Neuronové sítě

Doc. RNDr. Iveta Mrázová, CSc.

Katedra teoretické informatiky

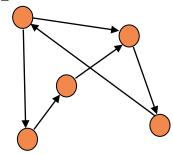
Matematicko-fyzikální fakulta

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
 - $w: C \to R$ 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

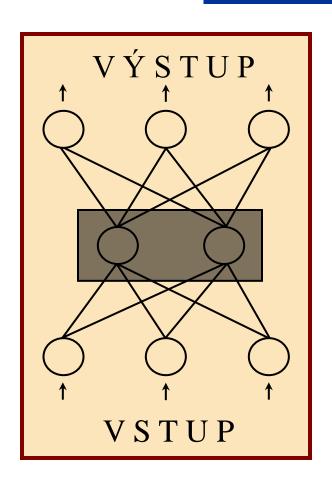
vyjadřuje odchylku mezi skutečnou a požadovanou odezvou sítě:

$$E = \frac{1}{2} \sum_{p} \sum_{j} (y_{j,p} - d_{j,p})^{2}$$
 odezva výstupní neurony skutečná odezva

 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

$$\Delta_{E} w_{ij} = -\frac{\partial E}{\partial w_{ij}} = -\frac{\partial E}{\partial y_{j}} \frac{\partial y_{j}}{\partial \xi_{j}} \frac{\partial \xi_{j}}{\partial w_{ij}} \xrightarrow{\text{potenciál neuronu } j}$$
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:

$$\begin{split} \Delta_E \, w_{ij} & \cong -\frac{\partial E}{\partial w_{ij}} = -\left(\sum_k \frac{\partial E}{\partial \xi_k} \frac{\partial \xi_k}{\partial y_j}\right) \frac{\partial y_j}{\partial \xi_j} \, y_i = \\ & = -\left(\sum_k \frac{\partial E}{\partial \xi_k} \frac{\partial}{\partial y_j} \sum_{j'} w_{j'k} \, y_{j'}\right) \frac{\partial y_j}{\partial \xi_j} \, y_i = \\ & = -\left(\sum_k \frac{\partial E}{\partial \xi_k} \, w_{jk}\right) \frac{\partial y_j}{\partial \xi_j} \, y_i = \\ & = \left(\sum_k \delta_k w_{jk}\right) f'(\xi_j) \, y_i = \delta_j \, y_i \end{split}$$

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
$$\delta_{j} = \begin{cases} (d_{j} - y_{j}) \lambda y_{j} (1 - y_{j}) & \text{pro výstupní neuron} \\ (\sum_{k} \delta_{k} w_{jk}) \lambda y_{j} (1 - y_{j}) & \text{pro skrytý neuron} \end{cases}$$

Algoritmus zpětného šíření (1)

Krok 1: Zvolte náhodné hodnoty synaptických vah

Krok 2: Předložte nový trénovací vzor ve tvaru:

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

Krok 3: Vypočtěte skutečný výstup aktivita neuronů v každé vrstvě je dána pomocí:

$$y_{j} = f(\xi_{j}) = \frac{1}{1 + e^{-\lambda \xi_{j}}}$$
, 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:

$$w_{ij}(t+1) = w_{ij}(t) + \alpha \delta_{j} y_{i} + \alpha_{m}(w_{ij}(t) - w_{ij}(t-1))$$

$$\delta_{j} = \begin{cases} (\alpha_{j} - y_{j}) \lambda y_{j}(1 - y_{j}) & \text{pro výstupní neuron} \\ \left(\sum_{k} \delta_{k} w_{jk}\right) \lambda y_{j}(1 - y_{j}) & \text{pro skrytý neuron} \end{cases}$$

$$w_{ij}(t) \dots v_{ij}(t) \dots v_{ij}(t) \dots v_{ij}(t) \text{ for skrytý neuron}$$

