Neuronové sítě

Doc. RNDr. Iveta Mrázová, CSc.

Katedra teoretické informatiky

Matematicko-fyzikální fakulta

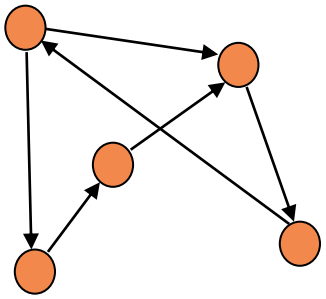
Univerzity Karlovy v Praze

Vrstevnaté neuronové sítě (1)

D: Neuronová síť je uspořádaná 6-tice $M=(N,C,I,O,w,t)$, kde:

- N je konečná neprázdná množina neuronů,
- $C \subseteq N \times N$ je neprázdná množina orientovaných spojů mezi neurony
- $I \subseteq N$ je neprázdná množina vstupních neuronů
- $O \subseteq N$ je neprázdná množina výstupních neuronů
- $w: C \rightarrow R$ je váhová funkce
- $t: N \rightarrow R$ je prahová funkce

(R označuje množinu reálných čísel)



Vrstevnaté neuronové sítě (2)

D: **Vrstevnatá síť (BP-síť)** ***B*** je neuronová síť s orientovaným acyklickým grafem spojů. Její množina neuronů je tvořena posloupností $l + 2$ vzájemně disjunktních podmnožin zvaných vrstvy.

- První vrstva zvaná **vstupní vrstva** je množinou všech vstupních neuronů ***B***, tyto neurony nemají v grafu spojů žádné předchůdce; jejich vstupní hodnota x je rovna jejich výstupní hodnotě.
- Poslední vrstva zvaná **výstupní vrstva** je množinou všech výstupních neuronů ***B***; tyto neurony nemají v grafu spojů žádné následníky.
- Všechny ostatní neurony zvané skryté neurony jsou obsaženy ve zbylých l vrstvách zvaných **skryté vrstvy**.

Algoritmus zpětného šíření (1)

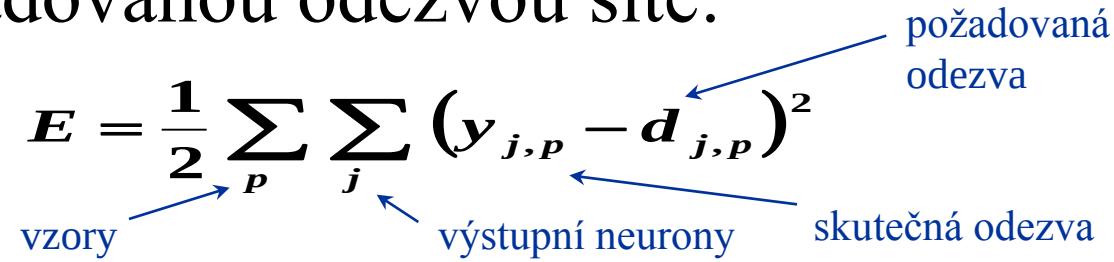
Cíl: najít takovou matici vah, která by zaručovala pro všechny vstupní vzory z trénovací množiny to, že skutečný výstup neuronové sítě bude stejný jako její požadovaný výstup

Přitom není specifikována ani skutečná, ani požadovaná aktivita skrytých neuronů.

- Pro konečnou množinu trénovacích vzorů lze celkovou chybu vyjádřit pomocí rozdílu mezi skutečným a požadovaným výstupem sítě u každého předloženého vzoru.

Algoritmus zpětného šíření (2)
Chybová funkce

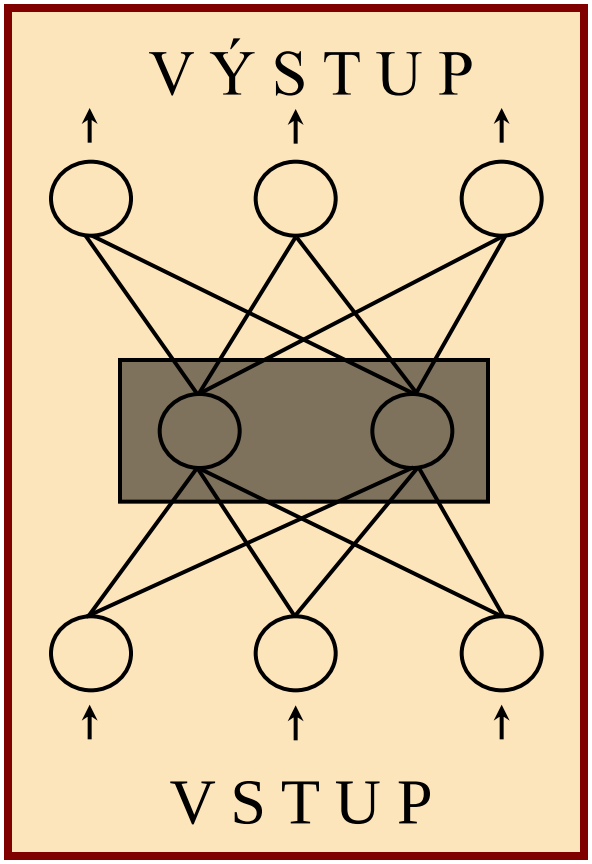
- vyjadřuje odchylku mezi skutečnou a požadovanou odezvou sítě:



- cílem procesu učení je minimalizovat tuto odchylku na dané trénovací množině

⇒ **algoritmus zpětného šíření** (Back-Propagation)

Vrstevnaté neuronové sítě (BP-sítě)



- výpočet skutečné odezvy pro daný vzor
- porovnání skutečné a požadované odezvy
- adaptace vah a prahů
  - proti gradientu chybové funkce
  - od výstupní vrstvy směrem ke vstupní

BP-sítě: adaptační pravidla (1)

Aktualizace synaptických vah proti směru gradientu:

$$w_{ij}(t+1) = w_{ij}(t) + \Delta_E w_{ij}(t)$$

$\Delta_E w_{ij}(t)$ ..... přírůstek váhy w_{ij} přispívající k minimalizaci E

chyba na výstupu sítě

$$\Delta_E w_{ij} = -\frac{\partial E}{\partial w_{ij}} = -\frac{\partial E}{\partial y_j}\frac{\partial y_j}{\partial \xi_j}\frac{\partial \xi_j}{\partial w_{ij}}$$

potenciál neuronu j

skutečný výstup

váha spoje

BP-sítě: adaptační pravidla (2)

Aktualizace synaptických vah pro výstupní vrstvu:

$$\Delta_E w_{ij} \cong -\frac{\partial E}{\partial w_{ij}} = -\frac{\partial E}{\partial y_j}\frac{\partial y_j}{\partial \xi_j}\frac{\partial \xi_j}{\partial w_{ij}} =$$

$$= -\frac{\partial E}{\partial y_j}\frac{\partial y_j}{\partial \xi_j}\frac{\partial}{\partial w_{ij}}\sum_{i'} w_{i'j}\, y_{i'} =$$

$$= -\frac{\partial E}{\partial y_j}\frac{\partial y_j}{\partial \xi_j} y_i = -\frac{\partial E}{\partial y_j} f'(\xi_j)\, y_i =$$

$$= -(y_j - d_j) f'(\xi_j) y_i = \delta_j\, y_i$$

BP-sítě: adaptační pravidla (3)

Aktualizace synaptických vah pro skryté vrstvy:

$$\Delta_E w_{ij} \cong -\frac{\partial E}{\partial w_{ij}} = -\left(\sum_k \frac{\partial E}{\partial \xi_k}\frac{\partial \xi_k}{\partial y_j}\right)\frac{\partial y_j}{\partial \xi_j} y_i =$$

$$= -\left(\sum_k \frac{\partial E}{\partial \xi_k}\frac{\partial}{\partial y_j}\sum_{j'} w_{j'k} y_{j'}\right)\frac{\partial y_j}{\partial \xi_j} y_i =$$

$$= -\left(\sum_k \frac{\partial E}{\partial \xi_k} w_{jk}\right)\frac{\partial y_j}{\partial \xi_j} y_i =$$

$$= \left(\sum_k \delta_k w_{jk}\right) f'(\xi_j) y_i = \delta_j y_i$$

BP-sítě: adaptační pravidla (4)

Výpočet derivace sigmoidální přenosové funkce podle:

$$f'(\xi_j) = \lambda y_j (1 - y_j)$$

Aktualizace vah podle:

$$w_{ij}(t+1) = w_{ij}(t) + \alpha \delta_j y_i + \alpha_m (w_{ij}(t) - w_{ij}(t-1))$$

- kde

$$\delta_j = \begin{cases} (d_j - y_j)\lambda y_j (1 - y_j) & \text{pro výstupní neuron} \\ \left(\sum_k \delta_k w_{jk}\right) \lambda y_j (1 - y_j) & \text{pro skrytý neuron} \end{cases}$$

Algoritmus zpětného šíření (1)

Krok 1: Zvolte náhodné hodnoty synaptických vah

Krok 2: Předložte nový trénovací vzor ve tvaru:

[vstup $\vec{x}$, požadovaný výstup $\vec{d}$]

Krok 3: Vypočtěte skutečný výstup

aktivita neuronů v každé vrstvě je dána pomocí:

$$y_j = f(\xi_j) = \frac{1}{1+e^{-\lambda \xi_j}} \quad , \text{ kde } \xi_j = \sum_i y_i w_{ij}$$

Takto vyjádřené aktivity pak tvoří vstup následující vrstvy.

Algoritmus zpětného šíření (2)

Krok 4: Aktualizace vah

Při úpravě synaptických vah postupujte směrem od výstupní vrstvy ke vstupní. Váhy se adaptují podle:

$$w_{ij}(t+1) = w_{ij}(t) + \alpha \delta_j y_i + \alpha_m \left(w_{ij}(t) - w_{ij}(t-1) \right)$$

$$\delta_j = \begin{cases} (d_j - y_j)\, \lambda\, y_j (1 - y_j) & \text{pro výstupní neuron} \\ \left(\sum_k \delta_k w_{jk} \right) \lambda\, y_j (1 - y_j) & \text{pro skrytý neuron} \end{cases}$$

$w_{ij}(t)$ ..... váha z neuronu i do neuronu j v čase t

α , α_m ..... parametr, resp. moment učení ($0 \leq \alpha , \alpha_m \leq 1$)

