá hodnota přenosové funkce
- Pro identitu dostáváme lineární asociátor a výstupem \vec{y} bude právě $\vec{x} \cdot W$

Struktura asociativní paměti (2)

Obecně: je třeba přiřadit m různým n – rozměrným vektorům $\vec{x}^1, \vec{x}^2, \dots, \vec{x}^m$ m k – rozměrných vektorů $\vec{y}^1, \dots, \vec{y}^m$

→ X matice $m \times n$ (řádky odpovídají jednotlivým vstupním vektorům)

Y matice $m \times k$ (řádky odpovídají příslušným výstupním vektorům)

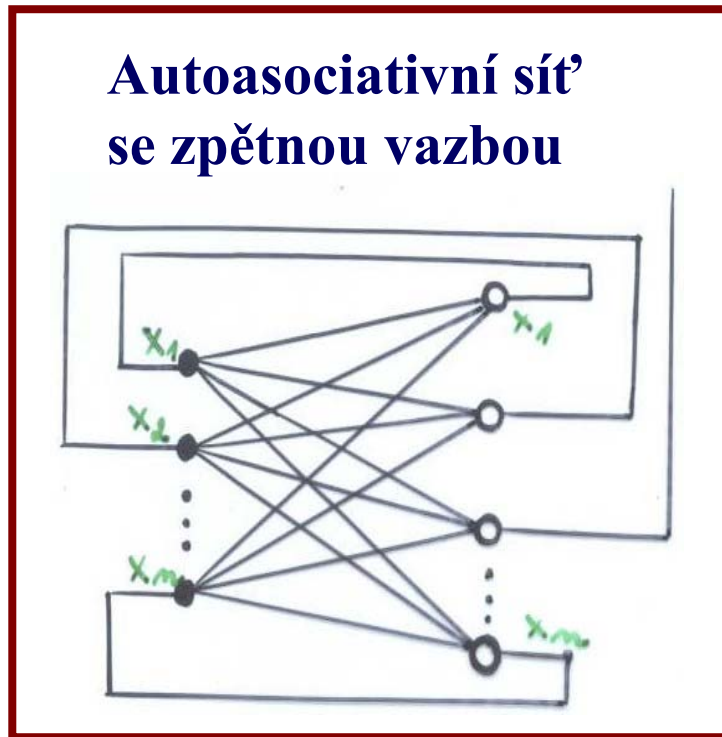
Struktura asociativní paměti (3)

→ hledáme takovou matici W , aby $X \cdot W = Y$
(a v případě autoasociativní paměti $X \cdot W = X$)

Poznámka: pro $m = n$ je X čtvercová matice
pokud existuje k ní inverzní matice, bude
řešením $W = X^{-1} \cdot Y$

Rekurentní asociativní síť

- ◆ Výstup sítě představuje její nový vstup



- ◆ **Předpoklad:** všechny neurony počítají svůj výstup současně

→ síť dostává v každém kroku na vstup vektor $\vec{x}(i)$ a dává nový výstup $\vec{x}(i+1)$

Rekurentní asociativní síť (2)

Otázka: existuje pevný bod $\vec{\xi}$ takový, že

$$\vec{\xi} \cdot W = \vec{\xi}$$

- vektor $\vec{\xi}$ je vlastním vektorem matice W s vlastním číslem 1
- síť se chová jako dynamický systém prvního řádu, protože každý nový stav $\vec{x}(i+1)$ je plně určen nejbližším předchůdcem

Vlastní automaty

(eigenvector automata)

Nechť: W ... váhová matice autoasociativní sítě
jednotlivé neurony jsou lineární asociátory
→ hledáme pevné body dynamického systému

Poznámka: ne všechny matice vah vedou ke stabilnímu stavu

Příklad: rotace o 90° v rovině:

$$W = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$$

→ cykly délky 4

Vlastní automaty (2)

→ Pro paměti jsou vhodnější čtvercové matice s úplnou množinou vlastních vektorů

$n \times n$ matice W může mít až n lineárně nezávislých vlastních vektorů a n vlastních čísel

→ vlastní vektory $\vec{x}^1, \dots, \vec{x}^n$ pak splňují

$$\vec{x}^i \cdot W = \lambda_i \vec{x}^i$$

pro $i = 1, \dots, n$ a $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ vlastní čísla W

Vlastní automaty (3)