$$w_{ij}(t) \dots v_{ij}(t) \dots v_{ij}(t) \text{ pro skrytý neuron}$$

$$v_{ij}(t) \dots v_{ij}(t) \dots v_{ij}(t-1) \text{ pro skrytý neuron}$$

$$\alpha_{ij}(t) \dots v_{ij}(t-1) \text{ pro skrytý neuron}$$

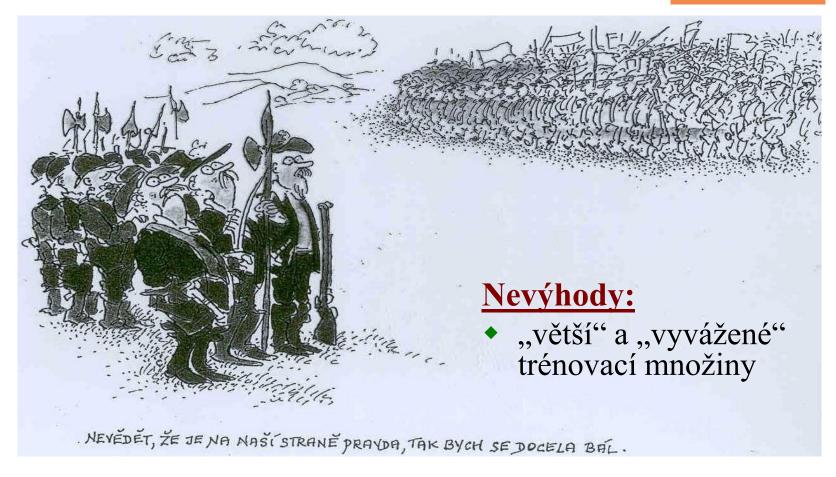
$$\alpha_{ij}(t) \dots v_{ij}(t-1) \text{ pro výstupní ne$$

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



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:

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

 x_i ... aktivita *i*-tého neuronu z předchozí vrstvy
 w_i ... váha od *i*-tého neuronu z předchozí vrstvy

Střední hodnota potenciálu skrytého neuronu:

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

- 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:

$$\sigma_{\xi}^{2} = E\{(\xi_{j})^{2}\} - E^{2}\{(\xi_{j})\} = E\{\left(\sum_{i=0}^{n} w_{ij} x_{i}\right)^{2}\} - 0 = 0$$

$$= \sum_{i,k=0}^{n} E\{(w_{ij}w_{kj} x_{i} x_{k})\} = \underbrace{\sum_{i=0}^{n} E\{(w_{ij}w_{kj} x_{i} x_{k})\}}_{\text{vz\'ajemn\'a nez\'avislost pro v\'sechna } j$$

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

Algoritmus zpětného šíření: volba počátečních vah (5)

IDEA - pokračování:

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

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

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

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

• N ... počet vah vedoucích k danému neuronu

Algoritmus zpětného šíření: volba počátečních vah (6)

IDEA - pokračování:

Směrodatná odchylka tedy bude odpovídat:

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

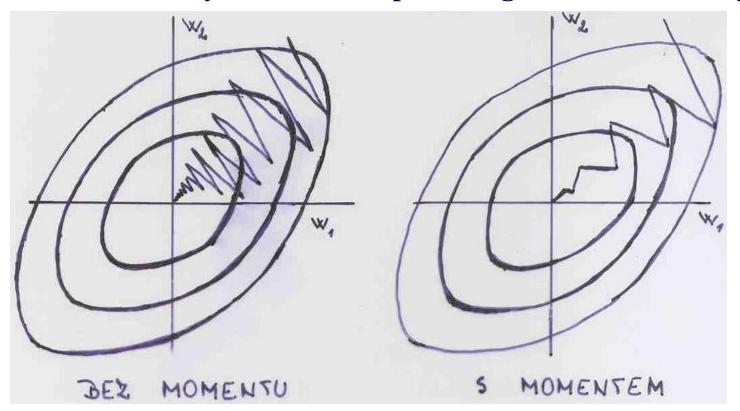
- Potenciál neuronu by měla být náhodná proměnná se směrodatnou odchylkou A (navíc nezávislou na počtu vah vedoucích do tohoto neuronu);
- Počáteční váhy by měly být voleny (zhruba) z intervalu:

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

• 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
- <u>Řešení:</u> 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

$$\Delta w_{k}(i+1) = -\alpha \frac{\partial E}{\partial w_{k}(i)} + \alpha_{m} \Delta w_{k}(i) =$$

$$= -\alpha \frac{\partial E}{\partial w_{k}(i)} + \alpha_{m} (w_{k}(i) - w_{k}(i-1))$$

kde: a parametr učení

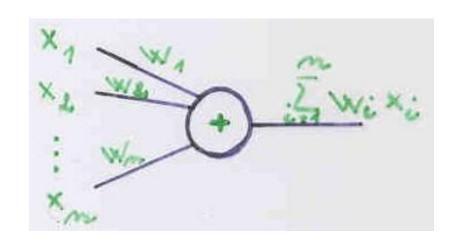
 α_m ... moment učení

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

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

\rightarrow MINIMALIZACE E:

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

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^TX

- → 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

<u>Řešení:</u>

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

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

1. Adaptivní parametr učení:

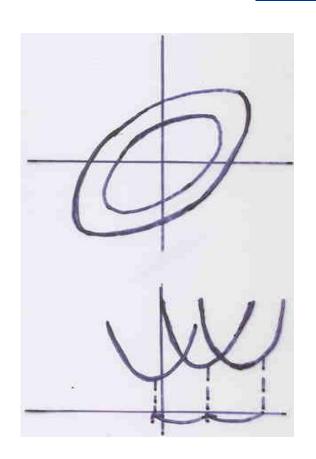
lokální parametr učení α_i pro každou váhu w_i

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:

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

• 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, ..., 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)

u, d ... předem zvolené pevné konstanty

$$\delta_i^{(k)} = (1 - \Phi) \nabla_i E^{(k)} + \Phi \delta_i^{(k-1)}$$
, kde Φ 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)

```
\alpha^+ ...... multiplikativní konstanta pro zvětšování parametru učení (\alpha^+ = 1.05)
\alpha^- ..... multiplikativní konstanta pro zmenšování parametru učení (\alpha^- = 2)
\alpha_{START} ... počáteční hodnota parametru \alpha_{ij}, \forall i, j (\alpha_{START} = 1.2)
\alpha_m ..... moment (\alpha_m = 0.3)
```

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

Krok 2: proved' 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: $\alpha_{ij}(t+1) = \alpha_{ij}(t) / \alpha^{-1}$
- 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

$$\vec{w} = (w_1, ..., w_n)$$
... 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)

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

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

 \rightarrow 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:

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

- 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:

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

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:

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

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

<u>Předpoklad:</u> 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:

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

- 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

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

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

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

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:

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

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

Relaxační metody (3)

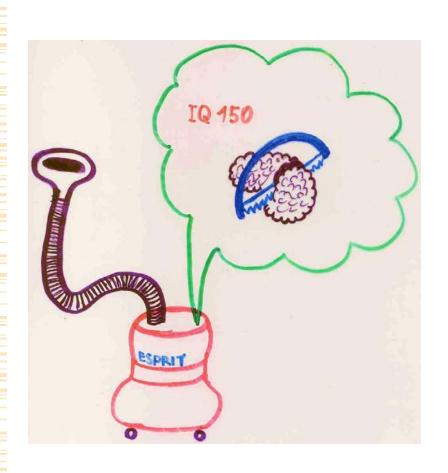
• Pokud byl předchozí potenciál $\sum_{k=1}^{m} w_k x_k$, jsou nové váhy dány pomocí:

$$w'_{k} = w_{k} \cdot \frac{s^{-1} \left(o_{i} + \Delta o_{i}\right)}{\sum_{k=1}^{m} w_{k} x_{k}}$$

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

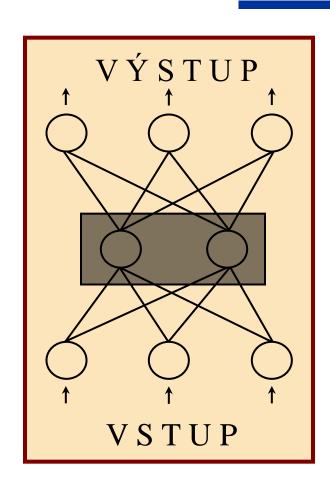
(to lze poněkud omezit zavedením stochastických faktorů anebo kombinací s metodou pro perturbaci vah)