ξ_j , resp. δ_j .... potenciál, resp. chyba na neuronu j

k ..... index pro neurony z vrstvy nad neuronem j

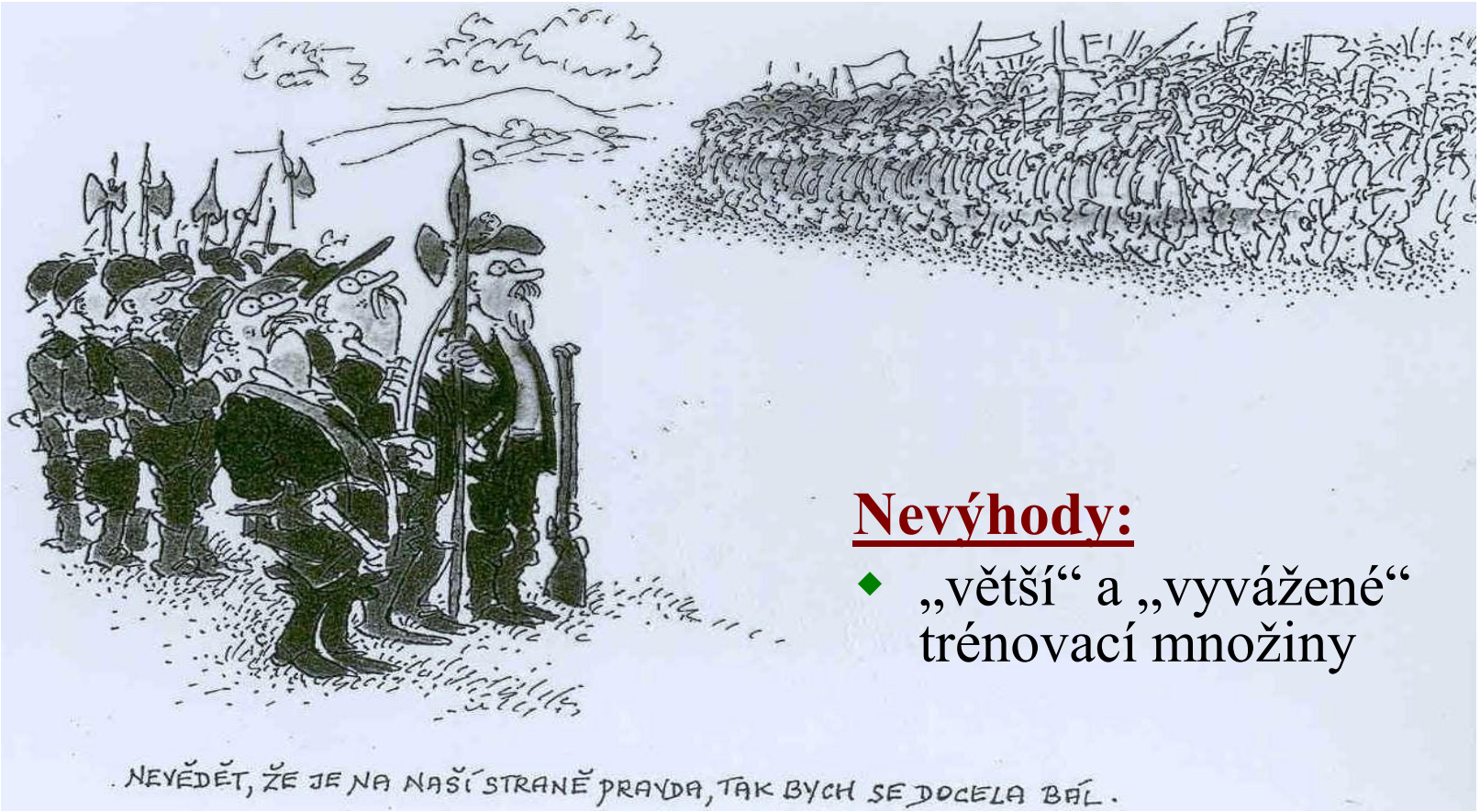
λ ..... strmost přenosové funkce

Krok 5: Přejdi ke Kroku 2

BP-sítě: analýza modelu

- Jeden z nejpoužívanějších modelů
- Jednoduchý algoritmus učení
- Poměrně dobré výsledky
- **Nevýhody:**
  - interní reprezentace znalostí - „černá skříňka“
  - chybová funkce (znalost požadovaných výstupů)
    - „větší“ a „vyvážené“ trénovací množiny
    - kontrola výstupů sítě při rozpoznávání
  - počet neuronů a generalizační schopnosti sítě
    - prořezávání a doučování

BP-sítě: analýza modelu



Nevýhody:

- „větší“ a „vyvážené“ trénovací množiny

Algoritmus zpětného šíření a urychlení učení (1)

- **Standardní algoritmus zpětného šíření je poměrně pomalý**
  → špatná volba počátečních parametrů ho může ještě zpomalit
- **Problém učení umělých neuronových sítí je obecně NP-úplný**
  → výpočetní náročnost roste exponenciálně s počtem proměnných
  → přesto dosahuje standardní algoritmus zpětného šíření často lepších výsledků než mnohé „rychlé algoritmy“
    - hlavně v případě, že má úloha realistickou úroveň složitosti a velikost trénovací množiny přesáhne kritickou mez

Algoritmus zpětného šíření a urychlení učení (2)

Algoritmy s cílem urychlit proces učení:

- **Zachovávající pevnou topologii sítě**
- **Modulární sítě**
  - Výrazně zlepšují aproximační schopnosti neuronových sítí
- **Adaptace parametrů** (vah, prahů apod.) **i topologie sítě**

Algoritmus zpětného šíření: volba počátečních vah (1)

- **Váhy by měly být rovnoměrně rozdělené na intervalu** $< -\alpha_m , \alpha_m >$
- **Nulová střední hodnota**
  - vede na očekávanou nulovou hodnotu celkového vstupu každého neuronu sítě (potenciálu)
- **Maximální hodnota derivace sigmoidální přenosové funkce pro nulu** ***(~ 0.25)***
  - Větší hodnoty šířené chyby
  - Výraznější změny vah na začátku učení

Algoritmus zpětného šíření: volba počátečních vah (2)

Problém:

- **Příliš malé váhy „paralyzují učení“**
  - Chyba šířená z výstupní vrstvy směrem do skrytých vrstev je příliš malá
- **Příliš velké váhy vedou k „saturaci“ neuronů a pomalému učení** (v plochých zónách chybové funkce

→ **Proces učení je pak ukončen v suboptimálním lokálním minimu**

× **Správná volba počátečních vah může riziko uvíznutí v lokálním minimu výrazně snížit**

Algoritmus zpětného šíření: volba počátečních vah (3)

Omezení lokálních minim:

~ inicializace malými náhodnými hodnotami

Motivace:

- **Malé hodnoty vah**
  - Velké absolutní hodnoty vah způsobují saturaci skrytých neuronů (hodně aktivní nebo naopak hodně pasivní pro všechny trénovací vzory) → nelze je dále učit (derivace přenosové funkce – sigmoidy – je téměř nulová)
- **Náhodné hodnoty vah**
  - Cílem je „omezit symetrii“ → skryté neurony by neměly mít navzájem podobnou funkci

Algoritmus zpětného šíření: volba počátečních vah (4)

IDEA:

- **Potenciál skrytého neuronu je dán pomocí:**

$$\xi = w_0 + w_1 x_1 + \ldots + w_n x_n$$

x_i … aktivita i-tého neuronu z předchozí vrstvy

w_i …váha od i-tého neuronu z předchozí vrstvy

- **Střední hodnota potenciálu skrytého neuronu:**

$$E\{\xi_j\} = E\left\{\sum_{i=0}^{n} w_{ij} x_i\right\} = \sum_{i=0}^{n} E\{w_{ij}\} E\{x_i\} = 0$$

  - váhy jsou nezávislé na vzorech
  - váhy jsou náhodné proměnné se střední hodnotou 0

Algoritmus zpětného šíření: volba počátečních vah (5)

IDEA - pokračování:

- **Rozptyl potenciálu ξ je dán pomocí:**

$$\sigma_\xi^2 = E\{(\xi_j)^2\} - E^2\{(\xi_j)\} = E\left\{\left(\sum_{i=0}^{n} w_{ij}\, x_i\right)^2\right\} - 0 =$$

$= 0$

$$= \sum_{i,k=0}^{n} E\{(w_{ij} w_{kj}\, x_i\, x_k)\} =$$

vzájemná nezávislost pro všechna j

$$= \sum_{i=0}^{n} E\{(w_{ij})^2\}\, E\{(x_i)^2\}$$

Algoritmus zpětného šíření: volba počátečních vah (5)

IDEA - pokračování:

- **Další předpoklad:** trénovací vzory jsou normalizované a leží v intervalu $< 0 , 1 >$. Potom:

$$E\left\{(x_i)^2\right\} = \int_0^1 x_i^2 \, d\,x \; = \; \frac{x^3}{3}\Big|_0^1 \; = \; \frac{1}{3}$$

- jsou-li váhy skrytých neuronů také náhodné proměnné se střední hodnotou 0 rovnoměrně rozložené v intervalu $[-a,a]$. Potom:

$$E\left\{(w_{ij})^2\right\} \; = \; \int_{-a}^{a} w_{ij}^2 \, d\,w_{ij} \; = \; \frac{w_{ij}^3}{3}\Big|_{-a}^{a} \; = \; \frac{2a^3}{3}$$

- N … počet vah vedoucích k danému neuronu

Algoritmus zpětného šíření: volba počátečních vah (6)

IDEA - pokračování**:**

- **Směrodatná odchylka tedy bude odpovídat:**

$$A = \sigma_\xi = \sqrt{N}\,\frac{a}{3}\sqrt{2a} \qquad \left(\rightarrow\ a\sqrt{2a} = A\frac{3}{\sqrt{N}}\right)$$

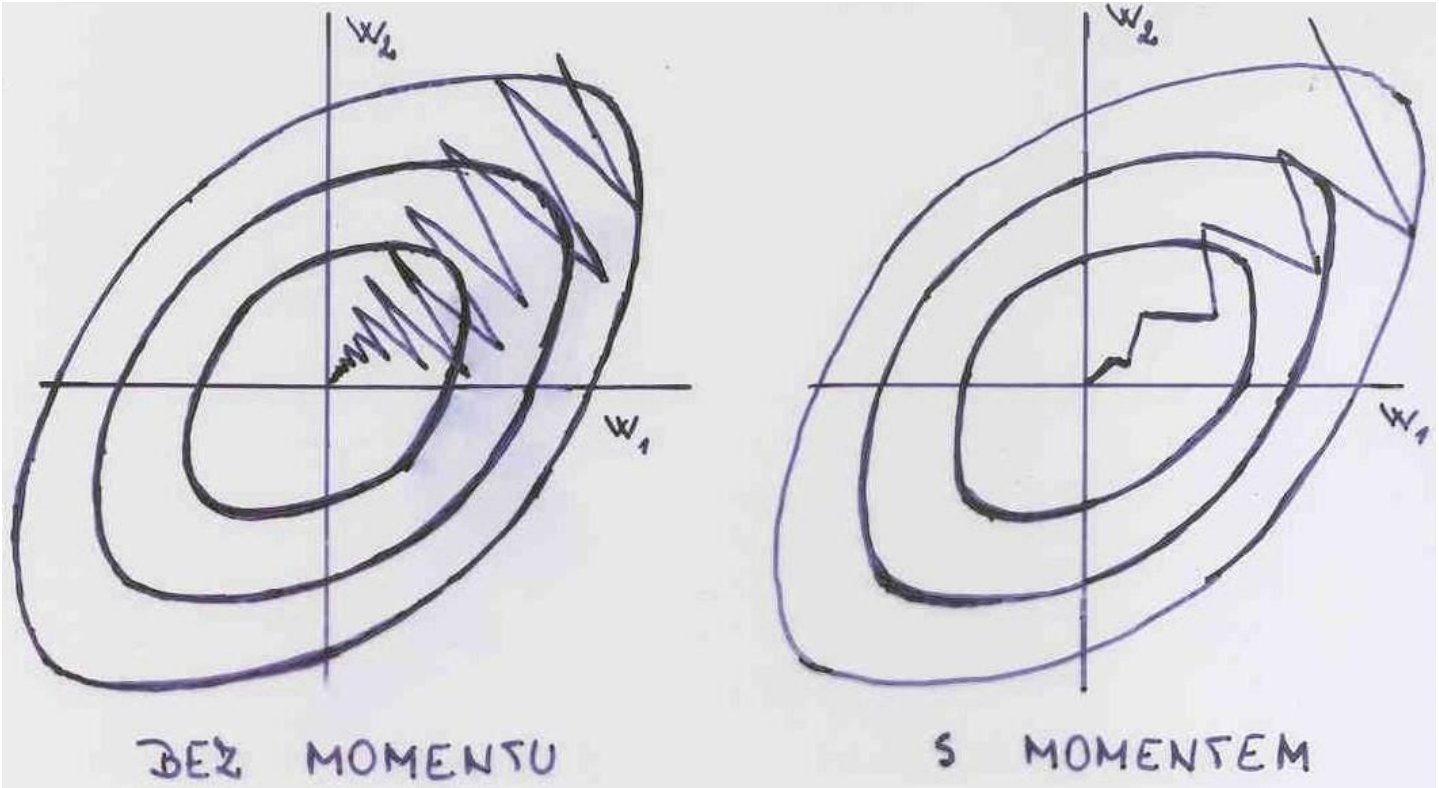
- **Potenciál neuronu by měla být náhodná proměnná se směrodatnou odchylkou** ***A*** (navíc nezávislou na počtu vah vedoucích do tohoto neuronu);
- **Počáteční váhy by měly být voleny (zhruba) z intervalu:**

$$\left[-\frac{3}{\sqrt{N}}\cdot 0.8\cdot A, \frac{3}{\sqrt{N}}\cdot 0.8\cdot A\right], \quad \text{resp.} \left[-\frac{1.65}{\sqrt[3]{N}}\cdot\sqrt[3]{A^2}, \frac{1.65}{\sqrt[3]{N}}\cdot\sqrt[3]{A^2}\right]$$