- ◆ Každá váhová matice s plnou množinou vlastních vektorů definuje jistý typ „vlastního automatu“
 - Po předložení vstupního vektoru bude nalezen vlastní vektor s největším vlastním číslem (pokud takový existuje)
- ◆ Předpokládejme buďto, že λ_1 je vlastní číslo W takové, že $|\lambda_1| > |\lambda_i| \quad \forall i = 2, \dots, n$

Vlastní automaty (4)

- ◆ Necht' $\lambda_1 > 0$ a \vec{a}_0 je náhodně zvolený nenulový n -rozměrný vektor

→ \vec{a}_0 lze vyjádřit jako lineární kombinaci n vlastních vektorů matice W :

$$\vec{a}_0 = \alpha_1 \vec{x}^1 + \alpha_2 \vec{x}^2 + \dots + \alpha_n \vec{x}^n$$

- ◆ **Předpoklad:** všechny konstanty α jsou nenulové

→ Po první iteraci s W dostáváme:

$$\begin{aligned} \vec{a}_1 &= \vec{a}_0 \cdot W = (\alpha_1 \vec{x}^1 + \dots + \alpha_n \vec{x}^n) \cdot W = \\ &= \alpha_1 \lambda_1 \vec{x}^1 + \alpha_2 \lambda_2 \vec{x}^2 + \dots + \alpha_n \lambda_n \vec{x}^n \end{aligned}$$

Vlastní automaty (5)

→ Po t iteracích dostaneme:

$$\vec{a}_t = \alpha_1 \lambda_1^t \vec{x}^1 + \alpha_2 \lambda_2^t \vec{x}^2 + \dots + \alpha_n \lambda_n^t \vec{x}^n$$

→ Po dostatečně velkém počtu iterací bude dominovat největší vlastní číslo - λ_1

→ vektor \vec{a}_t se pak může přiblížit libovolně blízko vlastnímu vektoru \vec{x}^1 (týká se směru, ne nutně délky)

→ v každé iteraci tak vektor \vec{x}^1 přitahuje libovolný jiný vektor \vec{a}_0 s nenulovým členem pro α_1

→ \vec{x}^1 je **atraktor**

Vlastní automaty (6)

Příklad:

Matice $W = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ má 2 vlastní vektory $(1, 0)$ a $(0, 1)$ s vlastními čísly 2 a 1

Po t iteracích počátečního vzoru (x_1, x_2) ; $x_1 \neq 0$ dostaneme $(2^t x_1, x_2)$

→ Pro dostatečně velké t se přiblíží libovolně blízko $(1, 0) \Rightarrow$ vektor $(1, 0)$ je atraktor

Asociativní učení

Cíl: použití asociativních sítí jako dynamických systémů, jejichž atraktory by odpovídaly těm vektorům, které chceme do paměti uložit

◆ **Při návrhu sítě chceme rozmístit ve vstupním prostoru co možná nejvíce atraktorů**

- Každý z nich by měl mít přesně danou a omezenou oblast vlivu
- × v případě vlastních automatů zahrnovala oblast vlivu jediného vektoru téměř celý vstupní prostor

Asociativní učení (2)

→ nelineární dynamické systémy

- Nelineární aktivace neuronů

Skoková přenosová funkce:

$$\text{sgn}(x) = \begin{cases} 1 & x \geq 0 \\ -1 & x < 0 \end{cases}$$

- Bipolární kódování je vhodnější než binární (u bipolárních vektorů je větší pravděpodobnost vzájemné ortogonality)

Hebbovské učení

Předpoklad:

- ♦ 1-vrstvá síť s k neurony a skokovou přenosovou funkcí sgn

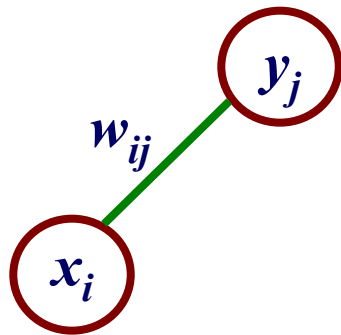
Cíl:

- ♦ nalézt odpovídající váhy pro zobrazení n – rozměrného vstupního vektoru \vec{x} na k – rozměrný výstupní vektor \vec{y}

Idea: (Donald Hebb – 1949)

