

# 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

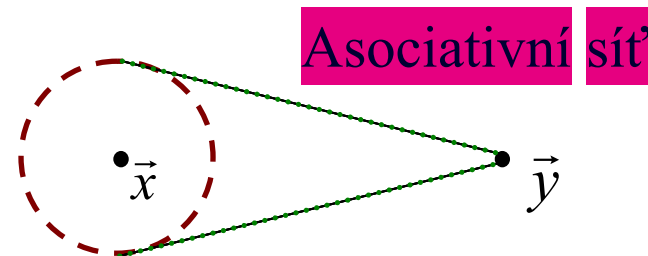
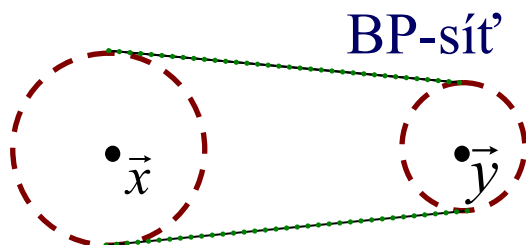
Matematicko-fyzikální fakulta

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



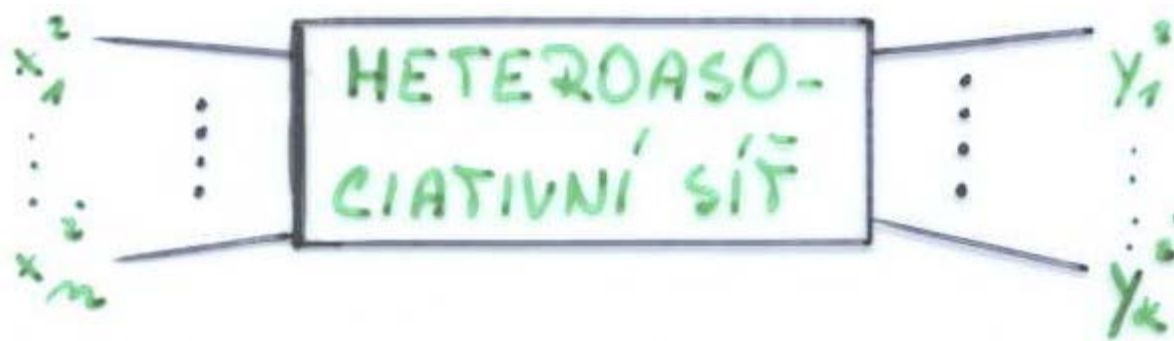
# Asociativní sítě a asociativní paměti (2)

- ◆ 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

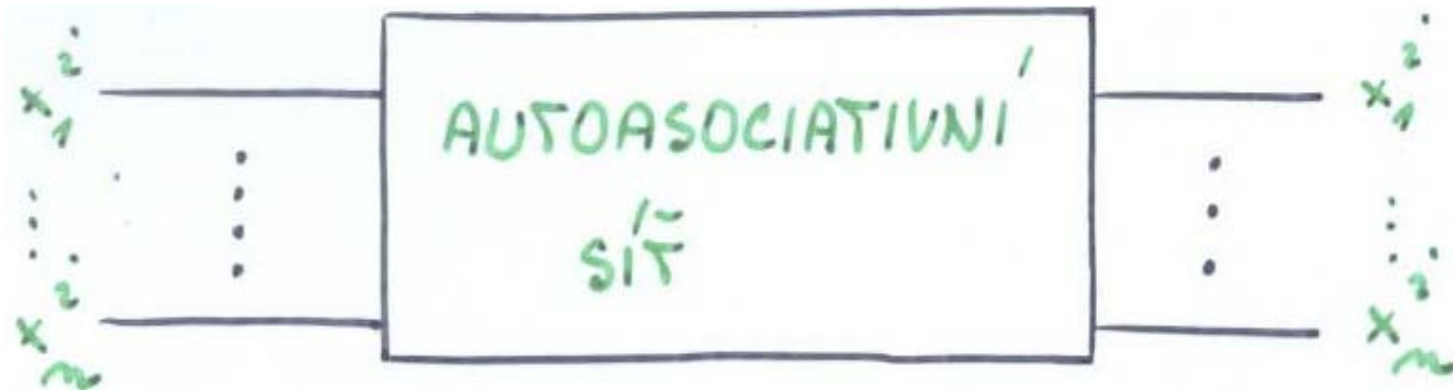
# Heteroasociativní síť



Zobrazují  $m$  vstupních vzorů  $\vec{x}^1, \dots, \vec{x}^m$  z  $n$ -rozměrného prostoru na  $m$  výstupních vektorech  $\vec{y}^1, \dots, \vec{y}^m$  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  $i$ )