- speciálně pro ***A = 1*** velký gradient (tj. rychlé učení)

Algoritmus zpětného šíření s momentem (1)

Minimalizace chybové funkce pomocí gradientní metody



Algoritmus zpětného šíření s momentem (2)

- Pokud je pro danou úlohu minimum chybové funkce v „úzkém údolí," může vést sledování gradientu k náhlým (častým a velkým) oscilacím během učení
- **Řešení:** **zavést člen odpovídající momentu**
  - Kromě aktuální hodnoty gradientu chybové funkce je třeba vzít v úvahu i předchozí změny parametrů (vah)

    → **Setrvačnost ~ měla by pomoci zamezit extrémním oscilacím v „úzkých údolích chybové funkce"**

Algoritmus zpětného šíření s momentem (3)

- Pro síť s n různými vahami $w_1, \ldots, w_n$ je změna váhy w_k v kroku $i + 1$ dána vztahem

$$\Delta w_k(i+1) = -\alpha \frac{\partial E}{\partial w_k(i)} + \alpha_m \Delta w_k(i) =$$

$$= -\alpha \frac{\partial E}{\partial w_k(i)} + \alpha_m \left(w_k(i) - w_k(i-1) \right)$$

kde: α ….. parametr učení

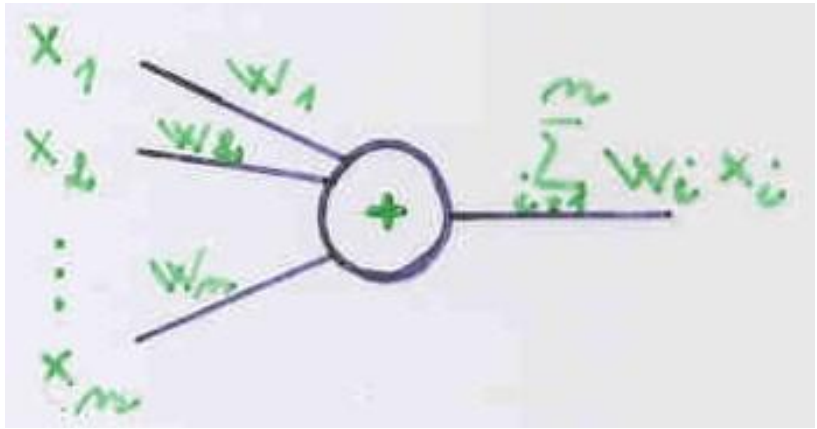
α_m … moment učení

Algoritmus zpětného šíření s momentem (4)

- Chceme-li urychlit konvergenci k minimu chybové funkce:
  - Zvětšit parametr učení až k jisté optimální hodnotě α, která by však stále ještě vedla ke konvergenci v procesu učení
  - Zavedení momentu učení umožňuje oslabit oscilace v procesu učení
- Optimální hodnoty α a α_m závisí na charakteru dané úlohy

Algoritmus zpětného šíření s momentem (5)

PŘÍKLAD: Lineární přenosová funkce, ***p*** vzorů



X ..... matice $(p \times n)$; $\vec{d}$ ....vektor

$$X = \begin{pmatrix} x_1^{(1)} & \dots & x_n^{(1)} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ x_1^{(p)} & \dots & x_n^{(p)} \end{pmatrix} \quad ; \quad \vec{d} = \begin{pmatrix} d^{(1)} \\ \vdots \\ d^{(p)} \end{pmatrix}$$

→ MINIMALIZACE ***E*** :

$$E = \left\| X\vec{w} - \vec{d} \right\|^2 = \left(X\vec{w} - \vec{d} \right)^T \left(X\vec{w} - \vec{d} \right) = \vec{w}^T \left(X^T X \right) \vec{w} - 2\vec{d}^T X\vec{w} + \vec{d}^T \vec{d}$$

Algoritmus zpětného šíření s momentem (6)

- E je kvadratická funkce → pomocí gradientní metody lze nalézt minimum

  Interpretace: E představuje paraboloid v n – rozměrném prostoru; jeho tvar je určen vlastními čísly korelační matice $X^T X$

→ Gradientní metoda dává nejlepší výsledky pro „nejdůležitější“ osy „stejné délky“ (principal axes)

→ Pokud se „délky“ os hodně liší, vede gradientní metoda k oscilacím

Algoritmus zpětného šíření s momentem (7)

- Oscilace pak lze omezit malým α a větším momentem učení α_m
  - × **příliš malé hodnoty α**
    → **nebezpečí lokálních minim**
  - × **příliš velké hodnoty α**
    → **nebezpečí oscilací**

Algoritmus zpětného šíření s momentem (8)

V nelineárním případě je pro oblasti vzdálené od lokálního minima gradient chybové funkce téměř nulový – možnost výskytu oscilací

→ v takovém případě může pomoci větší parametr učení
→ návrat ke „konvexním“ oblastem chybové funkce

Řešení:

- **Adaptivní parametr učení**
- **Předzpracování trénovací množiny**
  - dekorelace vstupních vzorů (PCA, …)

Algoritmus zpětného šíření: strategie pro urychlení procesu učení (1)

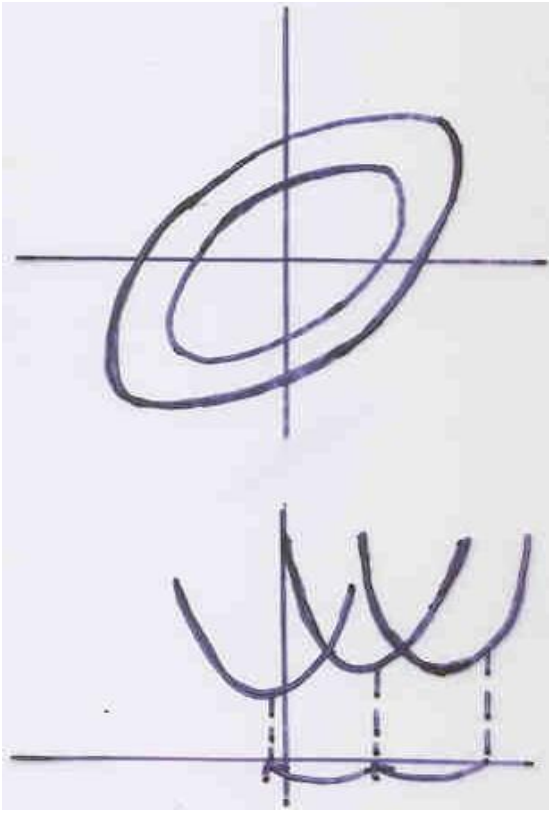
1. **Adaptivní parametr učení:**

   lokální parametr učení α_i pro každou váhu w_i

   adaptace vah podle: $\Delta w_i = -\alpha_i \frac{\partial E}{\partial w_i}$

- **Varianty algoritmů:**
  - Silva & Almeida
  - Delta-bar-delta
  - Super SAB

Algoritmus Silvy & Almeidy (1)



Předpoklad: síť má n vah

- Kvadratická chybová funkce:

$$c_1^2 w_1^2 + c_2^2 w_2^2 + \ldots + c_n^2 w_n^2 + \sum_{i \neq j} d_{ij} w_i w_j + C$$

- Krok v i –tém směru minimalizuje

$$c_i^2 w_i^2 + k_1 w_i + k_2$$

k_1, k_2 jsou konstanty, které závisí na hodnotě „zmrazených“ proměnných v daném iteračním bodě (c_i udává zakřivení paraboly)

Algoritmus Silvy & Almeidy (2)

Heuristika:

- URYCHLUJ, pokud se za poslední dvě po sobě jdoucí iterace nezměnilo znaménko parciální derivace
- ZPOMALUJ, pokud se znaménko změnilo

$\Delta_i E^{(k)}$ … parciální derivace chybové funkce podle váhy w_i v k –té iteraci

$\alpha_i^{(0)}$ … počáteční hodnota parametru učení $(i = 1, \ldots, n)$ inicializace malými náhodnými hodnotami

Algoritmus Silvy & Almeidy (3)

- V ***k*** –té iteraci se hodnota parametru učení aktualizuje pro další krok (pro každou váhu) podle:

$$\alpha_i^{(k+1)} = \begin{cases} \alpha_i^{(k)} u \ , & \text{jestliže} \quad \nabla_i E^{(k)} \cdot \nabla_i E^{(k-1)} > 0 \\ \alpha_i^{(k)} d \ , & \text{jestliže} \quad \nabla_i E^{(k)} \cdot \nabla_i E^{(k-1)} < 0 \end{cases}$$

- Konstanty ***u*** a ***d*** jsou pevně zvolené tak, že ***u > 1*** a ***d < 1***

- Adaptace vah podle: $\Delta^{(k)} w_i = -\alpha_i^{(k)} \nabla_i E^{(k)}$

Algoritmus Silvy & Almeidy (4)

Problémy:

- Parametr učení roste i klesá exponenciálně vzhledem k ***u*** a ***d***

→ **Problémy mohou nastat, jestliže po sobě následuje mnoho urychlovacích kroků**

Algoritmus Delta-bar-delta

- Větší důraz na urychlování (především z malých počátečních vah)
- ***k*** –tá iterace: $$\alpha_i^{(k+1)} = \begin{cases} \alpha_i^{(k)} + u \ , & \text{jestliže} \quad \nabla_i E^{(k)} \cdot \delta_i^{(k-1)} > 0 \\ \alpha_i^{(k)} \cdot d \ , & \text{jestliže} \quad \nabla_i E^{(k)} \cdot \delta_i^{(k-1)} < 0 \\ \alpha_i^{(k)} & \text{jinak} \end{cases}$$

  u, d … předem zvolené pevné konstanty

  $$\delta_i^{(k)} = (1-\Phi)\nabla_i E^{(k)} + \Phi\, \delta_i^{(k-1)}, \quad \text{kde } \Phi \text{ je konstanta}$$

- Aktualizace vah bez momentu: $$\Delta^{(k)} w_i = -\alpha_i^{(k)} \nabla_i E^{(k)}$$

Algoritmus Super SAB

- **Adaptivní akcelerační strategie** pro algoritmus zpětného šíření
  - Řádově rychlejší než původní algoritmus zpětného šíření
  - Poměrně stabilní
  - Robustní vzhledem k volbě počátečních parametrů
- **Využívá momentu:**
  - Urychlení konvergence v plochých oblastech váhového prostoru
  - V příkrých oblastech váhového prostoru moment tlumí oscilace způsobené změnou znaménka gradientu

Super SAB – algoritmus učení (1)

α^+ …….. multiplikativní konstanta pro zvětšování parametru učení ($\alpha^+ = 1.05$)

α^- ……... multiplikativní konstanta pro zmenšování parametru učení ($\alpha^- = 2$)

α_{START} … počáteční hodnota parametru α_{ij}, $\forall i, j$ ($\alpha_{START} = 1.2$)

α_m …….. moment ($\alpha_m = 0.3$)

Krok 1: nastav všechna α_{ij} na počáteční hodnotu α_{START}

Krok 2: proveď Krok (t) algoritmu zpětného šíření s momentem

Krok 3: pokud se nezměnilo znaménko derivace (podle w_{ij}), zvětši parametr učení (proveď $\forall w_{ij}$) : $\alpha_{ij}(t+1) = \alpha^+ \cdot \alpha_{ij}(t+1)$

Super SAB – algoritmus učení (1)

Krok 4: pokud se změnilo znaménko derivace (podle w_{ij}):

- anuluj předchozí změnu vah (která způsobila změnu znaménka gradientu): $\Delta w_{ij}(t+1) = -\Delta w_{ij}(t)$
- zmenši parametr učení: $\alpha_{ij}(t+1) = \alpha_{ij}(t) / \alpha^{-}$
- a polož: $\Delta w_{ij}(t+1) = 0$

(při dalším kroku učení se pak nebude brát v úvahu změna z předchozího kroku)

Krok 5: přejdi ke Kroku 2

Algoritmus zpětného šíření: strategie pro urychlení procesu učení (2)