- ♦ Dva neurony, které jsou současně aktivní, by měly mít „vyšší stupeň vzájemné interakce“ než neurony, jejichž aktivita je nekorelovaná – v takovém případě by měla být vzájemná interakce hodně malá nebo nulová

Hebbovské učení (2)



$$\Delta w_{ij} = \gamma x_i y_j$$

γ ... parametr učení

W ... váhová matice (na začátku učení nulová)

- ◆ Adaptační pravidlo se použije pro všechny váhy
- ◆ na vstupu je n – rozměrný vektor \vec{x}^1 , na výstupu k – rozměrný vektor \vec{y}^1

→ adaptovaná váhová matice W je korelační maticí pro tyto dva vektory

$$W = [w_{ij}]_{n \times k} = [x_i^1 y_j^1]_{n \times k}$$

Hebbovské učení (3)

- ♦ Matice W zobrazí nenulový vektor \vec{x}^1 právě na vektor \vec{y}^1

$$\begin{aligned}\vec{x}^1 \cdot W &= \left(y_1^1 \sum_{i=1}^n x_i^1 x_i^1, y_2^1 \sum_{i=1}^n x_i^1 x_i^1, \dots, y_k^1 \sum_{i=1}^n x_i^1 x_i^1 \right) = \\ &= \vec{y}^1 (\vec{x}^1 \cdot \vec{x}^1)\end{aligned}$$

- ♦ Pro $\vec{x}^1 \neq 0$ platí, že $\vec{x}^1 \cdot \vec{x}^1 > 0$ a výstup sítě je:

$$\text{sgn} (\vec{x}^1 \cdot W) = (y_1^1, \dots, y_k^1) = \vec{y}^1$$

- ♦ pro $-\vec{x}^1$ je výstup sítě:

$$\text{sgn} (-\vec{x}^1 \cdot W) = -\text{sgn} (\vec{x}^1 \cdot W) = -\vec{y}^1$$

Hebbovské učení (4)

Obecně:

- ◆ Chceme-li přiřadit m n – rozměrným nenulovým vektorům $\vec{x}^1, \vec{x}^2, \dots, \vec{x}^m$ m k – rozměrných vektorů $\vec{y}^1, \dots, \vec{y}^m$, použijeme Hebbovské učení pro každou dvojici VSTUP/VÝSTUP

- ◆ Výsledná matice vah W bude mít tvar:

$$W = W^1 + W^2 + \dots + W^m ,$$

kde každá matice W^l je $n \times k$ korelační matice vektorů \vec{x}^l a \vec{y}^l : $W^l = [\mathbf{x}_i^l \mathbf{y}_j^l]_{n \times k}$

Hebbovské učení (5)

- ◆ Jestliže pak bude na vstupu sítě vektor \vec{x}^p , bude excitační vektor sítě roven:

$$\begin{aligned}\vec{x}^p \cdot W &= \vec{x}^p \cdot (W^1 + W^2 + \dots + W^m) = \vec{x}^p \cdot W^p + \sum_{l \neq p}^m \vec{x}^p \cdot W^l = \\ &= \vec{y}^p \cdot (\vec{x}^p \cdot \vec{x}^p) + \sum_{l \neq p}^m \vec{y}^l \cdot (\vec{x}^l \cdot \vec{x}^p)\end{aligned}$$

- ◆ Excitační vektor tedy odpovídá \vec{y}^p (vynásobenému kladnou konstantou) s perturbačním členem

$$\sum_{l \neq p}^m \vec{y}^l \cdot (\vec{x}^l \cdot \vec{x}^p) \quad ,$$

který se označuje jako **CROSSTALK**

Hebbovské učení (6)

- ◆ Síť dává na výstupu požadovaný vektor \vec{y}^p v případě, že je crosstalk nulový

→ Pokud jsou vstupní vzory $\vec{x}^1, \vec{x}^2, \dots, \vec{x}^m$ navzájem ortogonální

- ◆ Síť může dávat poměrně dobré výsledky i pro nenulový crosstalk

× crosstalk by měl být menší než $\vec{y}^p \cdot (\vec{x}^p \cdot \vec{x}^p)$

→ **Výstup sítě bude roven:**

$$\text{sgn}(\vec{x}^p \cdot W) = \text{sgn}\left(\vec{y}^p \cdot (\vec{x}^p \cdot \vec{x}^p) + \sum_{l \neq p}^m \vec{y}^l \cdot (\vec{x}^l \cdot \vec{x}^p)\right)$$