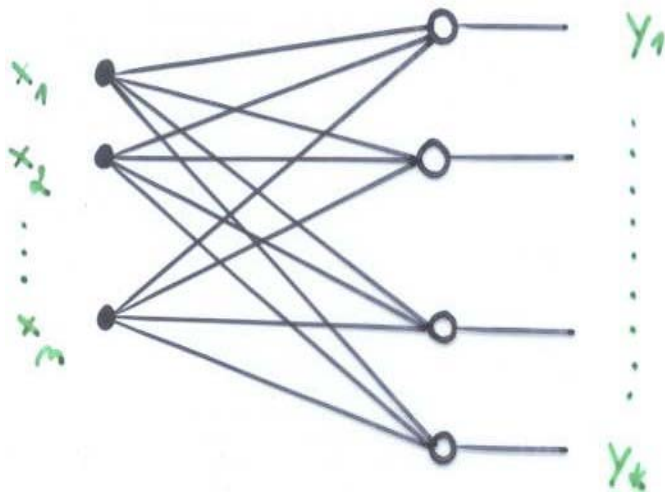
Cílem je identifikace třídy vstupního vzoru



# 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)

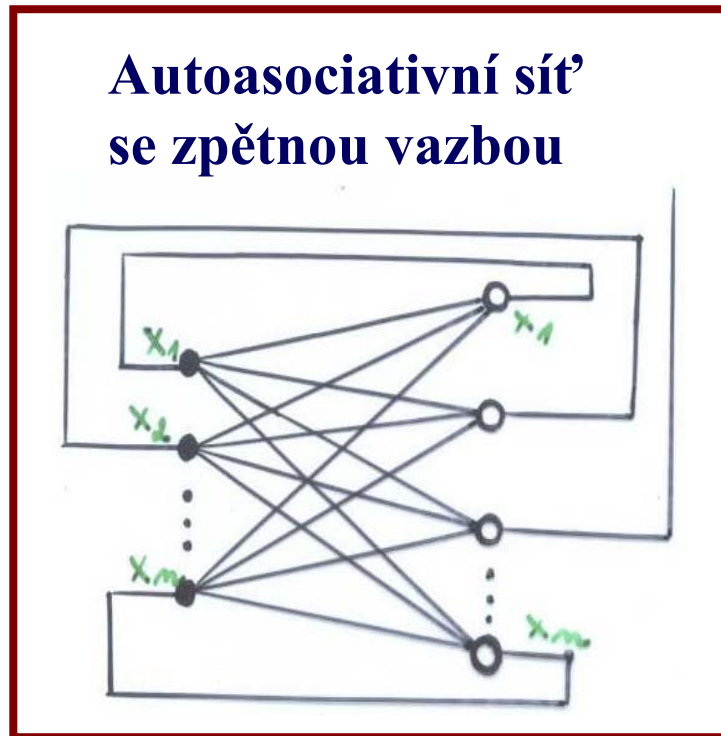
# Struktura asociativní paměti (3)

→ hledáme takovou matici vah  $W$ , 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 nejblížeším 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  $90^\circ$  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 buďno, že  $\lambda_1$  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  $\alpha$  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 -  $\lambda_1$

→ 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  $\alpha_1$

→  $\vec{x}^1$  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  $sgn$

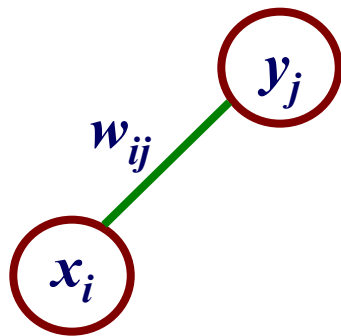
## Cíl:

- ♦ 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)



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

$\gamma \dots$  parametr učení

$W \dots$  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

$$W = [w_{ij}]_{n \times k} = [\mathbf{x}_i^1 \mathbf{y}_j^1]_{n \times k}$$

# 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:

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

- ♦ pro  $-\vec{x}^1$  je výstup sítě:

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



# 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  $\vec{y}^l$  :  $W^l = [\vec{x}_i^l \vec{y}_j^l]_{n \times k}$

# 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

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

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:

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

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

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

- ♦ Tato podmínka bude splněna, pokud bude absolutní hodnota všech složek perturbačního členu  $\sum_{l \neq p}^m \vec{y}^l \cdot \frac{(\vec{x}^l \cdot \vec{x}^p)}{(\vec{x}^p \cdot \vec{x}^p)}$  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