2. Algoritmy druhého řádu:

- berou v úvahu více informací o tvaru chybové funkce než jen gradient → zakřivení chybové funkce
- metody 2. řádu používají kvadratickou aproximaci chybové funkce

$\vec{w} = (w_1, \ldots, w_n)$ … vektor všech vah sítě
$E(\vec{w})$ …… chybová funkce

→ Taylorova řada pro aproximaci chybové funkce E:

$$E(\vec{w} + \vec{h}) \approx E(\vec{w}) + \nabla E(\vec{w})^T \vec{h} + \frac{1}{2} \vec{h}^T \nabla^2 E(\vec{w}) \vec{h}$$

Algoritmy druhého řádu (2)

$\nabla^2 E(\vec{w})$ ..... Hessovská matice $(n \times n)$ parciálních derivací druhého řádu:

$$\nabla^2 E(\vec{w}) = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 E(\vec{w})}{\partial w_1^2} & \frac{\partial^2 E(\vec{w})}{\partial w_1 \partial w_2} & \cdots & \frac{\partial^2 E(\vec{w})}{\partial w_1 \partial w_n} \\ \frac{\partial^2 E(\vec{w})}{\partial w_2 \partial w_1} & \frac{\partial^2 E(\vec{w})}{\partial w_2^2} & \cdots & \frac{\partial^2 E(\vec{w})}{\partial w_2 \partial w_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 E(\vec{w})}{\partial w_n \partial w_1} & \frac{\partial^2 E(\vec{w})}{\partial w_n \partial w_2} & \cdots & \frac{\partial^2 E(\vec{w})}{\partial w_n^2} \end{pmatrix}$$

Algoritmy druhého řádu (3)

→ Gradient chybové funkce (zderivováním $\nabla E(\vec{w}+\vec{h})$):

$$\nabla E(\vec{w}+\vec{h})^T \approx \nabla E(\vec{w})^T + \vec{h}^T \nabla^2 E(\vec{w})$$

→ Gradient by měl být nulový (hledá se minimum E):

$$\vec{h} = -\left(\nabla^2 E(\vec{w})\right)^{-1} \nabla E(\vec{w})$$

==> **Newtonovské metody:**

- **Pracují iterativně**
- **Aktualizace vah v k – té iteraci podle:**

$$\vec{w}^{(k+1)} = \vec{w}^{(k)} - \left(\nabla^2 E(\vec{w})\right)^{-1} \nabla E(\vec{w})$$

- **Rychlá konvergence**
- × **Problémem může být výpočet inverzní Hessovské matice**

Algoritmy druhého řádu (4)

Pseudonewtonovské metody:

- Pracují se „zjednodušenou aproximací“ Hessovské matice
- V úvahu se berou pouze prvky na diagonále: $\left(\frac{\partial^2 E(\vec{w})}{\partial w_i^2} \right)$
- Ostatní prvky Hessovské matice jsou vynulovány
- Adaptace vah podle:

$$w_i^{(k+1)} = w_i^{(k)} - \frac{\nabla_i E(\vec{w})}{\frac{\partial^2 E(\vec{w})}{\partial w_i^2}}$$

Algoritmy druhého řádu (5)

Pseudonewtonovské metody:

- Odpadá potřebná inverze Hessovské matice
- Metody „dobře fungují,“ pokud má chybová funkce kvadratický tvar, v opačném případě však mohou nastat problémy
- **Varianty algoritmů:**
  - Quickprop
  - Levenberg-Marquardtův algritmus

Algoritmus Quickprop (1)

- Bere v úvahu i informace 2. řádu
  - × Minimalizační kroky provádí pouze v jednom rozměru
  - → Informace o zakřivení chybové funkce ve směru adaptace se získává ze současné a předchozí parciální derivace chybové funkce
- Nezávislá optimalizace pro každou váhu pomocí kvadratické jednorozměrné aproximace chybové funkce

Algoritmus Quickprop (2)

- Aktualizace vah v ***k*** – té iteraci podle:

$$\vec{w}_i^{(k+1)} = \vec{w}_i^{(k)} + \Delta^{(k)} w_i \quad , \text{ kde}$$

$$\Delta^{(k)} w_i = \Delta^{(k-1)} w_i \cdot \frac{\nabla_i E^{(k)}}{\nabla_i E^{(k-1)} - \nabla_i E^{(k)}}$$

Předpoklad: chybová funkce byla spočtena v kroku ***(k – 1)*** a v kroku ***k*** , a to pro váhy s rozdílem $\Delta^{(k-1)} w_i$ - buď standardním algoritmem zpětného šíření nebo pomocí algoritmu Quickprop

Algoritmus Quickprop (3)

- Aktualizaci vah lze psát i jako:

$$\Delta^{(k)} w_i = - \frac{\nabla_i E^{(k)}}{\frac{\nabla_i E^{(k)} - \nabla_i E^{(k-1)}}{\Delta^{(k-1)} w_i}}$$

- Jmenovatel odpovídá diskrétní aproximaci parciální derivace 2. řádu $\partial^2 E(\vec{w}) / \partial w_i^2$
- Quickprop ~ pseudonewtonovská diskrétní metoda, která používá tzv. „ **SEKANTOVÝ KROK** “

Levenberg-Marquardtův algoritmus

- rychlejší a přesnější v oblasti minima chybové funkce
- kombinace gradientní a Newtonovy metody

$$\vec{w}_{\min} = \vec{w}_0 - \left(H + \lambda I\right)^{-1} \cdot \vec{g}$$

gradient

Hessovská matice

- pro 1 výstup: $g_i = \frac{\partial e}{\partial w_i} = 2\left(y - d\right)\frac{\partial y}{\partial w_i}$

$$\frac{\partial^2 e}{\partial w_i \partial w_j} = 2\left[\frac{\partial y}{\partial w_i}\frac{\partial y}{\partial w_j} + \left(y-d\right)\frac{\partial^2 y}{\partial w_i \partial w_j}\right]$$

Algoritmus zpětného šíření: strategie pro urychlení procesu učení (3)

3. **Relaxační metody** – perturbace vah:

- V každé iteraci se počítá diskrétní aproximace gradientu porovnáním chybové funkce pro výchozí váhy $E(\vec{w})$ a chybové funkce pro mírně změněné váhy $\vec{w}'$ (k váze w_i byla přičtena malá perturbace β) – $E(\vec{w}')$
- Aktualizace vah pomocí: $\Delta w_i = -\alpha \frac{E(\vec{w}') - E(\vec{w})}{\beta}$
- Aktualizace se iterativně opakuje pro vždy náhodně zvolenou váhu

Relaxační metody (2)

Alternativa s rychlejší konvergencí:

- Perturbace výstupu ***i*** – tého neuronu o_i o Δo_i
- Vypočítá se rozdíl $E - E'$
- Pokud je rozdíl kladný ***(> 0),*** lze nové chyby E' dosáhnout výstupem $o_i + \Delta o_i$ pro ***i*** – tý neuron
- V případě sigmoidální přenosové funkce, lze požadovaný potenciál neuronu ***i*** určit pomocí:

$$\sum_{k=1}^{m} w'_k \, x_k \quad = \quad s^{-1}\left(o_i \; + \; \Delta o_i \right)$$

$$\left(\text{pro } y = s(\xi) = \frac{1}{1+e^{-\xi}} \quad \text{je} \quad \xi = s^{-1}(y) = \ln \frac{y}{1-y} \right)$$

Relaxační metody (3)

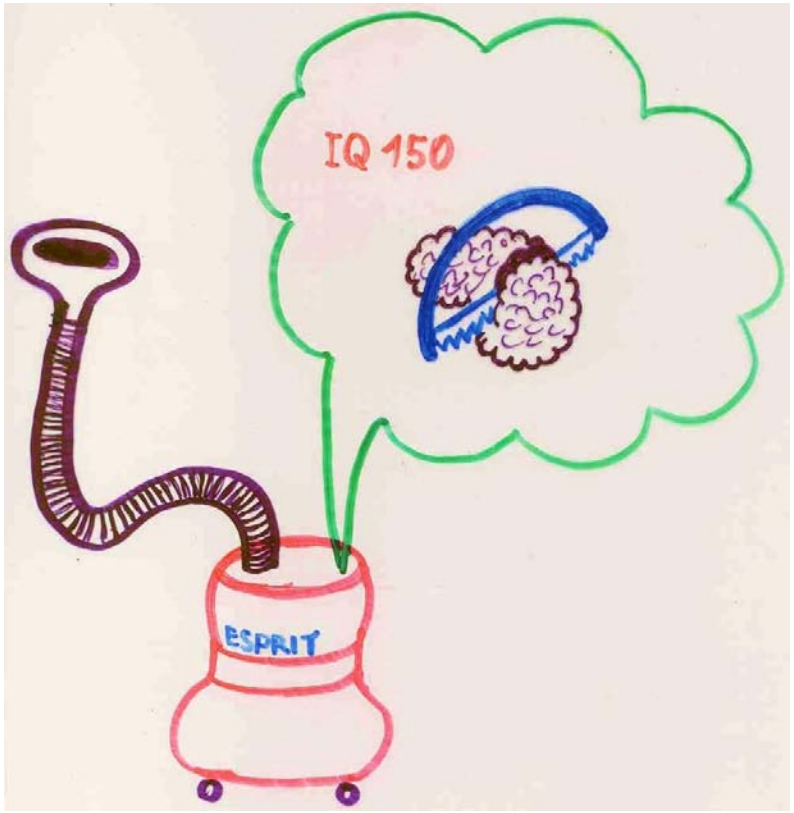
- Pokud byl předchozí potenciál $\sum_{k=1}^{m} w_k \; x_k$, jsou nové váhy dány pomocí:

$$w'_k = w_k \cdot \frac{s^{-1}\left(o_i + \Delta o_i \right)}{\sum_{k=1}^{m} w_k \; x_k}$$

- Váhy se adaptují proporcionálně ke své velikosti: $\frac{w'_k}{\xi'} = \frac{w_k}{\xi}$

  (to lze poněkud omezit zavedením stochastických faktorů anebo kombinací s metodou pro perturbaci vah)

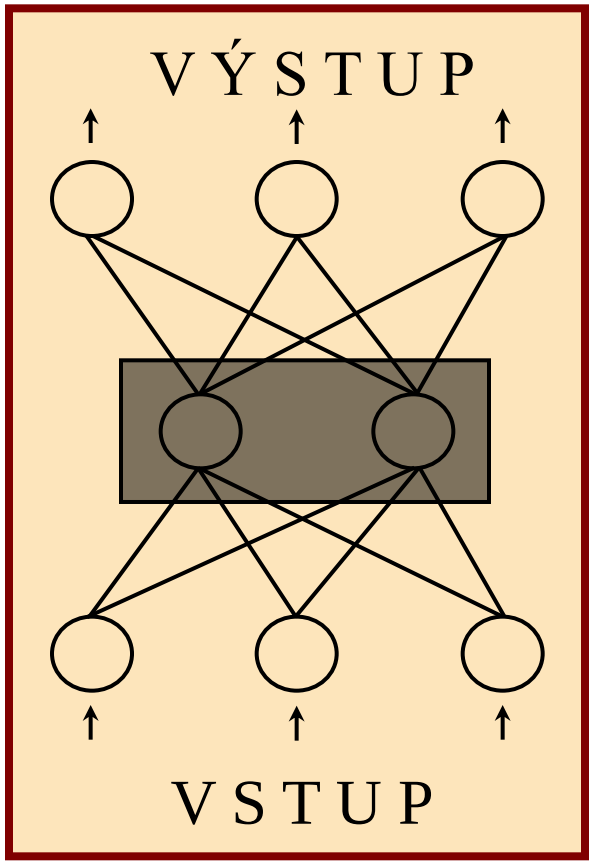
Interní reprezentace znalostí



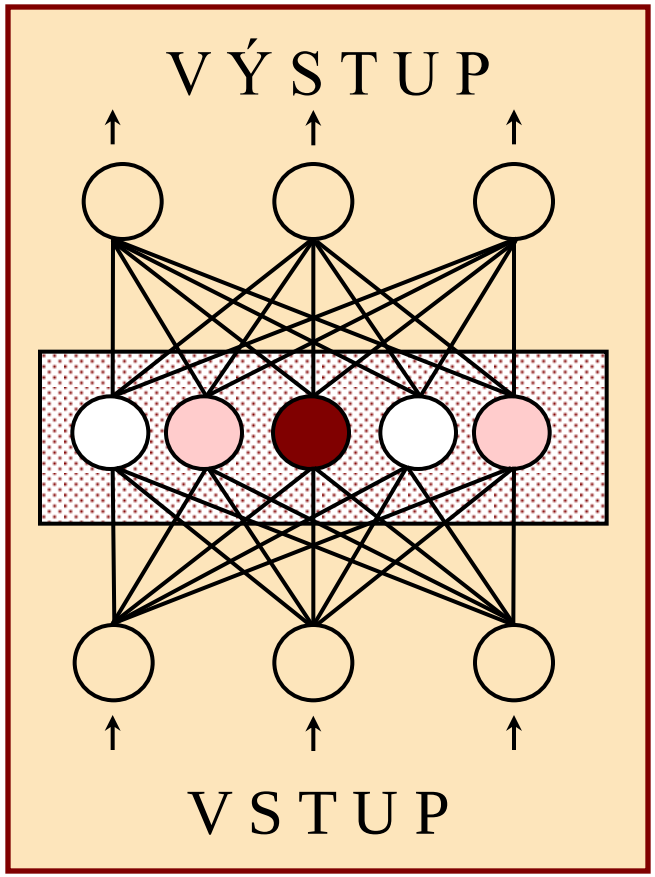
- **počet neuronů a generalizační schopnosti sítě**