Hebbovské učení (7)

- ◆ Protože $\vec{x}^p \cdot \vec{x}^p$ je kladná konstanta:

$$\operatorname{sgn} \left(\vec{x}^p \cdot W \right) = \operatorname{sgn} \left(\vec{y}^p + \sum_{l \neq p}^m \vec{y}^l \cdot \frac{\left(\vec{x}^l \cdot \vec{x}^p \right)}{\left(\vec{x}^p \cdot \vec{x}^p \right)} \right)$$

- ◆ Aby byl výstup sítě roven \vec{y}^p , musí platit

$$\vec{y}^p = \operatorname{sgn} \left(\vec{y}^p + \sum_{l \neq p}^m \vec{y}^l \cdot \frac{\left(\vec{x}^l \cdot \vec{x}^p \right)}{\left(\vec{x}^p \cdot \vec{x}^p \right)} \right)$$

- ◆ Tato podmínka bude splněna, pokud bude absolutní hodnota

všech složek perturbačního členu $\sum_{l \neq p}^m \vec{y}^l \cdot \frac{\left(\vec{x}^l \cdot \vec{x}^p \right)}{\left(\vec{x}^p \cdot \vec{x}^p \right)}$ menší než 1

Hebbovské učení (8)

- Pro bipolární vektory to znamená, že skalární součin $\vec{x}^l \cdot \vec{x}^p$ musí být menší než druhá mocnina délky \vec{x}^p
- Pokud jsou náhodně zvoleným bipolárním vektorům přiřazeny (jiné) náhodně zvolené bipolární vektory, je pravděpodobnost, že budou navzájem ortogonální, poměrně vysoká (pokud jich ovšem nebylo zvoleno příliš mnoho)
 - V takovém případě bude crosstalk malý a Hebbovské učení povede k volbě vhodných vah pro asociativní síť

Geometrická interpretace Hebbovského učení

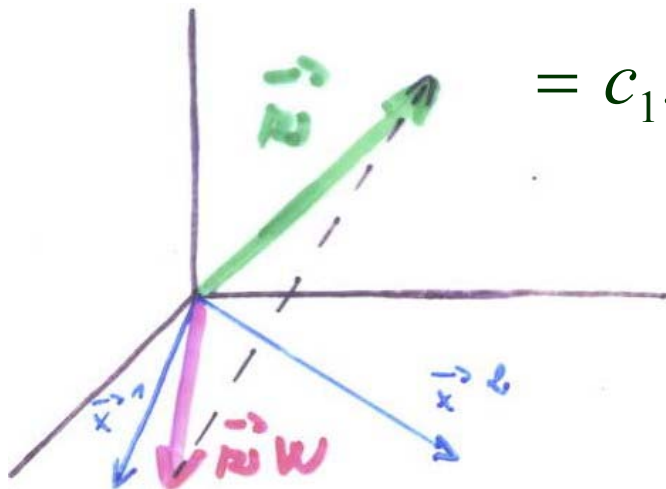
- ◆ Pro matice W^i ze vztahu $W = W^1 + W^2 + \dots + W^m$ v případě autoasociativních sítí platí: $W^i = (\vec{x}^i)^T \vec{x}^i$
 - tedy pro $W^1 = (\vec{x}^1)^T \vec{x}^1$ bude vstupní vektor \vec{z} zobrazen do lineárního podprostoru L_1 určeného vektorem \vec{x}^1 , protože
$$\vec{z} \cdot W^1 = \vec{z} (\vec{x}^1)^T \vec{x}^1 = \left(\vec{z} (\vec{x}^1)^T \right) \vec{x}^1 = c_1 \vec{x}^1$$
Obecně neortogonální projekce vektoru \vec{z} do L_1 (c_1 je konstanta)
 - podobně i pro další matice vah W^2, \dots, W^m

Geometrická interpretace Hebbovského učení (2)

- ♦ Matice $W = \sum_{i=0}^m W^i$ zobrazí vektor \vec{z} do lineárního podprostoru určeného vektory $\vec{x}^1, \vec{x}^2, \dots, \vec{x}^m$, protože $\vec{z} \cdot W = \vec{z} \cdot W^1 + \vec{z} \cdot W^2 + \dots + \vec{z} \cdot W^m =$

$$= c_1 \vec{x}^1 + c_2 \vec{x}^2 + \dots + c_m \vec{x}^m$$

(obecně neortogonální projekce)