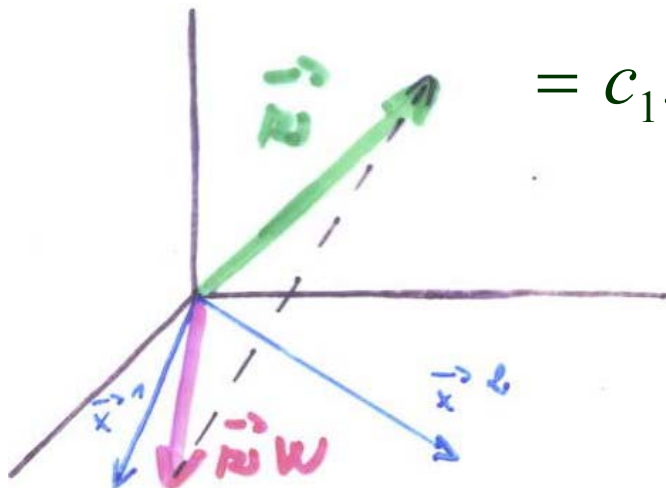
# Geometrická interpretace Hebbovského učení

- ♦ 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: 
$$\begin{array}{cccc} 1 & -1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & 1 \end{array} \rightarrow 2$$
  - 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

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

$p_h$  ... 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  $\sigma = \sqrt{m/n}$
- ♦ 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)

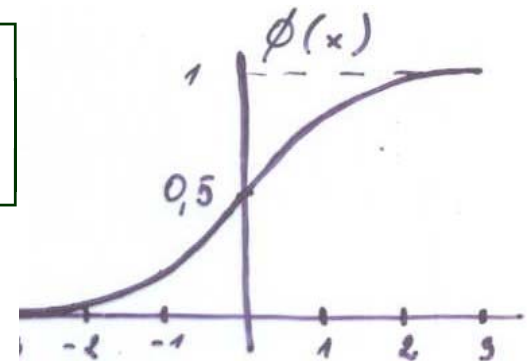
♦ Tedy:  $P \{ | (*) | > 1 \} = 2 \left[ 1 - \Phi \left( \frac{1}{\sqrt{m/n}} \right) \right]$

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

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

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

ukládání vzorů pak nepokrývá 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  $\|XW - Y\|^2$   
( $\sim$  součet druhých mocnin jednotlivých prvků)

minimalizace pomocí  $W = \tilde{X}Y$

$\tilde{X} \dots$  Pseudoinverzní matice k  $X$

( $\sim$  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  $E = \|XW - Y\|^2$

→  $E$  lze vyjádřit jako  $E = \overset{\text{stopa matice}}{\text{tr}}(S)$ , 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:

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

# 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:  $\{(\vec{x}_p, \vec{d}_p); p = 1, \dots, P\}$ 
    - $\vec{x}_p$ .... 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  $W$  v případě, že  $XX^T$  nemá  $m$  lineárně nezávislých řádků)

# Pseudoinverzní matice – použití (4)

- ◆ Řešení může být víc  $\rightarrow$  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  $XX^T + \lambda I$  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)

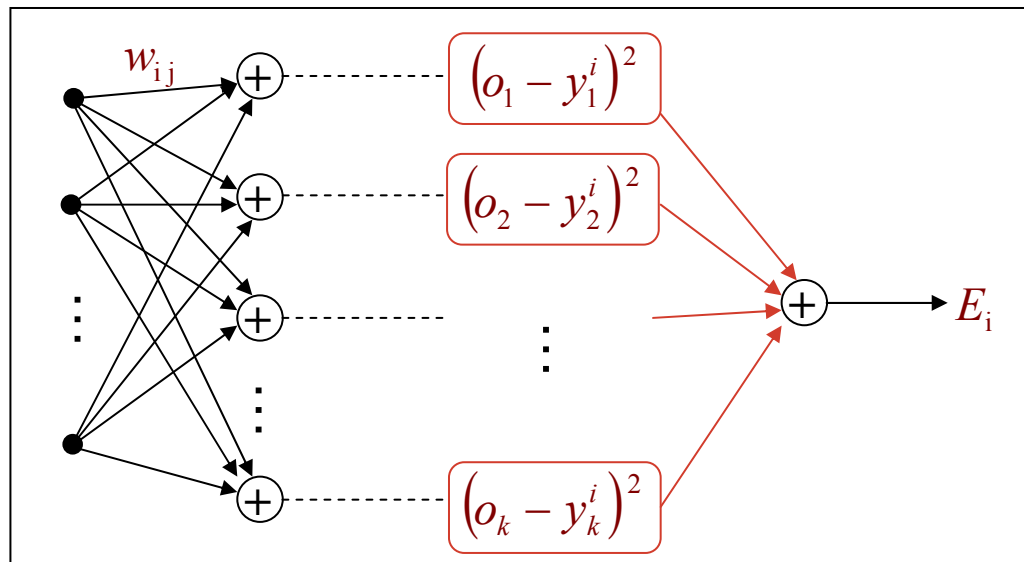
- ♦ Limitně pro  $\lambda \rightarrow 0$  :

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

- $\tilde{X}$ .... 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 sítě 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  $\|\mathbf{XW} - \mathbf{Y}\|^2$