  → **prořezávání a doučování**

Interní reprezentace znalostí



Kondenzovaná interní reprezentace



- interpretace aktivity skrytých neuronů:
  - 1 ⟷ aktivní ⟷ ANO
  - 0 ⟷ pasivní ⟷ NE
  - $\frac{1}{2}$ ⟷ tichý ⟷ „nelze rozhodnout“
- průhledná struktura sítě
- detekce nadbytečných neuronů a prořezávání
- **lepší generalizace**

Kondenzovaná interní reprezentace

D: Pro vrstevnatou síť ***B*** zpracovávající vstupní vzor $\vec{x}$:

- Skrytý neuron s vahami $(w_1, \ldots, w_n)$, prahem ϑ, vstupním vzorem $\vec{z}$ a přenosovou funkcí $f[\vec{w}, \vartheta](\vec{z})$ vytváří **reprezentaci** r : $r = y = f[\vec{w}, \vartheta](\vec{z})$
- Vektor $\vec{r}$ reprezentací vytvořených vrstvou skrytých neuronů se nazývá **interní reprezentace** $\vec{x}$

Kondenzovaná interní reprezentace

D: Pro vrstevnatou síť ***B***:

- Interní reprezentace $\vec{r} = (r_1, \ldots, r_m)$ je **binární**, jestliže $r_i \in \{0,1\}; \quad 1 \leq i \leq m$
- Interní reprezentace $\vec{r} = (r_1, \ldots, r_m)$ je **kondenzovaná**, jestliže $r_i \in \{0, 0.5, 1\}; \quad 1 \leq i \leq m$

Požadavky na vynucování kondenzované interní reprezentace

- formulace „požadovaných vlastností“ ve formě cílové funkce:

$$G = E + c_s F$$

standardní chybová funkce

reprezentační chybová funkce

velikost vlivu F na G

- lokální minima reprezentační chybové funkce odpovídají aktivním, pasivním a tichým stavům:

$$F = \sum_p \sum_h y_{h,p}^s \left(1 - y_{h,p}\right)^s \left(y_{h,p} - 0.5\right)^2$$

vzory

skryté neurony

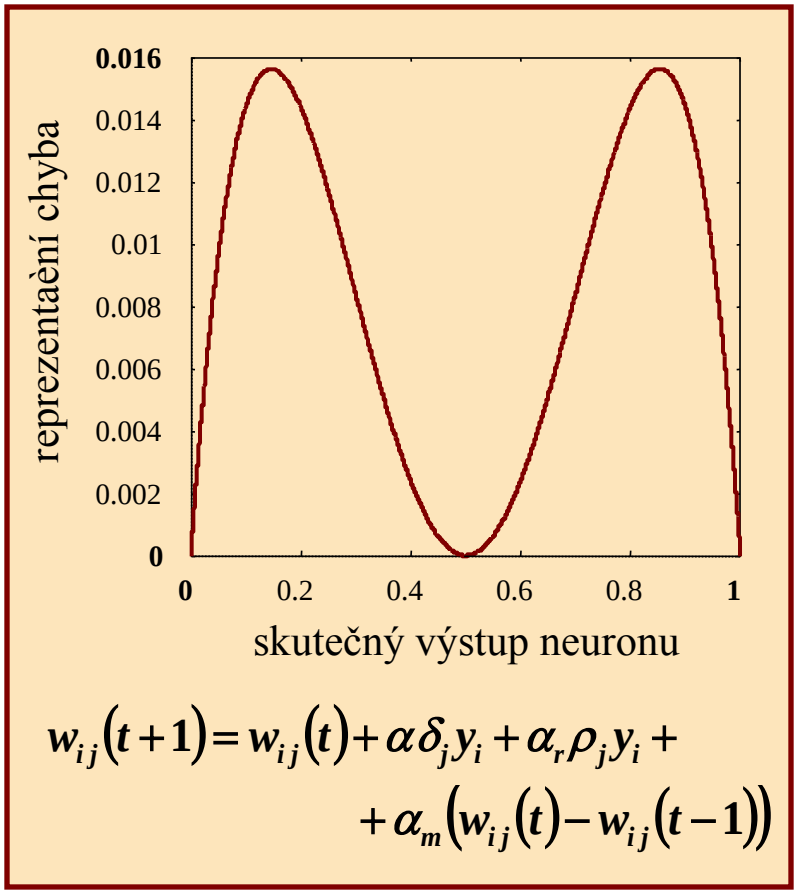
pasivní stav

aktivní stav

tvar F

tichý stav

Vliv parametrů na vytváření kondenzované interní reprezentace



$$w_{ij}(t+1) = w_{ij}(t) + \alpha\delta_j y_i + \alpha_r \rho_j y_i + \\ + \alpha_m \left(w_{ij}(t) - w_{ij}(t-1)\right)$$

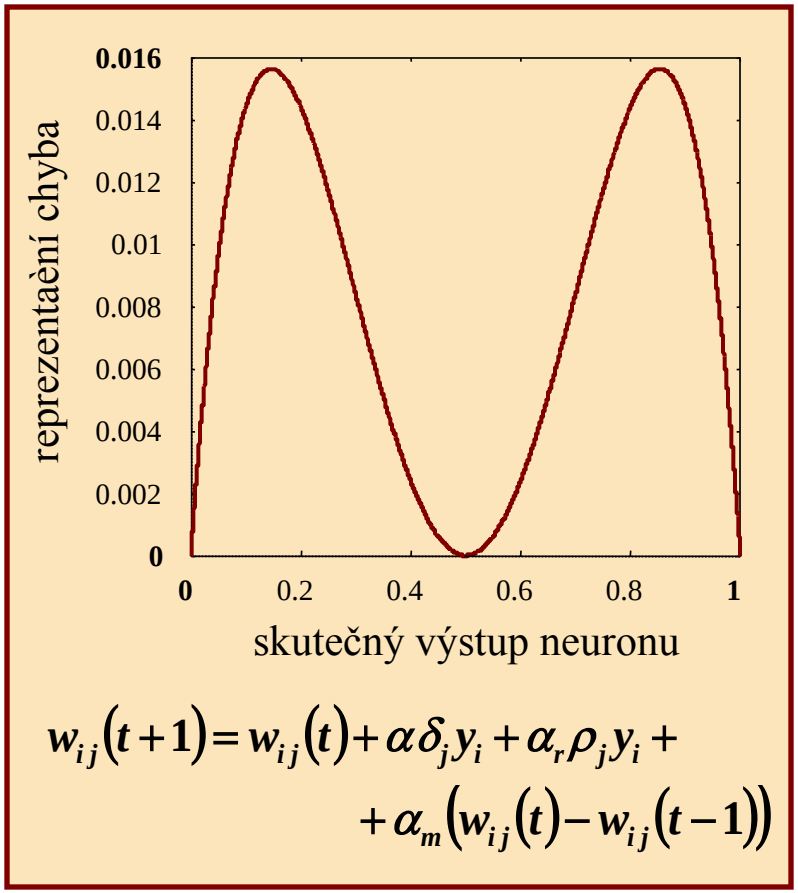
- pomalejší vytváření interní reprezentace a požadovaná funkce sítě
- stabilita vytvářené interní reprezentace a optimální architektura sítě
- tvar reprezentační chybové funkce, rychlost vytváření interní reprezentace a její forma
- časová náročnost při adaptaci vah

Chybový člen pro posilování kondenzované interní reprezentace

Kondenzovaná interní reprezentace ($y_j^s\,(1-y_j)^s\,(y_j - 0.5)^2$):

$$\rho_j = \begin{cases} 0 & \text{pro výstupní neurony} \\ -\left[2(s+1)y_j\,(1-y_j) - \frac{s}{2}\right] \cdot y_j^s\,(1-y_j)^s\,(y_j - 0.5) & \text{pro neurony z nejvyšší skryté vrstvy} \\ \left(\sum_k \rho_k w_{jk}\right) y_j (1-y_j) & \text{pro ostatní skryté neurony} \end{cases}$$

Vliv parametrů na vytváření kondenzované interní reprezentace

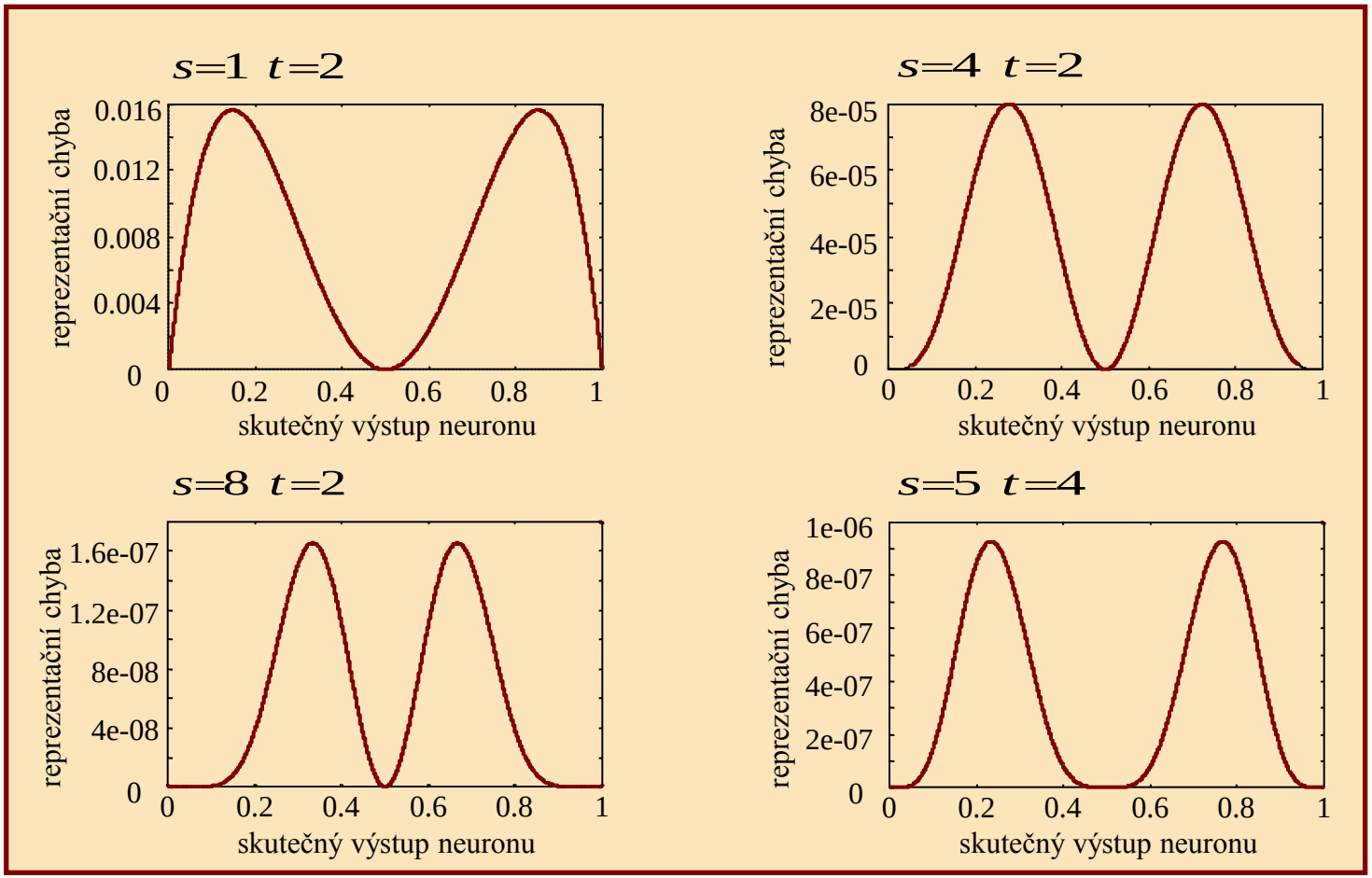


$$w_{ij}(t+1) = w_{ij}(t) + \alpha\delta_j y_i + \alpha_r \rho_j y_i + \\ + \alpha_m \left(w_{ij}(t) - w_{ij}(t-1)\right)$$