Interní reprezentace znalostí



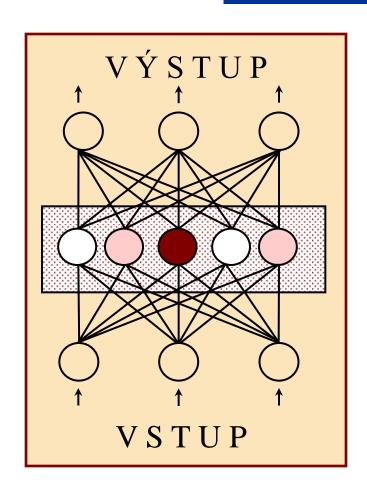
- počet neuronů a generalizační schopnosti sítě
 - → prořezávání a doučování

Interní reprezentace znalostí





Kondenzovaná interní reprezentace



• interpretace aktivity skrytých neuronů:

- 1 ←→ aktivní ←→ ANO
- \bigcirc 0 \longleftrightarrow pasivní \longleftrightarrow NE
- $\begin{array}{cccc}
 & \frac{1}{2} & \longleftrightarrow & \text{tich\'y} & \longleftrightarrow \\
 & & \longleftrightarrow & ,, \text{nelze rozhodnout"}
 \end{array}$
 - průhledná struktura sítě
 - detekce nadbytečných neuronů a prořezávání
 - lepší generalizace

Kondenzovaná interní reprezentace

- **D:** Pro vrstevnatou síť \boldsymbol{B} zpracovávající vstupní vzor \vec{x} :
 - Skrytý neuron s vahami $(w_1, ..., w_n)$, prahem θ , vstupním vzorem \vec{z} a přenosovou funkcí $f[\vec{w}, \theta](\vec{z})$ vytváří **reprezentaci** $r: r = y = f[\vec{w}, \theta](\vec{z})$
 - Vektor \vec{r} reprezentací vytvořených vrstvou skrytých neuronů se nazývá **interní reprezentace** \vec{x}

Kondenzovaná interní reprezentace

D: Pro vrstevnatou síť B:

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

Požadavky na vynucování kondenzované interní reprezentace

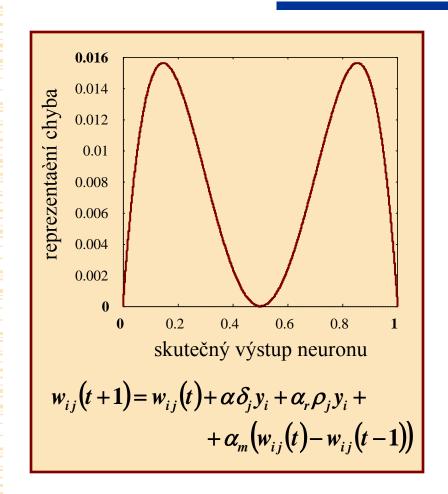
• formulace "požadovaných vlastností" ve formě cílové funkce:

standardní chybová funkce
$$G = E + c_s F \leftarrow \text{reprezentační chybová funkce}$$
velikost vlivu F na G

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

$$F = \sum_{p} \sum_{h} y_{h,p}^{s} (1 - y_{h,p})_{h,p}^{s} (y_{h,p} - 0.5)^{2}$$
vzory
skryté neurony
pasivní stav
aktivní stav

Vliv parametrů na vytváření kondenzované interní reprezentace



- 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

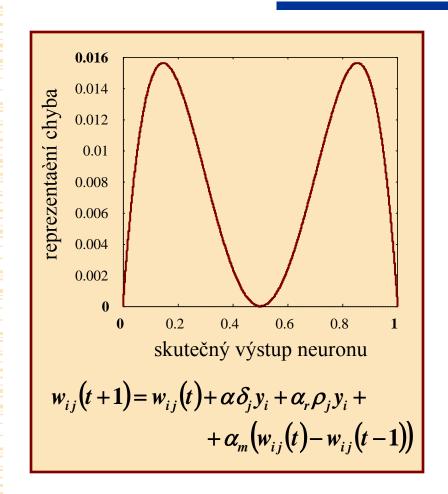
Chybový člen pro posilování kondenzované interní reprezentace