Analýza chování asociativních sítí

- ◆ Identifikace atraktorů (pevných bodů systému)
- ◆ Míra vlivu jednotlivých atraktorů
 - **Hammingovská vzdálenost**
 - ~ počet různých složek dvou bipolárních vektorů
 - Příklad:
$$\begin{array}{cccc} 1 & \underline{-1} & \underline{1} & 1 \\ 1 & \underline{1} & \underline{-1} & 1 \end{array} \rightarrow 2$$
 - S rostoucím počtem ukládaných vzorů se „sféry vlivu“ jednotlivých atraktorů zmenšují → **nepravé stabilní stavy**
 - Velký crosstalk
 - Inverzní vzory k uloženým:

$$\text{sgn} \left(- \vec{x} \cdot W \right) = - \text{sgn} \left(\vec{x} \cdot W \right) = - \vec{x}$$

Analýza chování asociativních sítí (2)

◆ Rekurentní síť (se zpětnou vazbou)

- Lepší konvergence oproti asociativní paměti bez zpětné vazby
- Větší „sféry vlivu“ jednotlivých atraktorů
 - × nesmí být uloženo příliš mnoho vzorů
 - **PROBLÉM**: **Kapacita matice vah**
- Porovnání velikosti sfér vlivu pomocí indexu

$$I = \sum_{h=0}^{n/2} h p_h$$

p_h ... procento vektorů s Hammingovskou vzdáleností h od uloženého vzoru, které k němu zkonvergovaly

Problém kapacity sítě

- ◆ „Sféry vlivu“ uložených vzorů se zmenšují s každým novým ukládaným vzorem
- ◆ Pokud bude crosstalk příliš velký, může být dříve uložený vzor i „zapomenut“
- × pravděpodobnost výskytu takových problémů by měla být co možná nejmenší

Problém kapacity sítě (2)

Odhad počtu vzorů m , které lze bezpečně uložit do autoasociativní paměti s váhovou maticí W ($n \times n$)

Maximální kapacita sítě: $m \sim 0.18 n$

- ◆ Počet uložených vzorů by měl být menší než $0.18 n$, kde n je dimenze vstupního vektoru
- ◆ Pokud jsou ale vzory korelované, může dojít k problémům i pro $m < 0.18 n$

Odvození kapacity sítě – idea (1)

- ◆ Pro $W^i = \frac{1}{n} \left(\vec{x}^i \right)^T \vec{x}^i$
- ◆ Crosstalk pro n – rozměrné bipolární vektory a m vzorů autoasociativní sítě:

$$\frac{1}{n} \sum_{l \neq p}^m \vec{x}^l \left(\vec{x}^l \cdot \vec{x}^p \right)$$

Pokud je tento člen větší než 1 a má opačné znaménko u příslušné složky, může „překlopit“ odpovídající bit již uloženého vzoru

Odvození kapacity sítě – idea (2)

- ◆ Předpokládejme, že uložené vzory byly zvoleny náhodně:

- Crosstalk pro bit i vstupního vektoru je určen jako

$$\frac{1}{n} \sum_{l \neq p}^m x_i^l \left(\vec{x}^l \cdot \vec{x}^p \right) \quad (*)$$

- Protože byly složky všech vzorů zvoleny náhodně, dostáváme řádově $m \cdot n$ náhodných hodnot
očekávaná hodnota tohoto součtu je 0

Odvození kapacity sítě – idea (3)

- ◆ Součet (*) má binomické rozdělení a pro velké hodnoty $m \cdot n$ ho lze aproximovat normálním rozdělením se směrodatnou odchylkou $\sigma = \sqrt{\frac{m}{n}}$
- ◆ Pravděpodobnost chyby P , že součet (*) bude větší než 1 (anebo menší než -1), je dána dle

$$P = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \int_1^{\infty} e^{-x^2 / (2\sigma^2)} dx$$

Odvození kapacity sítě – idea (4)