- pomalejší vytváření interní reprezentace a požadovaná funkce sítě
- stabilita vytvářené interní reprezentace a optimální architektura sítě
- tvar reprezentační chybové funkce, rychlost vytváření interní reprezentace a její forma
- časová náročnost při adaptaci vah

Tvar reprezentační chybové funkce

$$F = y^s(1-y)^s(y-0.5)^t$$



Chybový člen pro posilování binární interní reprezentace

Binární interní reprezentace ($y_j (1 - y_j)$):

$$\rho_j = \begin{cases} 0 & \text{pro výstupní neurony} \\ -(1-2y_j)\, y_j\,(1-y_j) & \text{pro neurony z nejvyšší skryté vrstvy} \\ \left(\sum_k \rho_k w_{jk}\right) y_j (1-y_j) & \text{pro ostatní skryté neurony} \end{cases}$$

Jednoznačná interní prezentace

- Hodně odlišným výstupům by měly odpovídat hodně odlišné interní reprezentace
- Formulace požadavků ve formě modifikované cílové funkce: $G = E + F + H$
- Kritérium pro jednoznačnost IR:

$$H = -\frac{1}{2}\sum_{p}\sum_{q\neq p}\sum_{j}\sum_{o}\left(d_{o,p} - d_{o,q}\right)^2\left(y_{j,p} - y_{j,q}\right)^2$$

vzory
skryté neurony
výst.
neurony
= konst. pro dané p
= konst. pro dané p
= konst. pro dané p

Prořezávání podle interní reprezentace (1)

D: Pro danou vrstevnatou síť ***B*** a množinu ***S*** vstupních vzorů určujících vstupní vektory $\vec{z}$:

- Skrytý neuron s vahami $(w_1, \ldots, w_n)$, prahem ϑ a přenosovou funkcí $f[\vec{w}, \vartheta](\vec{z})$ vytváří **uniformní reprezentaci** ***r***, jestliže:

$r = f[\vec{w}, \vartheta](\vec{z}) = const$ pro všechny v stupní vzory $\vec{x} \in S$

Prořezávání podle interní reprezentace (2)

D: Pro danou vrstevnatou síť $\boldsymbol{B}$ a množinu $\boldsymbol{S}$ vstupních vzorů určujících vstupní vektory $\vec{z}$:

- Skrytý neuron $i \in N$ s vahami $(\boldsymbol{w_{i1}, \ldots, w_{in}})$, prahem $\boldsymbol{\vartheta_i}$ a přenosovou funkcí $f_i[\vec{w}_i, \vartheta_i](\vec{z})$ vytváří reprezentaci $\boldsymbol{r_i}$ **identickou** k reprezentaci $\boldsymbol{r_j}$ vytvářené skrytým neuronem $j \in N$ s vahami $(\boldsymbol{w_{j1}, \ldots, w_{jn}})$, prahem $\boldsymbol{\vartheta_j}$ a přenosovou funkcí $f_j[\vec{w}_j, \vartheta_j](\vec{z})$, jestliže:

$$f_i[\vec{w}_i, \vartheta_i](\vec{z}) = f_j[\vec{w}_j, \vartheta_j](\vec{z}) \quad \text{pro všechny v stupní vzory } \vec{x} \in S$$

Prořezávání podle interní reprezentace (3)

D: Pro danou vrstevnatou síť $\boldsymbol{B}$ a množinu $\boldsymbol{S}$ vstupních vzorů určujících vstupní vektory $\vec{z}$:

- Skrytý neuron $i \in N$ s vahami $(\boldsymbol{w_{i1}}, \ldots, \boldsymbol{w_{in}})$, prahem $\boldsymbol{\vartheta_i}$ a přenosovou funkcí $f_i[\vec{w}_i, \vartheta_i](\vec{z})$ vytváří reprezentaci $\boldsymbol{r_i}$ **inverzní** k reprezentaci $\boldsymbol{r_j}$ vytvářené skrytým neuronem $j \in N$ s vahami $(\boldsymbol{w_{j1}}, \ldots, \boldsymbol{w_{jn}})$, prahem $\boldsymbol{\vartheta_j}$ a přenosovou funkcí $f_j[\vec{w}_j, \vartheta_j](\vec{z})$, jestliže:

$$f_i[\vec{w}_i, \vartheta_i](\vec{z}) = 1 - f_j[\vec{w}_j, \vartheta_j](\vec{z}) \quad \text{pro všechny v stupní vzory} \quad \vec{x} \in S$$

Prořezávání podle interní reprezentace (4)

D: Pro danou vrstevnatou síť ***B*** a množinu vstupních vzorů ***S*** :

redukovaná vrstva je vrstva, pro kterou platí, že:

- žádný neuron nevytváří uniformní reprezentaci,
- žádný neuron ***i*** nevytváří reprezentaci identickou k reprezentaci vytvářené jiným neuronem ***j*** a
- žádný neuron ***i*** nevytváří reprezentaci inverzní k reprezentaci vytvářené jiným neuronem ***j***.

Interní reprezentace vytvářená redukovanou vrstvou se nazývá **redukovaná**.

Prořezávání podle interní reprezentace (5)

D: Pro danou množinu vstupních vzorů S :

- vrstevnatá síť B je **redukovaná**, jestliže jsou všechny její skryté vrstvy redukované.
- vrstevnatá síť B je **ekvivalentní** k vrstevnaté síti B', jestliže je pro libovolný vstupní vzor $\vec{x} \in S$ skutečný výstup $\vec{y}_B$ sítě B roven skutečnému výstupu $\vec{y}_{B'}$ sítě B': $\vec{y}_B = \vec{y}_{B'}$

Prořezávání podle interní reprezentace (6)

V: Ke každé vrstevnaté síti B a množině vstupních vzorů S existuje ekvivalentní redukovaná vrstevnatá síť B'.

Důkaz (idea):

Popis konstrukce redukované vrstevnaté sítě B':

Nechť $B = (N, C, I, O, w, t)$ je původní vrstevnatá síť.

1. Postupná eliminace všech takových neuronů j, které vytvářejí uniformní reprezentaci r_j^k a přičtení součinu $w_{ij}\, r_j^k$ ke všem prahům ϑ_j v následující vrstvě.

Prořezávání podle interní reprezentace (7)

Důkaz (pokračování):

2. Postupná eliminace všech takových neuronů j, které vytvářejí reprezentaci r_j^{id} identickou k reprezentaci r_k vytvářené jiným neuronem k a přičtení vah w_{ij} ke každé váze w_{ik}, kde i je neuron v následující vrstvě.
3. Postupná eliminace všech takových neuronů j, které vytvářejí reprezentaci r_j^{in} inverzní k reprezentaci r_k vytvářené jiným neuronem k a nahrazení všech vah w_{ik}, kde i označuje neuron z následující vrstvy, rozdílem $w_{ik} - w_{ij}$ a přičtení váhy w_{ij} k prahu ϑ_j každého neuronu i.

Prořezávání podle interní reprezentace (8)

Důkaz (pokračování):

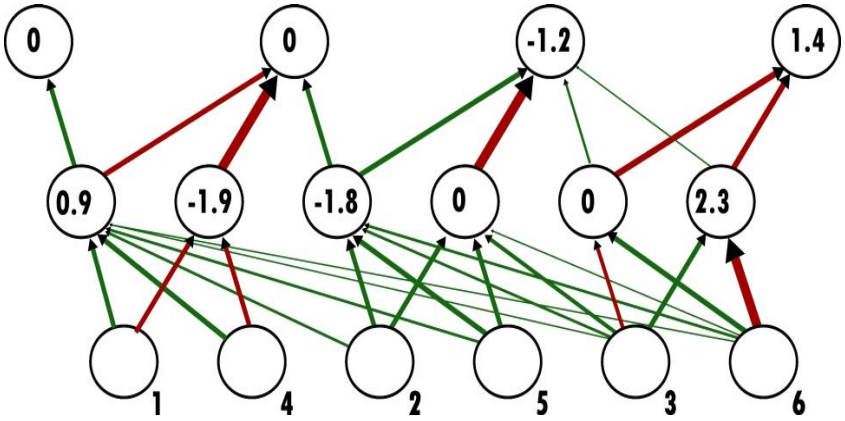
Potom bude pro libovolný vstupní vzor $\vec{x}$ skutečný výstup $\vec{y}_{B'}$ vrstevnaté sítě ***B´*** roven skutečnému výstupu $\vec{y}_B$ vrstevnaté sítě ***B***.

Vrstevnatá síť ***B´*** konstruovaná ze sítě ***B*** popsaným způsobem je redukovaná a ekvivalentní k ***B***.

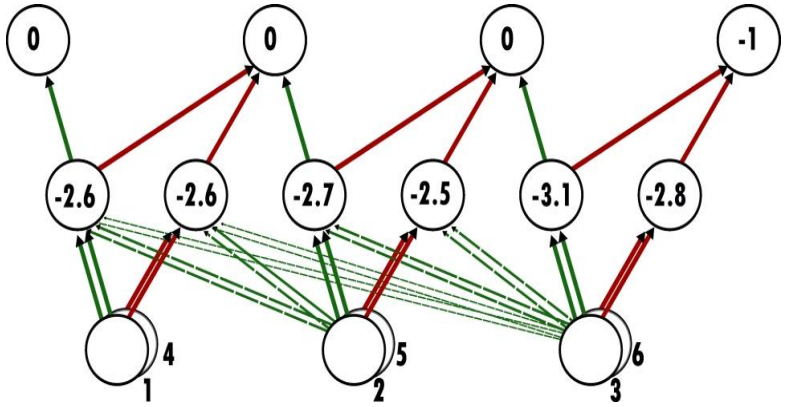
QED

Výsledky experimentů: binární sčítání

[5(≈(1,-1,1)) + 3(≈(-1,1,1)) = 8(≈(1,-1,-1,-1))]