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

$$\rho_{j} = \begin{cases} 0 & \text{pro výstup níneurony} \\ -\left[2(s+1)y_{j} (1-y_{j}) - \frac{s}{2}\right] \cdot y_{j}^{s} (1-y_{j})^{s} (y_{j} - 0.5) \\ & \text{pro neurony z nejvy šší skryté vrstvy} \end{cases}$$

$$\left(\sum_{k} \rho_{k} w_{jk}\right) y_{j} (1-y_{j}) \\ & \text{pro ostatní skryté neurony} \end{cases}$$

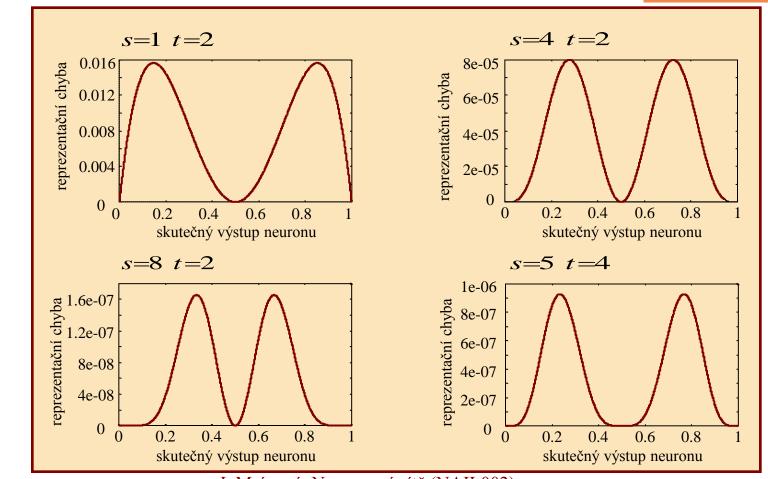
Vliv parametrů na vytváření kondenzované interní reprezentace



- 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 $(y_j (1-y_j))$:

$$\rho_{j} = \begin{cases} 0 & \text{pro v\'y stup n\'ineurony} \\ -\left(1-2y_{j}\right)y_{j}\left(1-y_{j}\right) \\ & \text{pro neurony z nejvy \'s\'iskry t\'evrstvy} \\ \left(\sum_{k}\rho_{k}w_{jk}\right)y_{j}\left(1-y_{j}\right) \\ & \text{pro ostatn\'iskry t\'eneurony} \end{cases}$$

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:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{\substack{p \ q \neq p \ j \ \text{ovzory}}} \sum_{\substack{q \neq p \ \text{skryt\'e neurony}}} \sum_{\substack{p \ q \neq p \ \text{ov\'est.} \ \text{neurony}}} \sum_{\substack{p \ q \neq p \ \text{ov\'est.} \ \text{ekonst. pro dan\'e p} \ \text{ekonst. pro dan\'e p}}} \sum_{\substack{p \ \text{ov\'est.} \ \text{ekonst. pro dan\'e p} \ \text{ekonst. pro dan\'e p}}} \sum_{\substack{p \ \text{ov\'est.} \ \text{oneurony}}} \sum_{\substack{p \ \text{ov\'est.} \ \text{ov\'est.} \ \text{ov\'est.}}} \sum_{\substack{p \ \text{ov\'est.} \ \text{ov\'est.}}}} \sum_{\substack{p \ \text{ov\'est.} \ \text{ov\'est.}}} \sum_{\substack{p \ \text{ov\'est.} \ \text{ov\'est.}}} \sum_{\substack{p \ \text{ov$$

Prořezávání podle interní reprezentace (1)

- **D:** Pro danou vrstevnatou síť \boldsymbol{B} a množinu \boldsymbol{S} vstupních vzorů určujících vstupní vektory \vec{z} :
 - Skrytý neuron s vahami $(w_1, ..., w_n)$, prahem g a přenosovou funkcí $f[\vec{w}, g](\vec{z})$ vytváří uniformní reprezentaci r, jestliže:

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

Prořezávání podle interní reprezentace (2)

- **D:** Pro danou vrstevnatou síť B a množinu S vstupních vzorů určujících vstupní vektory \vec{z} :
 - Skrytý neuron $i \in N$ s vahami $(w_{il}, ..., w_{in})$, prahem g_i a přenosovou funkcí $f_i[\vec{w}_i, g_i](\vec{z})$ vytváří reprezentaci r_i identickou k reprezentaci r_j vytvářené skrytým neuronem $j \in N$ s vahami $(w_{jl}, ..., w_{jn})$, prahem g_j a přenosovou funkcí $f_j[\vec{w}_j, g_j](\vec{z})$, jestliže:

$$f_i[\vec{w}_i, \theta_i](\vec{z}) = f_i[\vec{w}_i, \theta_i](\vec{z})$$
 pro všechny v stupní vzory $\vec{x} \in S$

Prořezávání podle interní reprezentace (3)

- **D:** Pro danou vrstevnatou síť B a množinu S vstupních vzorů určujících vstupní vektory \vec{z} :
 - Skrytý neuron $i \in N$ s vahami $(w_{i1}, ..., w_{in})$, prahem θ_i a přenosovou funkcí $f_i[\vec{w}_i, \theta_i](\vec{z})$ vytváří reprezentaci r_i inverzní k reprezentaci r_j vytvářené skrytým neuronem $j \in N$ s vahami $(w_{j1}, ..., w_{jn})$, prahem θ_j a přenosovou funkcí $f_j[\vec{w}_j, \theta_j](\vec{z})$, jestliže:

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

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 \boldsymbol{B} je **ekvivalentní** k vrstevnaté síti \boldsymbol{B}' , jestliže je pro libovolný vstupní vzor $\vec{x} \in S$ skutečný výstup \vec{y}_B sítě \boldsymbol{B} roven skutečnému výstupu $\vec{y}_{B'}$ sítě \boldsymbol{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_i každého neuronu i.

Prořezávání podle interní reprezentace (8)

Důkaz (pokračování):

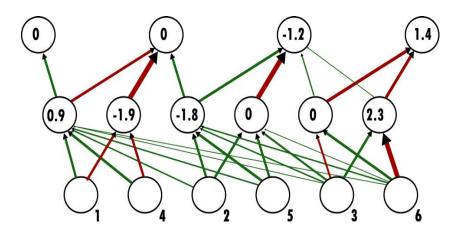
Potom bude pro libovolný vstupní vzor \vec{x} skutečný výstup $\vec{y}_{B'}$ vrstevnaté sítě \vec{B} roven skutečnému výstupu \vec{y}_{B} vrstevnaté sítě \vec{B} .