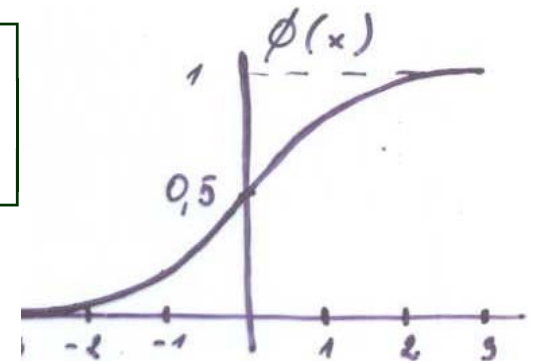
♦ Tedy: $P \{ | (*) | > 1 \} = 2 \left[1 - \Phi \left(\frac{1}{\sqrt{m/n}} \right) \right]$

kde $\Phi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^x e^{-t^2/2} dt$

→ pro horní mez chyby na **1** bitu **0.01** dostaneme:

$$0.01 = 2 \left[1 - \Phi \left(\frac{1}{\sqrt{m/n}} \right) \right]$$

→ **$m \sim 0.18 n$**



Asociativní paměti – pseudoinverzní matice (1)

Hebbovské učení dává dobré výsledky, pokud jsou uložené vzory téměř ortogonální

~ pokud bylo m bipolárních vektorů zvoleno náhodně z n – rozměrného prostoru, n je „dostatečně velké“ a m je „dostatečně menší“ než n

× v reálných aplikacích jsou vzory téměř vždy korelované a perturbační člen ve výrazu

$$\vec{x}^p \cdot W = \vec{y}^p \cdot \left(\vec{x}^p \cdot \vec{x}^p \right) + \sum_{l \neq p}^m \vec{y}^l \cdot \left(\vec{x}^l \cdot \vec{x}^p \right)$$

může ovlivnit kvalitu rozpoznávání, protože skalární součiny $\vec{x}^l \cdot \vec{x}^p$ nejsou pro $l \neq p$ dostatečně malé

Asociativní paměti – pseudoinverzní matice (2)

→ vzájemná korelace ukládaných vzorů vede ke snížení kapacity asociativní paměti

~ počet vzorů, které lze uložit a rozpoznat

ukládané vzory pak nepokrývají rovnoměrně celý příznakový prostor, ale soustředí se do menší oblasti

→ je třeba hledat alternativní metody učení schopné minimalizovat perturbaci mezi ukládanými vzory

→ použití pseudoinverzní matice namísto korelační

Asociativní paměti – pseudoinverzní matice (3)

Definice:

Pseudoinverzní maticí k matici $m \times n$ reálných čísel je matice reálných čísel \tilde{X} s následujícími vlastnostmi:

1. $X \tilde{X} X = X$,
2. $\tilde{X} X \tilde{X} = \tilde{X}$,
3. $\tilde{X} X$ a $X \tilde{X}$ jsou symetrické

Pseudoinverzní matice vždy existuje a je jednoznačně určena.

Pseudoinverzní matice - vlastnosti

Nechť $\vec{x}^1, \vec{x}^2, \dots, \vec{x}^m$ jsou n – rozměrné vektory,
kterým má být přiřazeno m k – rozměrných vektorů
 $\vec{y}^1, \dots, \vec{y}^m$

→ maticový zápis:

X Matice $m \times n$

řádky matice tvoří vektory $\vec{x}^1, \vec{x}^2, \dots, \vec{x}^m$,

Y Matice $m \times k$

řádky matice tvoří vektory $\vec{y}^1, \dots, \vec{y}^m$

→ Hledáme matici W ; $XW = Y$

Pseudoinverzní matice – vlastnosti (2)

Protože obecně $m \neq n$ a vektory $\vec{x}^1, \vec{x}^2, \dots, \vec{x}^m$ nemusí být navzájem lineárně nezávislé, nemusí existovat k matici X matice inverzní

→ hledáme matici, která by minimalizovala $\|XW - Y\|^2$
(~ součet druhých mocnin jednotlivých prvků)

minimalizace pomocí $W = \tilde{X}Y$

\tilde{X} ... Pseudoinverzní matice k X

(~ nejlepší aproximace inverzní matice k X
pokud X^{-1} existuje, bude navíc $\|X\tilde{X} - I\|^2$)

Pseudoinverzní matice – vlastnosti (3)

Věta:

Nechť X je matice reálných čísel $m \times n$ a Y je matice reálných čísel $m \times k$.

Matice $n \times k$ $W = \tilde{X}Y$ minimalizuje $\|XW - Y\|^2$.
(Zároveň \tilde{X} minimalizuje $\|X\tilde{X} - I\|^2$.)