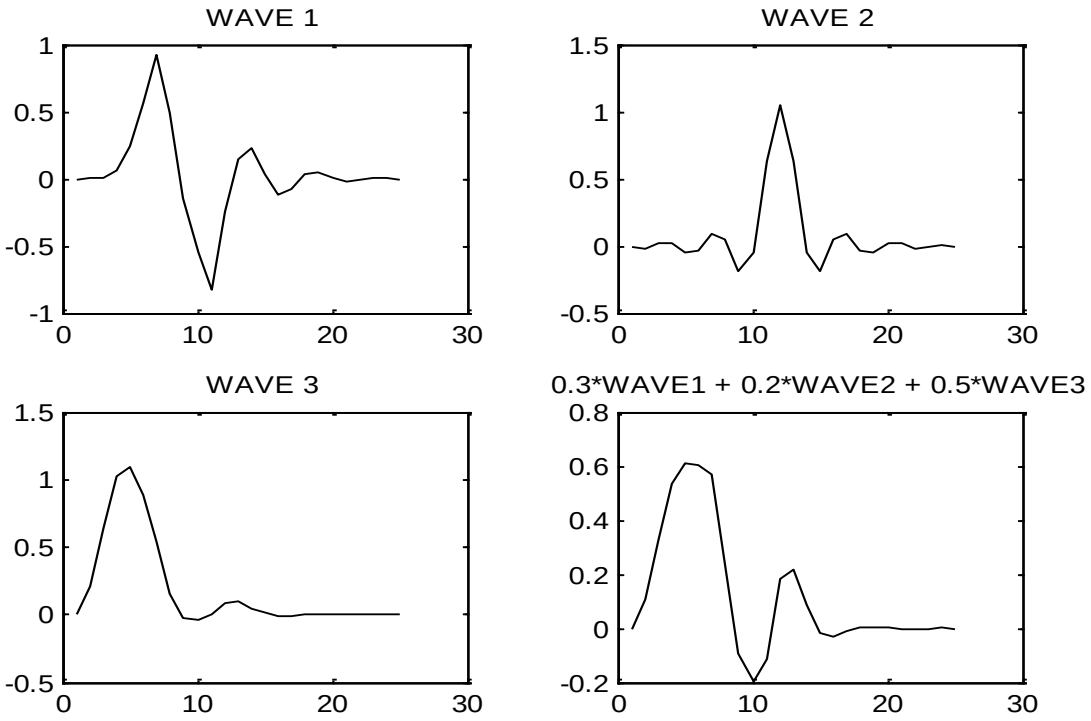
- SCG-s nápovědou (přenos na 2. výstupní neuron)
  - ‘přenos’ první a druhý výstupní bit – skryté neuronsy 1 a 3
  - funkce ostatních skrytých neuronů není tak zřejmá



- SCGIR-s nápovědou (přenos na 2. výstupní neuron)
  - ‘přenos’ pro vyšší výstupní bity – skryté neurony 1, 3, 5
  - podobná funkce je zřejmá pro jednotlivé výstupní neurony

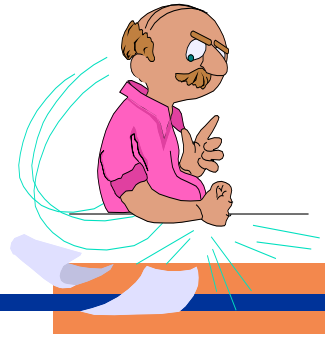
Akustická emise: simulace (s M. Chladou a Z. Převorovským)

MODELOVANÝ SIGNÁL

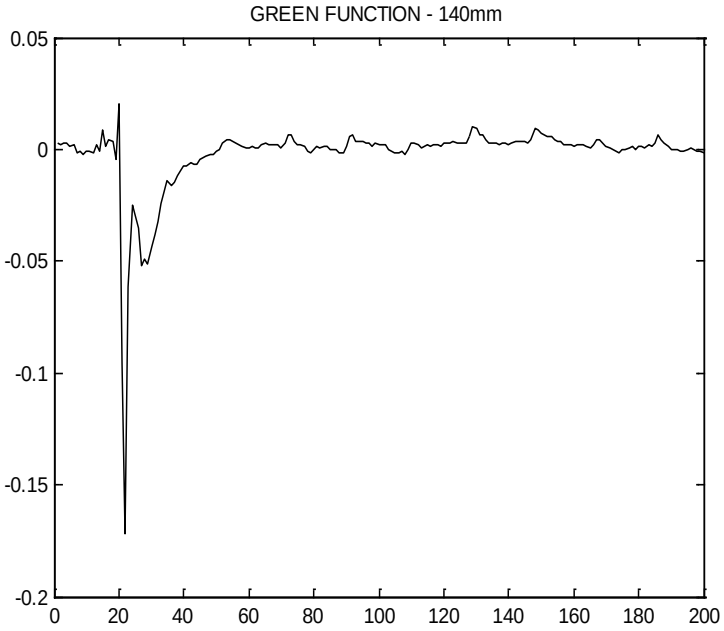


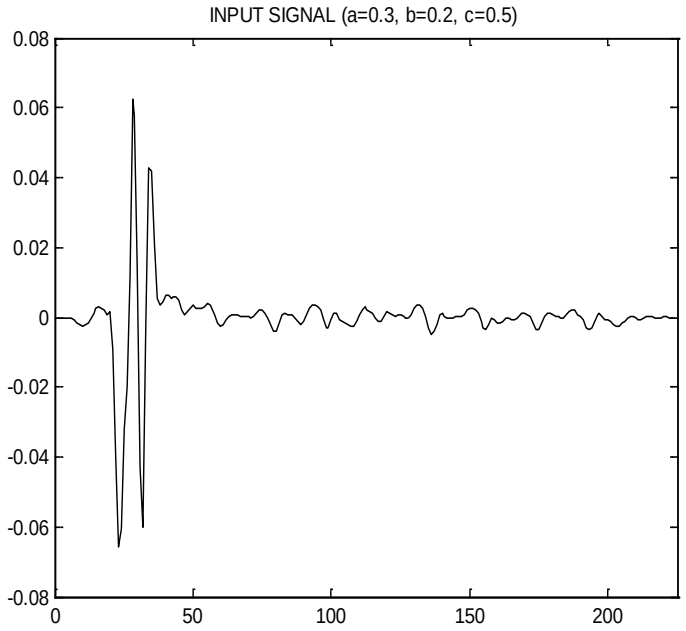
Simulovaná AE-data

(s M. Chladou a Z. Převorovským)



KONVOLUCE S GREENOVOU FUNKCÍ



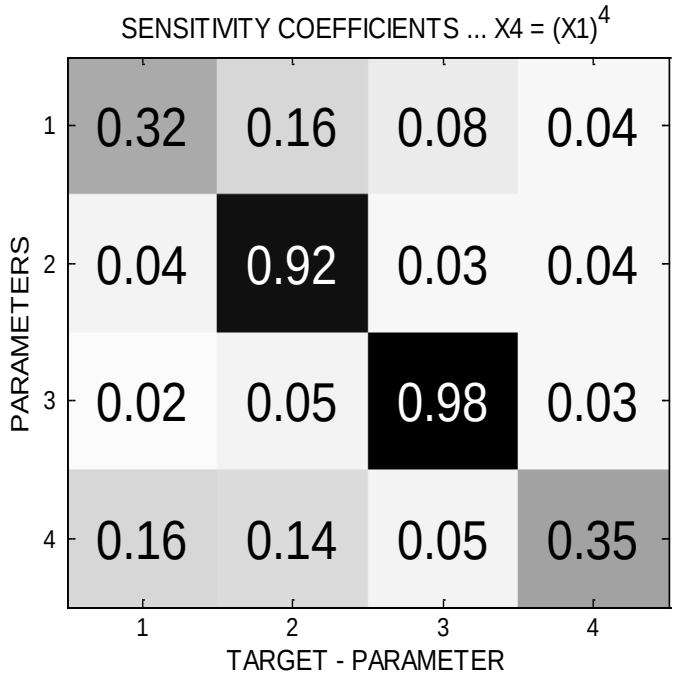


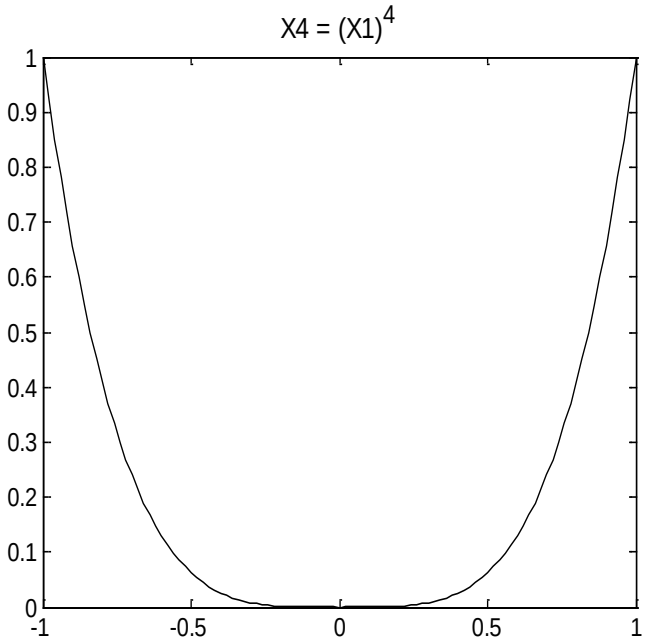
Model závislosti

(s M. Chladou a Z. Převorovským)

Celková **citlivost sítě** (přes Q vzorů) s-tého výstupu na r-tý vstup:

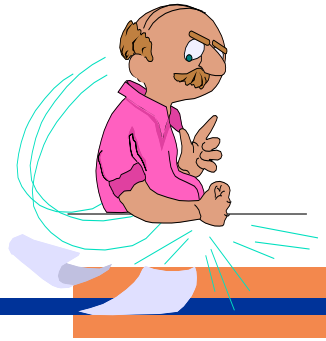
$$sens_r = 1/Q \sum_q \sum_s \left| \partial y_{q,s} / \partial y_{q,r} \right|$$

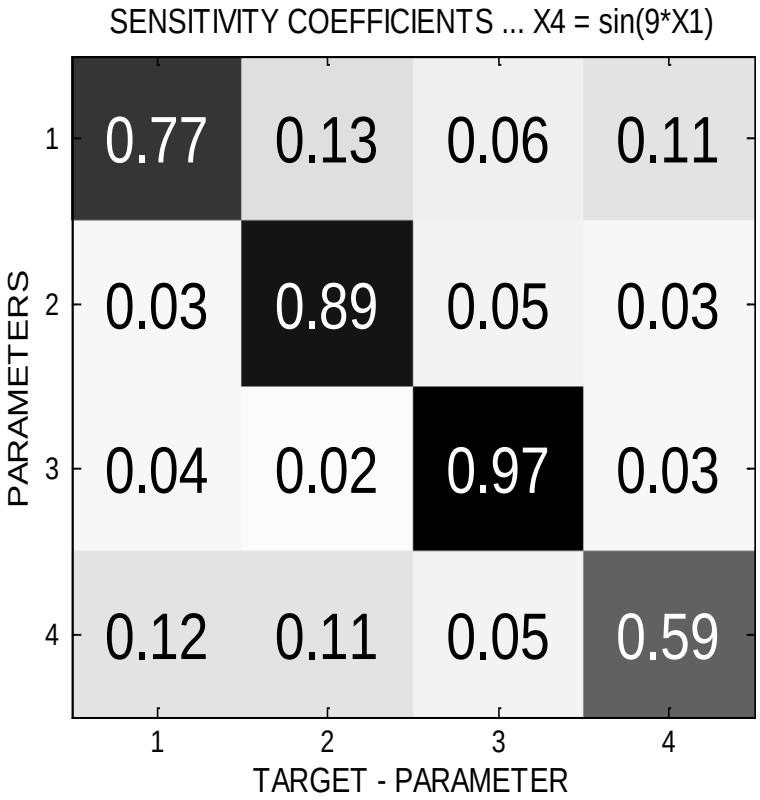


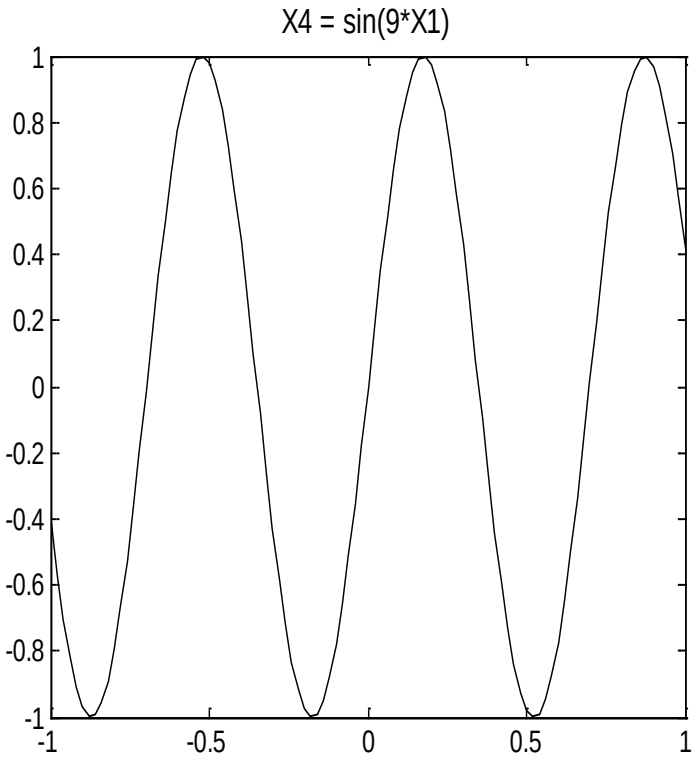


Model závislosti

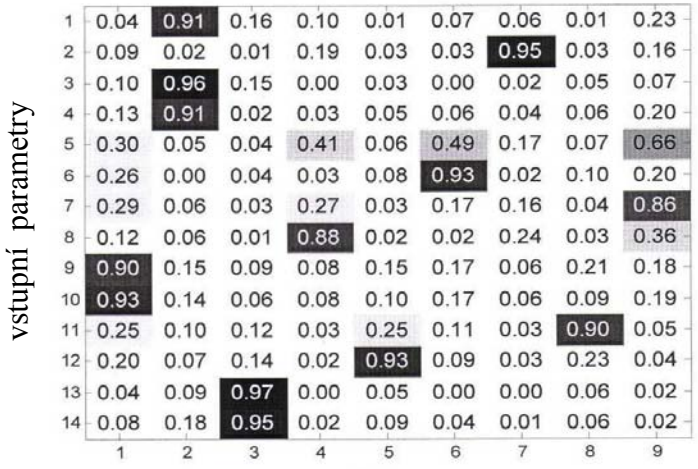
(s M. Chladou a Z. Převorovským)