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

QED

Výsledky experimentů: binární sčítání

$$[5(\approx(1,-1,1)) + 3(\approx(-1,1,1)) = 8(\approx(1,-1,-1,-1))]$$

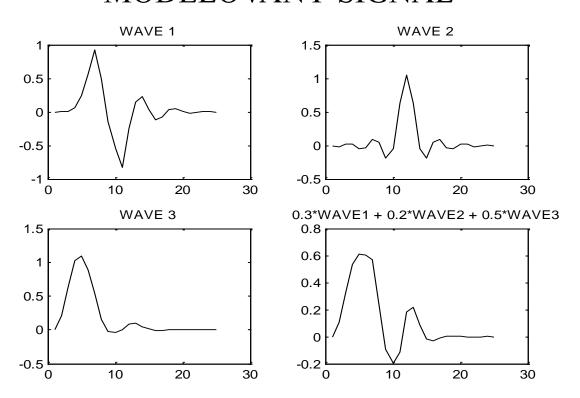


0 0 0 -1

- 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

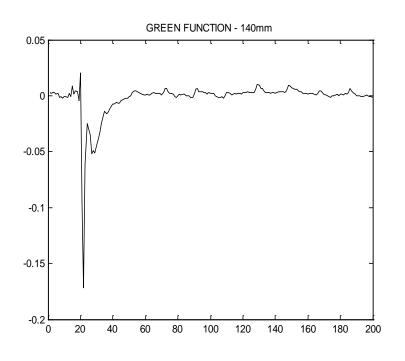


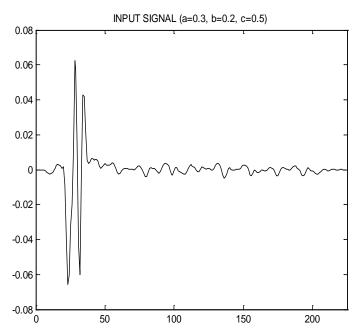
Simulovaná AE-data

(s M. Chladou a Z. Převorovským)



KONVOLUCE S GREENOVOU FUNKCÍ





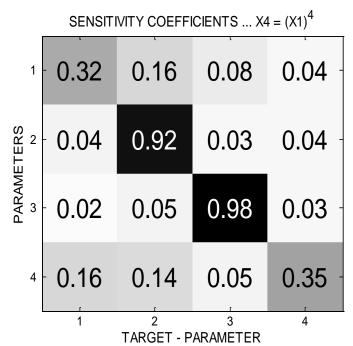
Model závislosti

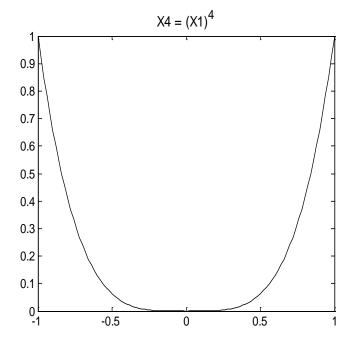
(s M. Chladou a Z. Převorovským)



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

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



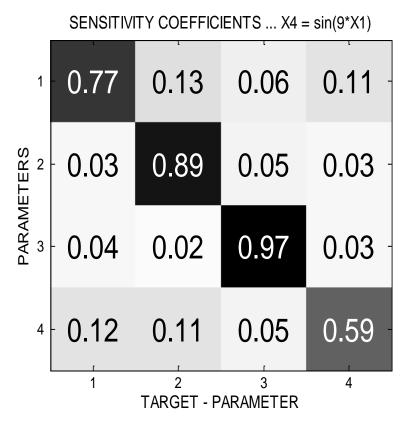


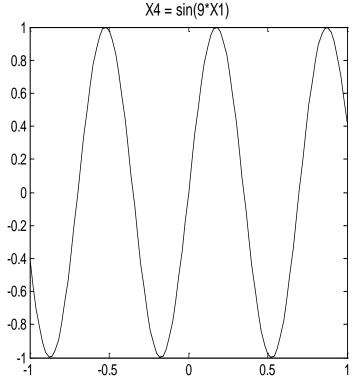
I. Mrázová: Neuronové sítě (NAIL002)

Model závislosti

(s M. Chladou a Z. Převorovským)







Faktorová vs. citlivostní analýza vstupních parametrů

(s M. Chladou a Z. Převorovským)

	1	2	3	4	5	6	7	8	9
14	0.08	0.18	0.95	0.02	0.09	0.04	0.01	0.06	0.02
13	0.04	0.09	0.97	0.00	0.05	0.00	0.00	0.06	0.02
12	0.20	0.07	0.14	0.02	0.93	0.09	0.03	0.23	0.04
11	0.25	0.10	0.12	0.03	0.25	0.11	0.03	0.90	0.05
10	0.93	0.14	0.06	0.08	0.10	0.17	0.06	0.09	0.19
9	0.90	0.15	0.09	0.08	0.15	0.17	0.06	0.21	0.18
8	0.12	0.06	0.01	0.88	0.02	0.02	0.24	0.03	0.36
7	0.29	0.06	0.03	0.27	0.03	0.17	0.16	0.04	0.86
6	0.26	0.00	0.04	0.03	0.08	0.93	0.02	0.10	0.20
5	0.30	0.05	0.04	0.41	0.06	0.49	0.17	0.07	0.66
4	0.13	0.91	0.02	0.03	0.05	0.06	0.04	0.06	0.20
3	0.10	0.96	0.15	0.00	0.03	0.00	0.02	0.05	0.07
2	0.09	0.02	0.01	0.19	0.03	0.03	0.95	0.03	0.16
1	0.04	0.91	0.16	0.10	0.01	0.07	0.06	0.01	0.23