Důkaz:

Nechť $E = \|XW - Y\|^2$ stopa matice
 $\rightarrow E$ lze vyjádřit jako $E = \text{tr}(S)$, kde
 $S = (XW - Y)^T (XW - Y)$
($E \sim$ součet prvků na diagonále S)

Pseudoinverzní matice – vlastnosti (4)

Důkaz (pokračování):

→ S lze vyjádřit jako

$$S = (\tilde{X}Y - W)^T X^T X (\tilde{X}Y - W) + Y^T (I - X\tilde{X})Y$$

(Protože:

$$S = (\tilde{X}Y - W)^T (X^T X\tilde{X}Y - X^T XW) + Y^T (I - X\tilde{X})Y$$

Matice $X\tilde{X}$ je symetrická (def.), a tedy:

$$S = (\tilde{X}Y - W)^T \left(\left(\underbrace{\begin{pmatrix} X & \tilde{X} & X \\ = X \text{ (def.)} \end{pmatrix}}^T Y - X^T XW \right) + Y^T (I - X\tilde{X})Y \right)$$

Pseudoinverzní matice – vlastnosti (5)

Důkaz (pokračování):

$$\begin{aligned} \text{(Proto: } S &= (\tilde{X}Y - W)^T (X^T Y - X^T XW) + Y^T (I - X\tilde{X})Y = \\ &= (\tilde{X}Y - W)^T X^T (Y - XW) + Y^T (I - X\tilde{X})Y = \\ &= (X\tilde{X}Y - XW)^T (Y - XW) + Y^T (I - X\tilde{X})Y = \\ &= (-XW)^T (Y - XW) + Y^T X\tilde{X}(Y - XW) + Y^T (I - X\tilde{X})Y = \\ &= (-XW)^T (Y - XW) + Y^T (-XW) + Y^T Y = \\ &= (Y - XW)^T (Y - XW) \end{aligned}$$

→ E lze tedy vyjádřit jako

$$E = \text{tr} \left((\tilde{X}Y - W)^T X^T X (\tilde{X}Y - W) \right) + \underbrace{\text{tr} \left(Y^T (I - X\tilde{X})Y \right)}_{= \text{konst.}}$$

→ **min** E pro $W = \tilde{X}Y$

QED

Pseudoinverzní matice - použití

Motivace a použití:

- ◆ Ne ke všem maticím existuje matice inverzní
- ◆ Alternativou je použití pseudoinverzní matice
 - Minimalizace střední kvadratické odchylky (např. vrstevnaté neuronové sítě)
 - Trénovací množina: $\left\{ \left(\vec{x}_p, \vec{d}_p \right); p = 1, \dots, P \right\}$
 - \vec{x}_p Vstupní vzor (n – rozměrný)
 - \vec{d}_p Požadovaný výstup (m – rozměrný)
 - \vec{y}_p Skutečný výstup (m – rozměrný)

Pseudoinverzní matice – použití (2)

◆ Odchylka: $E = \sum_{p=1}^P E_p = \sum_{p=1}^P \sum_{j=1}^m (d_{j,p} - y_{j,p})^2$

$\Rightarrow \vec{y}_p : y_{j,p} = \sum_{i=1}^n w_{ij} x_{i,p}$

- ◆ Minimalizace odchylky E vzhledem k vahám \rightarrow parciální derivace E podle vah by měly být nulové:

$$\begin{aligned} \frac{\partial E}{\partial w_{ij}} &= \frac{\partial}{\partial w_{ij}} \left(\sum_{p=1}^P \sum_{j=1}^m \left(d_{j,p} - \sum_{i=1}^n w_{ij} x_{i,p} \right)^2 \right) = \\ &= -2 \sum_{p=1}^P \left(\sum_{i=1}^n d_{j,p} - w_{ij} x_{i,p} \right) x_{i,p} = 0 \end{aligned}$$

Pseudoinverzní matice – použití (3)

- ◆ Maticový zápis: $W X X^T = D X^T$
 - W Matice $m \times n$ se složkami w_{ij}
 - X Matice $n \times P$ se složkami $x_{i,p}$
 - D Matice $m \times P$ se složkami $d_{j,p}$
- × k matici XX^T obecně nemusí existovat inverzní matice
 - nemusí být možné vyřešit rovnici přímo
(a najít matici vah W v případě, že XX^T nemá m lineárně nezávislých řádků)