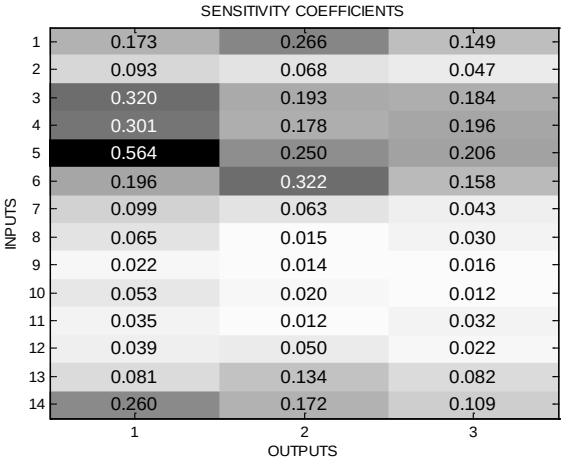




Faktorová vs. citlivostní analýza vstupních parametrů
(s M. Chladou a Z. Převorovským)



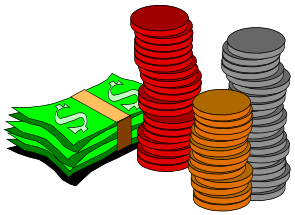
vybrané faktory



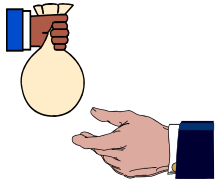
- **Vybráno 9 faktorů (“vysvětlují ” 98.4% proměnných)**
- **redukce lineárně závislých vstupních parametrů**

- **Vybráno 7 příznaků**
- **detekce nelineární závislosti vstupních parametrů (1, 3, 4, 5, 6, 13, 14)**

Analýza dat ze Světové banky



WDI-indikátory (indikátory vývoje ve světě)

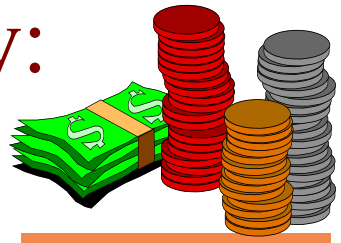


- každoročně zveřejňovány Světovou bankou
  - pomoc rozvojovým zemím při půjčkách / investicích
  - odhad stavu ekonomik a jejich vývoje v jednotlivých zemích
- původ údajů - neúplné a nepřesné údaje

používané techniky

- regresní analýza - lineární závislosti
- kategorizace států používaná v rozvinutých zemích(G. Ip, Wall Street Journal)
- kategorizace zemí podle HDP (Světová banka)
- Kohonenovy mapy (T. Kohonen, S. Kaski, G. Deboeck)

Analýza dat ze Světové banky: použité WDI-indikátory



- Implicitní deflace HDP
- Vnější zadluženost (% HNP)
- Celkové náklady na zadlužení (% z exportu zboží a služeb)
- Export high-tech technologií (% z vyvážených výrobků)
- Výdaje na armádu a zbrojení (% HNP)
- Výdaje na výzk. a výv. (% HNP)
- Celk. výd. na zdrav. (% HDP)
- Veř. výd. na školst. (% HNP)
- Očekávaná délka života u mužů
- Plodnost
- GINI-index (rozdělení příjmů a spotřeby)
- Uživ. internetu na 10000 obyvatel
- Počet mobilních telefonů na 1000 obyvatel
- HNP na obyvatele podle parity kupní síly (PPP)
- HNP na obyvatele (v USD)
- Růst HDP (% na obyvatele)

Analýza dat ze Světové banky: předzpracování

- 99 států se 16 WDI-indikátory
- po složkách transformace vzorů do intervalu (0,1) pomocí:

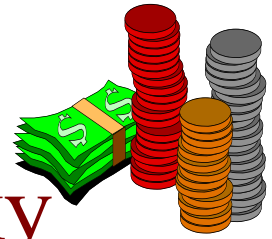
$$x' = \frac{x - x_{\min}}{x_{\max} - x_{\min}} \quad \text{a} \quad x'' = \frac{1}{1 + e^{-4(x' - 1/2)}}$$

minimum přes všechny vzory

maximum přes všechny vzory

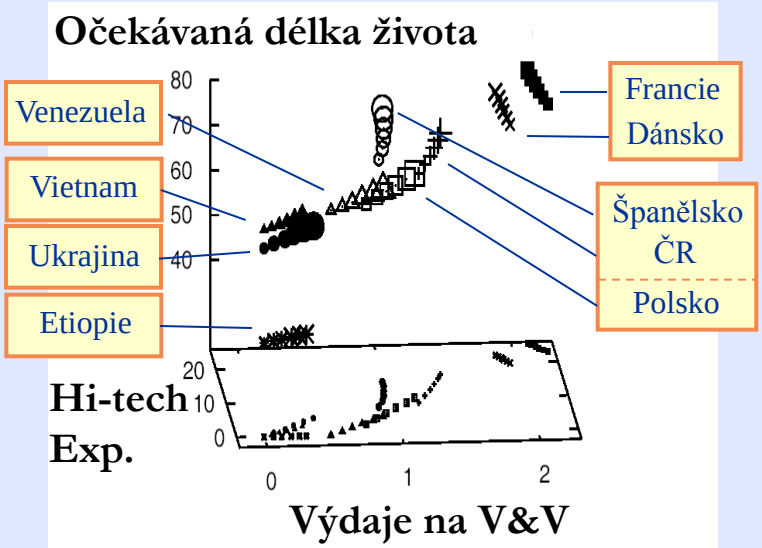
- FCM-klastrování: 7 shluků, $s = 1.4$
- řízené učení a iterativní rozpoznávání:
  - **99 (90+9)** států s **14 (13+1)** WDI-indikátory
  - GREN-síť **14-12-1**, BP-síť **13-10-1**; **500-600** cyklů učení

Analýza dat ze Světové banky: vliv indikátorů na stav ekonomiky



Indikátor	Síť 1	Síť 2
GDP defl.	0.0	0.0
Vněj. dluh	5.6	10.9
Celk. nákl. na dluh	5.5	8.1
Export high-tech	12.2	6.6
Vojenské výdaje	5.4	6.1
Výdaje na výzk. a výv.	16.0	12.0
Uživ. internetu	11.1	12.4
Mobily	8.3	10.0
GINI-index	7.1	3.9
Oček. délka života	12.3	7.6
Plodnost	4.4	5.0
Výdaje na zdrav.	6.1	10.9
Veř. výd. na školstv.	6.1	6.1

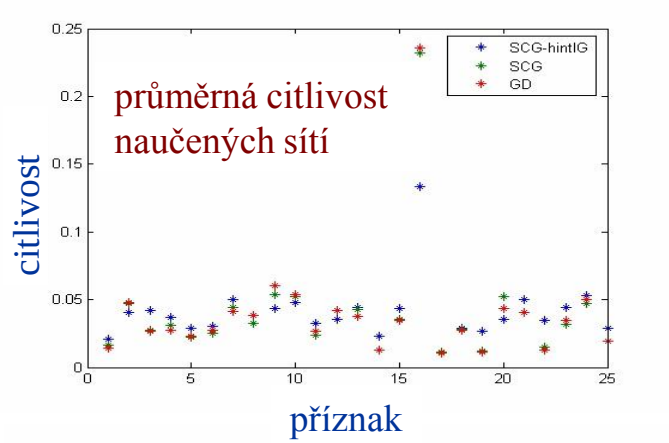
Relativní citlivost GREN-sítí

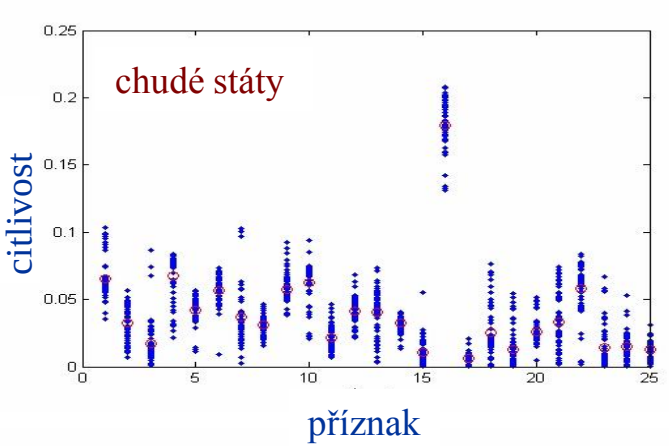


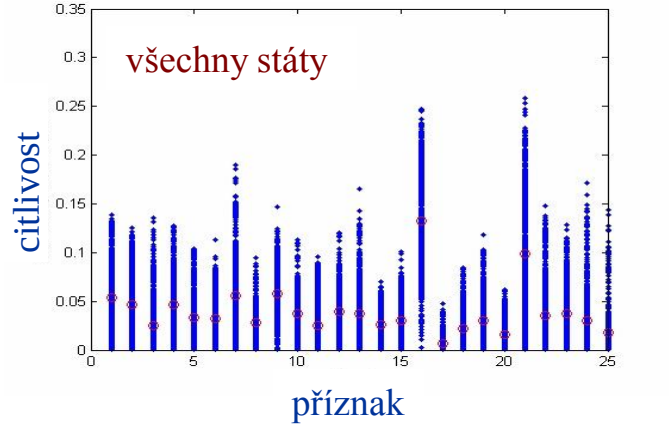
Iterativní rozpoznávání – vyšší HNP podle PPP (Síť 1)

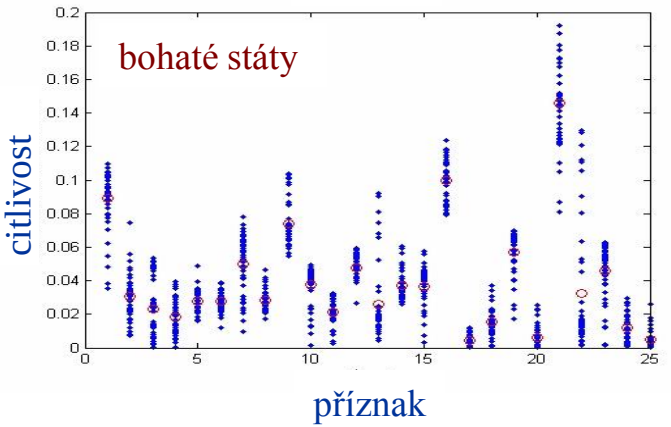
Citlivost na vstupní příznaky

(se Z. Reitermanovou)









Vzájemná závislost parametrů

(se Z. Reitermanovou)