			SE	NSITIVITY COEFFICIEN	TS
	1	-	0.173	0.266	0.149 -
	2	-	0.093	0.068	0.047 -
	3	-	0.320	0.193	0.184 -
	4	_	0.301	0.178	0.196 -
	5		0.564	0.250	0.206 -
	6	-	0.196	0.322	0.158 -
INPUTS	7	-	0.099	0.063	0.043 -
	8	-	0.065	0.015	0.030 -
	9	-	0.022	0.014	0.016 -
	10	-	0.053	0.020	0.012 -
	11	-	0.035	0.012	0.032 -
	12	-	0.039	0.050	0.022 -
	13	-	0.081	0.134	0.082 -
	14	-	0.260	0.172	0.109 -
			1	2 OUTPUTS	3

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:

$$x' = \frac{x - x_{\min}}{x_{\max} - x_{\min}}$$

$$\uparrow \qquad \text{minimum přes všechny vzory}$$

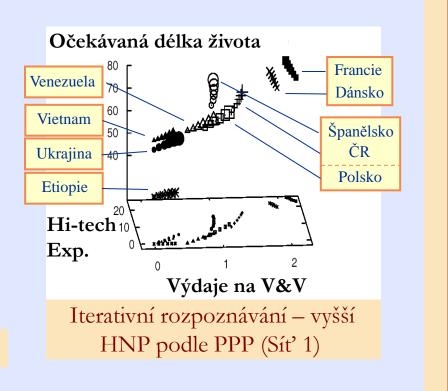
$$\text{maximum přes všechny vzory}$$

- 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

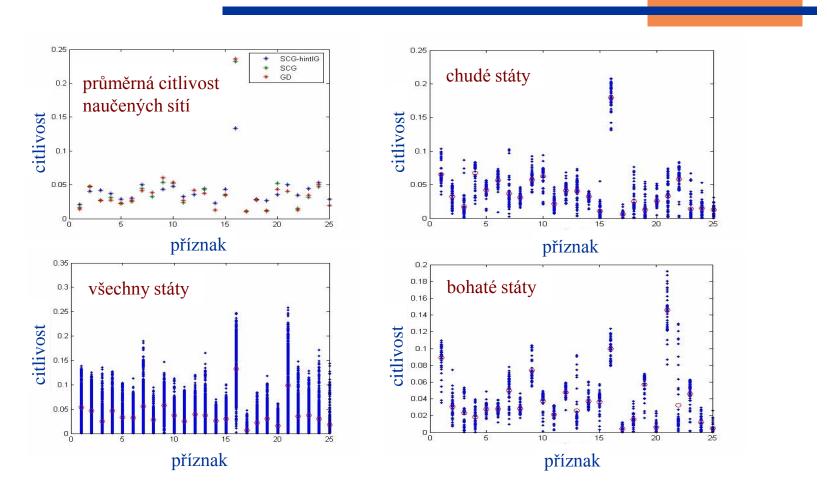
Indikátor	Síť 1	Síť 2
GDP defl.	0.0	0.0
Vněj. dluh	5.6	10.9
Celk. nákl. na dluh	5.5	8.1
Export high-tech	12.2	6.6
Vojenské výdaje	5.4	6.1
Výdaje na výzk. a výv.	16.0	12.0
Uživ. internetu	11.1	12.4
Mobily	8.3	10.0
GINI-index	7.1	3.9
Oček. délka života	12.3	7.6
Plodnost	4.4	5.0
Výdaje na zdrav.	6.1	10.9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

Relativní citlivost GREN-sítí



Citlivost na vstupní příznaky

(se Z. Reitermanovou)



Vzájemná závislost parametrů

(se Z. Reitermanovou)