Pseudoinverzní matice – použití (4)

- ◆ Řešení může být víc → dodatečná podmínka na omezení velikosti vah:

$$E = \lambda \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m w_{ij}^2 \quad ; \quad \lambda > 0, \lambda = \textit{konst} .$$

- ◆ Minimalizace pomocí parciálních derivací

$$W (X X^T + \lambda I) = D X^T$$

($\lambda > 0$ k matici $X X^T + \lambda I$ existuje matice inverzní)

$$W (X X^T + \lambda I) (X X^T + \lambda I)^{-1} = D X^T (X X^T + \lambda I)^{-1}$$

Pseudoinverzní matice – použití (5)

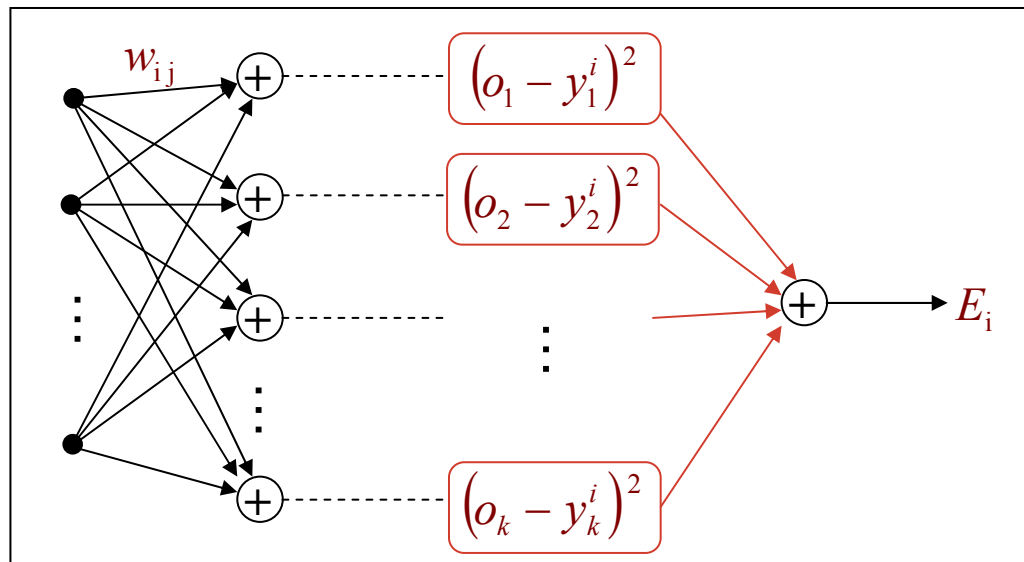
- ◆ Limitně pro $\lambda \rightarrow 0$:

$$W = \underbrace{\lim}_{\lambda \rightarrow 0} \left[DX^T (XX^T + \lambda I)^{-1} \right] = D\tilde{X}$$

- \tilde{X} Pseudoinverzní matice k matici X
- Pokud existuje řešení více, bude mít \tilde{X} nejmenší hodnoty
$$\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m w_{ij}^2$$
- Pokud existuje k X inverzní matice, bude $\tilde{X} = X^{-1}$

Výpočet pseudoinverzní matice

- ◆ Aproximace pomocí vrstevnatých neuronových sítí typu zpětného šíření
- ◆ Vrstevnatá neuronová síť k nalezení vah asociativní sítě



o – výstup sítě
 y – požadovaná asociace

Výpočet pseudoinverzní matice (2)

- ◆ **Cíl učení:** Nalézt takovou matici vah \mathbf{W} se složkami w_{ij} , která by nejlépe zobrazila vektory $\vec{x}^1, \dots, \vec{x}^m$ na vektory $\vec{y}^1, \dots, \vec{y}^m$
- ◆ Pro i -tý vstupní vektor se porovná výstup síte s vektorem \vec{y}^i a vypočítá se E_i
- ◆ Celková kvadratická odchylka $E = \sum_{i=1}^m E_i$ pak odpovídá $\|\mathbf{XW} - \mathbf{Y}\|^2$
- ◆ Algoritmus zpětného šíření pak najde matici \mathbf{W} , která by měla minimalizovat $\|\mathbf{XW} - \mathbf{Y}\|^2$